UNIVERSIDADE DO MINHO

Física Quântica I / Mecânica Quântica

Exame de Recurso (18 de junho 2022)

Duração: 2h 00m + 30m de tolerância

Soluções comentadas

por Vitor M. Pereira

Instruções

1. Escreva o seu número de identificação **neste enunciado** (na caixa abaixo) e **também** nas folhas de respostas que submeter.
2. Este enunciado tem **6** páginas (incluindo esta) e está organizado em **2** partes: a **Parte I** começa na pág. 3 e tem **10** questões de escolha múltipla; a **Parte II** começa na pág. 5 e contém **4** problemas.
3. Responda às questões da **Parte I diretamente na folha do enunciado**.
4. Responda às questões da **Parte II apenas nas folhas de resposta** fornecidas, **justificando** adequadamente ou apresentando os cálculos que efetuar. Não serão consideradas respostas ou anotações na folha do enunciado relativamente à Parte II.
5. No final, deverá **entregar** este **enunciado** juntamente com as **folhas de resposta**.
6. A pontuação (percentagem) de cada questão é indicada no cabeçalho de cada problema.
7. É permitido a cada aluno assistir-se de uma folha individual com **notas manuscritas por si**, as quais podem ocupar as 2 páginas de **apenas uma folha A4**. As folhas de notas serão inspecionadas no decorrer do exame. Não são permitidos quaisquer outros materiais ou dispositivos de apoio.
8. Só será permitida a saída da sala depois de decorridos os primeiros 30 minutos do exame.

Identificação (nº de aluno)

[– página deliberadamente em branco –]

Parte I (30%, 3% cada)

Assinale a resposta correta com $\boxed{\text{X}}$ diretamente nesta folha.

1) Em física quântica, as quantidades físicas são sempre representadas por operadores

- ☐ A Que comutam
- ☒ B Hermíticos
- ☐ C Hamiltonianos
- ☐ D Unitários

2) O comutador dos operadores momento e posição é

- ☒ A $[\hat{P}, \hat{X}] = -i\hbar$
- ☐ B $[\hat{P}, \hat{X}] = i\hbar$
- ☐ C $[\hat{P}, \hat{X}] = \hbar$
- ☐ D $[\hat{P}, \hat{X}] = -\hbar$

3) Quando duas observáveis comutam, elas dizem-se

- ☐ A Unitárias
- ☐ B Conjugadas
- ☒ C Compatíveis
- ☐ D Incompatíveis

4) O operador momento atua numa função de onda de posição como

- ☐ A $\hat{P}\,\psi(x) = i\hbar\,\frac{d}{dx}\psi(x)$
- ☐ B $\hat{P}\,\psi(x) = p\,\psi(x)$
- ☒ C $\hat{P}\,\psi(x) = -i\hbar\,\frac{d}{dx}\psi(x)$
- ☐ D $\hat{P}\,\psi(x) = -p\,\psi(x)$

5) Na base ortonormal $\{|x_1\rangle, |x_2\rangle\}$, qual matriz representa o operador $\hat{O}$ definido pelas relações $\hat{O}|x_1\rangle = |x_1\rangle + i|x_2\rangle$ e $\hat{O}|x_2\rangle = -i|x_1\rangle - |x_2\rangle$?

- ☒ A $\hat{O} \mapsto \begin{bmatrix} 1 & -i \\ i & -1 \end{bmatrix}$
- ☐ B $\hat{O} \mapsto \begin{bmatrix} 1 & i \\ -i & -1 \end{bmatrix}$
- ☐ C $\hat{O} \mapsto \begin{bmatrix} 1 & i \\ i & -1 \end{bmatrix}$
- ☐ D $\hat{O} \mapsto \begin{bmatrix} 1 & -i \\ -i & -1 \end{bmatrix}$

6) Na notação de Dirac, a que corresponde a expressão $|U\rangle(2+3i)\langle V|S\rangle e^{i\phi}$?

