Resolução da Prova 1 de Mecânica Quântica I (F689, Turma B, 1o. semestre de 2015)

Pedro Rangel Caetano*

Universidade Estadual de Campinas, 1o. semestre de 2017

1. A função de onda de uma partícula de massa m é

$$\psi(x, t=0) = \begin{cases} Ax & 0 < x < a/2 \\ A(a-x) & a/2 < x < a \end{cases}$$

   (a) Esboce $\psi(x, 0)