- ~~A~~ Um ket
- C Um operador
- B Um bra
- D Um número

7) Em mecânica quântica, a incerteza δA associada a uma observável $\hat{A}$ define-se como

- A $\delta A \equiv \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$
- C $\delta A \equiv \sqrt{\langle \hat{A} \rangle^2 - \langle \hat{A}^2 \rangle}$
- B $\delta A \equiv \langle \hat{A} \rangle - \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle}$
- ~~D~~ $\delta A \equiv \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}$

8) Atuando com o operador de escada $\hat{L}_-$ no autoestado de momento angular $|l, m\rangle$ resulta em

- ~~A~~ $\hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\,|l, m-1\rangle$
- C $\hbar\sqrt{l(l+1) - m(m-1)}\,|l, m+1\rangle$
- B $\hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\,|l, m-1\rangle$
- D $\hbar\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\,|l, m+1\rangle$

9) Uma partícula é descrita pelo Hamiltoniano (oscilador harmónico isotrópico em 3D)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\left(P_x^2 + P_y^2 + P_z^2\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\left(X^2 + Y^2 + Z^2\right).$$

A energia do seu primeiro estado excitado é

- ~~A~~ $5\hbar\omega/2$
- C $\hbar\omega/2$
- B $3\hbar\omega/2$
- D $7\hbar\omega/2$

10) A corrente de probabilidade associada à função de onda $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ é

- A $\mathcal{J} = \frac{\hbar k}{m}\left(|A|^2 + |B|^2\right)$
- C $\mathcal{J} = \frac{\hbar k}{m}\frac{|A|^2}{|B|^2}$
- ~~B~~ $\mathcal{J} = \frac{\hbar k}{m}\left(|A|^2 - |B|^2\right)$
- D $\mathcal{J} = \frac{\hbar k}{m}\frac{|B|^2}{|A|^2}$

Parte II (70%)

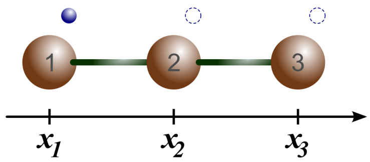
Responda apenas nas folhas de resposta.

Problema 1

20 % [5+5+5+5]

Considere a descrição simplificada de um eletrão numa molécula tri-atómica, onde os estados $\{|x_1\rangle, |x_2\rangle, |x_3\rangle\}$ representam o eletrão em cada um dos átomos e definem uma base ortonormal. Em unidades apropriadas, o operador Hamiltoniano para este eletrão é representado pela matriz

$$\hat{H} \mapsto \begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \text{na base} \quad \{|x_1\rangle, |x_2\rangle, |x_3\rangle\}.$$



Esta matriz tem os seguintes vetores próprios normalizados

$$|\varepsilon_1\rangle \mapsto \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \qquad |\varepsilon_2\rangle \mapsto \frac{1}{\sqrt{6}}\begin{bmatrix} 2 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \qquad |\varepsilon_3\rangle \mapsto \frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

a) Determine os possíveis resultados numa medição da energia do eletrão.

b) Determine a energia mais provável do eletrão quando ele se encontra no estado $|\psi\rangle = |x_3\rangle$.

c) Quando o eletrão se encontra no estado $|\psi\rangle$ da questão anterior, qual será o vetor de estado imediatamente a seguir a uma medição que resulte na energia mais provável? Exprima-o na base $\{|x_1\rangle, |x_2\rangle, |x_3\rangle\}$, sem necessidade de o normalizar.

d) Em que átomo será mais provável encontrar o eletrão imediatamente após se ter realizado a medida de energia referida na questão anterior?

Solução

a) Numa medição da energia, o resultado será um dos valores próprios do Hamiltoniano. Considerando que já são conhecidos os vetores próprios, e que estes estão normalizados e são mutuamente ortogonais, basta-nos notar que

$$\hat{H}|\varepsilon_n\rangle = E_n|\varepsilon_n\rangle \quad \longrightarrow \quad E_n = \langle\varepsilon_n|\hat{H}|\varepsilon_n\rangle.$$

A cada um dos vetores próprios indicados no problema estão associados os valor próprios seguintes:

$$E_1 = \langle\varepsilon_1|\hat{H}|\varepsilon_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix} = -1,$$

$$E_2 = \langle\varepsilon_2|\hat{H}|\varepsilon_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}\frac{1}{\sqrt{6}}\begin{bmatrix} 2 & -1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{6}\begin{bmatrix} 2 & -1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix} = -1,$$

$$E_3 = \langle\varepsilon_3|\hat{H}|\varepsilon_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & -1 \\ -1 & -1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix} = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ -2 \end{bmatrix} = 2.$$

Portanto, numa medição da energia obteremos o resultado -1 ou 2. Notemos que o valor próprio -1 é duplamente degenerado.

b) A probabilidade de obtermos cada um dos dois resultados encontrados acima é dada por

$$\begin{aligned}
\mathcal{P}(\mathcal{E} \to -1) &= \big|\langle \varepsilon_1|\psi\rangle\big|^2 + \big|\langle \varepsilon_2|\psi\rangle\big|^2 && \text{(o val. próp. } -1 \text{ é 2-degenerado)} \\
\mathcal{P}(\mathcal{E} \to +2) &= \big|\langle \varepsilon_3|\psi\rangle\big|^2 && \text{(não degenerado)}
\end{aligned}$$

O mais simples de calcular é o segundo, porque tem apenas um termo:

$$\mathcal{P}(\mathcal{E} \to +2) = \big|\langle \varepsilon_3|\psi\rangle\big|^2 = \big|\langle \varepsilon_3|x_3\rangle\big|^2 = \frac{1}{3}.$$

Logo, como só existem dois valores possíveis para a energia, sabemos imediatamente que

$$\mathcal{P}(\mathcal{E} \to -1) = 1 - \mathcal{P}(\mathcal{E} \to +2) = \frac{2}{3}.$$

Portanto, no estado $|\psi\rangle = |x_3\rangle$, a energia mais provável é -1.

c) Imediatamente a seguir à medição de energia resultar no valor -1 (que é o mais provável de acordo com a resposta anterior), o vetor de estado será projetado no subespaço definido pelos vetores próprios associados ao resultado medido:

$$|\psi\rangle \quad \xrightarrow{\mathcal{E}\to -1} \quad \hat{\mathrm{P}}_{\{\varepsilon_1,\varepsilon_2\}}|\psi\rangle,$$

onde $|\psi\rangle = |x_3\rangle$ e o projetor consiste em

$$\hat{\mathrm{P}}_{\{\varepsilon_1,\varepsilon_2\}} = |\varepsilon_1\rangle\langle\varepsilon_1| + |\varepsilon_2\rangle\langle\varepsilon_2|.$$

Aplicando-o ao vetor de estado anterior à medição, obtemos

$$\begin{aligned}
\hat{\mathrm{P}}_{\{\varepsilon_1,\varepsilon_2\}}|\psi\rangle &= \Big(|\varepsilon_1\rangle\langle\varepsilon_1| + |\varepsilon_2\rangle\langle\varepsilon_2|\Big)|\psi\rangle = \Big(|\varepsilon_1\rangle\langle\varepsilon_1| + |\varepsilon_2\rangle\langle\varepsilon_2|\Big)|x_3\rangle \\
&= |\varepsilon_1\rangle\langle\varepsilon_1|x_3\rangle + |\varepsilon_2\rangle\langle\varepsilon_2|x_3\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2}}|\varepsilon_1\rangle + \tfrac{1}{\sqrt{6}}|\varepsilon_2\rangle \\
&= \tfrac{1}{2}\Big(|x_2\rangle + |x_3\rangle\Big) + \tfrac{1}{6}\Big(2|x_1\rangle - |x_2\rangle + |x_3\rangle\Big) \\
&= \tfrac{1}{3}|x_1\rangle + \tfrac{1}{3}|x_2\rangle + \tfrac{2}{3}|x_3\rangle.
\end{aligned}$$

Este é o vetor de estado imediatamente a seguir à medição referida.

d) Na questão anterior concluímos que o vetor de estado foi reduzido para

$$|\psi'\rangle = \tfrac{1}{3}|x_1\rangle + \tfrac{1}{3}|x_2\rangle + \tfrac{2}{3}|x_3\rangle.$$

Este vetor de estado não está normalizado. No entanto, podemos facilmente ver que a amplitude maior está associada ao estado de base $|x_3\rangle$. Assim, será mais provável encontrar o eletrão no átomo 3.

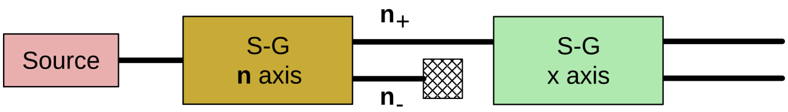
Nota: O vetor de estado normalizado seria $|\psi'\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{6}}|x_1\rangle + \tfrac{1}{\sqrt{6}}|x_2\rangle + \tfrac{2}{\sqrt{6}}|x_3\rangle$.

Problema 2 10 %

Um feixe de partículas neutras com spin 1/2 e momento angular orbital nulo atravessa um seletor de Stern-Gerlach (SG) cuja orientação $\boldsymbol{n}$ (definida pelo gradiente do campo magnético) varia no plano xz:

$$\boldsymbol{n} = \sin\theta\, \boldsymbol{u}_x + \cos\theta\, \boldsymbol{u}_z, \qquad 0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}.$$

Essa orientação, definida pelo ângulo θ, era inicialmente desconhecida. Para a determinar, utilizou-se um segundo SG segundo $\boldsymbol{u}_x$, como ilustrado na figura abaixo, tendo-se verificado que o valor esperado de $\hat{S}_x$ é $\hbar/4$. Determine o ângulo θ.



Nota:

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad \sin(2\alpha) = 2\sin\alpha\cos\alpha.$$

Solução

Esta sequência de dispositivos SG prepara as partículas no autoestado de spin apontando segundo $\boldsymbol{n}$, que representamos por $|+\rangle_{\boldsymbol{n}}$. Estas atravessam de seguida o segundo SG que mede a projeção de spin $\hat{S}_x$ quando as partículas se encontram no estado $|+\rangle_{\boldsymbol{n}}$. O valor esperado desta quantidade corresponde a

$${}_{\boldsymbol{n}}\langle +|\hat{S}_x|+\rangle_{\boldsymbol{n}}.$$

Na base própria de $\hat{S}_z$, este ket e operador são representados por

$$|+\rangle_{\boldsymbol{n}} = \cos\tfrac{\theta}{2}|+\rangle_z + \sin\tfrac{\theta}{2}|-\rangle_z \quad \mapsto \quad \begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{bmatrix}, \qquad \hat{S}_x \mapsto \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Logo, o valor esperado é dado por

$${}_{\boldsymbol{n}}\langle +|\hat{S}_x|+\rangle_{\boldsymbol{n}} = \frac{\hbar}{2}\begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{bmatrix} = \frac{\hbar}{2}\sin\theta.$$

Igualando isto ao resultado que nos é dado no problema, obtemos

$${}_{\boldsymbol{n}}\langle +|\hat{S}_x|+\rangle_{\boldsymbol{n}} = \frac{\hbar}{4} \quad \longrightarrow \quad \sin\theta = \frac{1}{2} \quad \longrightarrow \quad \theta = \frac{\pi}{6} = 30°.$$

Problema 3 — 20 % [3 + 3 + 8 + 6]

Uma partícula de massa m no poço de potencial infinito (1D) descrito abaixo é preparada no estado $|\psi\rangle$ seguinte:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \le x \le a, \\ +\infty, & x < 0 \text{ ou } x > a, \end{cases} \qquad |\psi\rangle = \sqrt{\frac{2}{5}}\,|\varphi_1\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}}\,|\varphi_2\rangle.$$

Este estado $|\psi\rangle$ é uma combinação linear dos dois autoestados de mais baixa energia, em que $|\varphi_n\rangle$ representa o n-ésimo autoestado normalizado.

a) Escreva (sem qualquer derivação) a equação de Schrödinger independente do tempo (ESIT) para um potencial *genérico* $V(x)$, em 1D.

b) À partida (antes de qualquer cálculo), em que intervalo de energia podemos esperar soluções físicas da ESIT para o potencial $V(x)$ acima?

c) Partindo da solução geral da ESIT para o potencial $V(x)$ acima, *mostre* como se obtêm e quais são as energias, E_n, e as funções de onda normalizadas, $\varphi_n(x)$, dos estados estacionários desta partícula.

d) Mostre que o valor esperado da energia desta partícula no estado $|\psi\rangle$ é $7\hbar^2\pi^2/(5ma^2)$.

Nota:

$$\int \sin^2 x\, dx = \frac{x}{2} - \frac{1}{4}\sin(2x).$$

Solução

a) A ESIT é

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + V(x)\,\varphi(x) = E\,\varphi(x),$$

onde E representa a energia.

b) As soluções físicas existirão para $E > 0$.

c) Como o potencial é infinito em todo o espaço exceto na região $0 < x < a$, as soluções da ESIT serão nulas em todo o espaço, exceto na região $0 < x < a$, onde a solução geral será

$$\varphi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \qquad k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

Impondo a continuidade de $\varphi(x)$ em $x = 0$ e $x = a$ obtemos as condições

$$\varphi(0) = \varphi(a) = 0, \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} A + B = 0 \\ Ae^{ika} + Be^{-ika} = 0 \end{cases} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} A = -B \\ A\sin ka = 0 \end{cases}.$$

A segunda equação tem solução não trivial (isto é, solução com $A \neq 0$) apenas para $k = k_n \equiv n\pi/a$. A função de onda associada a cada um destes valores k_n é

$$\varphi_n(x) = A\sin(k_n x), \qquad k_n = \frac{n\pi}{a}, \qquad n = 1, 2, \ldots$$

A constante A é obtida impondo o requisito de normalização:

$$\int_0^a |\varphi_n(x)|^2\, dx = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \frac{1}{A^2} = \int_0^a \sin^2\!\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \quad \Leftrightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

Em resumo, os estados estacionários da partícula são descritos pelas funções de onda

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(k_n x\right), & 0 \leq x \leq a \\ 0, & \text{restantes } x \end{cases}, \qquad k_n = \frac{n\pi}{a}, \qquad n = 1, 2, \ldots$$

e a energia de cada um destes estados é

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2ma^2}.$$

d) O estado $|\psi\rangle = \sqrt{\frac{2}{5}}\,|\varphi_1\rangle + \sqrt{\frac{3}{5}}\,|\varphi_2\rangle$ é combinação linear dos dois autoestados de menor energia, que correspondem aos casos $n = 1$ e $n = 2$:

$$E_{n=1} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}, \qquad E_{n=2} = \frac{4\hbar^2\pi^2}{2ma^2}.$$

Notemos que, como $|\varphi_n\rangle$ é um autoestado de energia, então

$$\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle,$$

o que significa que podemos calcular o valor esperado pretendido da seguinte forma rápida (evitando integrais explícitos com as funções de onda):

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle_\psi = \langle \psi|\hat{H}|\psi\rangle &= \left(\sqrt{\tfrac{2}{5}}\,\langle\varphi_1| + \sqrt{\tfrac{3}{5}}\,\langle\varphi_2|\right)\hat{H}\left(\sqrt{\tfrac{2}{5}}\,|\varphi_1\rangle + \sqrt{\tfrac{3}{5}}\,|\varphi_2\rangle\right) \\ &= \frac{2}{5}\langle\varphi_1|\hat{H}|\varphi_1\rangle + \frac{3}{5}\langle\varphi_2|\hat{H}|\varphi_2\rangle = \frac{2}{5}E_1 + \frac{3}{5}E_2 \\ &= \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\left(\frac{2}{5} + \frac{12}{5}\right) = \frac{7\hbar^2\pi^2}{5ma^2} \qquad \boxdot \end{aligned}$$

Problema 4

20 % [3 + 8 + 5 + 4]

Os operadores Hamiltoniano e de "criação" para o potencial harmónico em 1D são

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2, \qquad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{X} - i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\,\hat{P}.$$

a) Quais são as energias, E_n, dos estados ligados de uma partícula neste potencial?

b) Calcule a dependência temporal de $\langle\hat{X}^2\rangle \equiv \langle\psi(t)|\hat{X}^2|\psi(t)\rangle$ quando o estado inicial ($t = 0$) de uma partícula neste potencial é

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_0\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\varphi_2\rangle, \qquad \hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle.$$

Apresente o resultado na forma mais simples possível como função de t.

c) Mostre que a função de onda do estado fundamental é

$$\varphi_0(x) = \mathcal{N}e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2},$$

onde $\mathcal{N}$ é uma constante de normalização.

d) Calcule explicitamente a constante de normalização $\mathcal{N}$ de $\varphi_0(x)$, recordando que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \qquad (\operatorname{Re} a > 0)\,.$$

Solução

a) As energias dos estados ligados no potencial harmónico em 1D são

$$E_n = \hbar\omega\Big(n + \frac{1}{2}\Big), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

b) Começamos por escrever o operador posição em termos dos operadores de criação e destruição:

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{X} - i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\,\hat{P} \quad\longrightarrow\quad \hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\big(a + a^\dagger\big).$$

Para simplificar as expressões, podemos escrever

$$\hat{X} = x_0\big(a + a^\dagger\big), \qquad x_0 \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}.$$

Como o estado inicial está já expresso na base dos autoestados de energia, a sua dependência temporal requer apenas adicionar os fatores de fase com as energias correspondentes a cada um dos autoestados nessa expansão no instante $t = 0$:

$$\begin{aligned}|\psi(t)\rangle &= \frac{e^{-iE_0t/\hbar}}{\sqrt{2}}|\varphi_0\rangle - \frac{e^{-iE_2t/\hbar}}{\sqrt{2}}|\varphi_2\rangle,\\ &\Big\downarrow \text{ substituindo } E_0{=}\frac{\hbar\omega}{2},\quad E_2{=}\frac{5\hbar\omega}{2}\\ &= \frac{e^{-i\omega t/2}}{\sqrt{2}}|\varphi_0\rangle - \frac{e^{-5i\omega t/2}}{\sqrt{2}}|\varphi_2\rangle.\end{aligned}$$

O valor esperado que pretendemos toma então a forma seguinte:

$$
\begin{aligned}
\langle\psi(t)|\hat{X}^2|\psi(t)\rangle &= \left[\frac{e^{i\omega t/2}}{\sqrt{2}}\langle\varphi_0| - \frac{e^{5i\omega t/2}}{\sqrt{2}}\langle\varphi_2|\right]\hat{X}^2\left[\frac{e^{-i\omega t/2}}{\sqrt{2}}|\varphi_0\rangle - \frac{e^{-5i\omega t/2}}{\sqrt{2}}|\varphi_2\rangle\right] \\
&= -\frac{e^{5i\omega t/2}}{\sqrt{2}}\frac{e^{-i\omega t/2}}{\sqrt{2}}\langle\varphi_2|\hat{X}^2|\varphi_0\rangle - \frac{e^{-5i\omega t/2}}{\sqrt{2}}\frac{e^{i\omega t/2}}{\sqrt{2}}\langle\varphi_0|\hat{X}^2|\varphi_2\rangle \\
&\quad + \frac{1}{2}\langle\varphi_0|\hat{X}^2|\varphi_0\rangle + \frac{1}{2}\langle\varphi_2|\hat{X}^2|\varphi_2\rangle \\
&= -\frac{e^{2i\omega t}}{2}\langle\varphi_2|\hat{X}^2|\varphi_0\rangle - \frac{e^{-2i\omega t}}{2}\langle\varphi_0|\hat{X}^2|\varphi_2\rangle + \frac{1}{2}\langle\varphi_0|\hat{X}^2|\varphi_0\rangle + \frac{1}{2}\langle\varphi_2|\hat{X}^2|\varphi_2\rangle
\end{aligned}
$$

Neste ponto recordamos as propriedades e relações

$$
a|\varphi_n\rangle = \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle, \quad a^\dagger|\varphi_n\rangle = \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle, \quad a^\dagger a|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle, \quad \left[a, a^\dagger\right] = 1,
$$

e que estas relações nos permitem calcular os 4 elementos de matriz acima que envolvem o operador $\hat{X}^2 = x_0^2\big(a^2 + a^{\dagger 2} + aa^\dagger + a^\dagger a\big)$:

$$
\begin{aligned}
\langle\varphi_n|\hat{X}^2|\varphi_n\rangle &= x_0^2\,\langle\varphi_n|\big(a + a^\dagger\big)^2|\varphi_n\rangle = x_0^2\,\langle\varphi_n|aa^\dagger + a^\dagger a|\varphi_n\rangle \\
&= \langle\varphi_n|1 + 2a^\dagger a|\varphi_n\rangle = x_0^2\,(1 + 2n)\,,
\end{aligned}
$$

$$
\langle\varphi_2|\hat{X}^2|\varphi_0\rangle = \langle\varphi_0|\hat{X}^2|\varphi_2\rangle^* = x_0^2\,\langle\varphi_2|\big(a + a^\dagger\big)^2|\varphi_0\rangle = x_0^2\,\langle\varphi_2|\big(a^\dagger\big)^2|\varphi_0\rangle = \sqrt{2}\,x_0^2.
$$

Substituindo na expressão acima obtemos

$$
\begin{aligned}
\langle\psi(t)|\hat{X}^2|\psi(t)\rangle &= -\frac{e^{2i\omega t}}{2}\langle\varphi_2|\hat{X}^2|\varphi_0\rangle - \frac{e^{-2i\omega t}}{2}\langle\varphi_0|\hat{X}^2|\varphi_2\rangle + \frac{1}{2}\langle\varphi_0|\hat{X}^2|\varphi_0\rangle + \frac{1}{2}\langle\varphi_2|\hat{X}^2|\varphi_2\rangle \\
&= -\frac{e^{2i\omega t}}{2}\sqrt{2}\,x_0^2 - \frac{e^{-2i\omega t}}{2}\sqrt{2}\,x_0^2 + \frac{1}{2}\,x_0^2\,(1+0) + \frac{1}{2}\,x_0^2\,(1+4) \\
&= 3x_0^2\left[1 - \frac{\sqrt{2}}{3}\cos\big(2\omega t\big)\right].
\end{aligned}
$$

Recordando como definimos a constante x_0 acima, obtemos o resultado final

$$
\langle\psi(t)|\hat{X}^2|\psi(t)\rangle = \frac{3\hbar}{2m\omega}\left[1 - \frac{\sqrt{2}}{3}\cos\big(2\omega t\big)\right].
$$

c) **Método I** — Quando o operador de destruição atua no estado fundamental do potencial harmónico, temos $a|\varphi_0\rangle = 0$. Traduzindo este resultado para a função de onda,

$$
\begin{aligned}
a|\varphi_0\rangle = 0 \quad &\Leftrightarrow \quad \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{X} + i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\,\hat{P}\right]|\varphi_0\rangle = 0 \\
&\qquad \Big\downarrow\ \hat{X} \to x, \quad \hat{P} \to -i\hbar d/dx \\
&\Leftrightarrow \quad \left[\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,x + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,\frac{d}{dx}\right]\varphi_0(x) = 0 \\
&\Leftrightarrow \quad \frac{m\omega x}{\hbar}\,\varphi_0(x) + \frac{d\varphi_0(x)}{dx} = 0.
\end{aligned}
$$

Portanto, se a função dada, $\varphi_0(x) = \mathcal{N} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$, obedecer a esta condição, ela representa de facto o estado fundamental. Vejamos: substituindo então a função dada na equação acima,

$$
\begin{aligned}
& \frac{m\omega x}{\hbar}\left(e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}\right) + \frac{d}{dx}\left(e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}\right) \stackrel{?}{=} 0 \\
\Leftrightarrow\quad & \frac{m\omega x}{\hbar}\left(e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}\right) + \left(-\frac{m\omega x}{\hbar} e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2}\right) \stackrel{?}{=} 0 \\
\Leftrightarrow\quad & \left(\frac{m\omega x}{\hbar} - \frac{m\omega x}{\hbar}\right) e^{-\frac{1}{2}\frac{m\omega}{\hbar}x^2} \stackrel{?}{=} 0 \\
\Leftrightarrow\quad & 0 \stackrel{?}{=} 0 \quad \checkmark .
\end{aligned}
$$

Método II — Se a função dada representar o estado fundamental, então deveremos ter

$$
\hat{H}\varphi_0(x) = E_0\,\varphi_0(x) = \frac{\hbar\omega}{2}\,\varphi_0(x),
$$

porque $E_{n=0} = \hbar\omega/2$. Vejamos se a função dada satisfaz esta equação. Expandindo o Hamiltoniano,

$$
\begin{aligned}
& \hat{H}\varphi_0(x) \stackrel{?}{=} \frac{\hbar\omega}{2}\,\varphi_0(x) \\
\Leftrightarrow\quad & \left[\frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{X}^2\right]\varphi_0(x) \stackrel{?}{=} \frac{\hbar\omega}{2}\,\varphi_0(x) \\
& \Big\downarrow\ \hat{X}\to x,\quad \hat{P}\to -i\hbar d/dx \\
\Leftrightarrow\quad & \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\right]\varphi_0(x) \stackrel{?}{=} \frac{\hbar\omega}{2}\,\varphi_0(x) \\
& \Big\downarrow\ \varphi_0(x)\to\mathcal{N}\,e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\
\Leftrightarrow\quad & -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \stackrel{?}{=} \frac{\hbar\omega}{2}\,e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\
\Leftrightarrow\quad & -\frac{\hbar^2}{2m}\left[-\frac{m\omega}{\hbar} + \left(\frac{m\omega x}{\hbar}\right)^2\right]e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \stackrel{?}{=} \frac{\hbar\omega}{2}\,e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\
\Leftrightarrow\quad & \left[\frac{\hbar\omega}{2} - \frac{m\omega x^2}{2}\right] + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \stackrel{?}{=} \frac{\hbar\omega}{2} \\
\Leftrightarrow\quad & \frac{\hbar\omega}{2} \stackrel{?}{=} \frac{\hbar\omega}{2} \quad \checkmark .
\end{aligned}
$$

d) Impondo a condição de normalização,

$$
1 = \int_{-\infty}^{+\infty}|\varphi_0(x)|^2dx = \mathcal{N}^2\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}dx = \mathcal{N}^2\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}} \quad\longrightarrow\quad \mathcal{N} = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}.
$$

A função de onda normalizada do estado fundamental é, então,

$$
\varphi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}.
$$

— FIM DO EXAME —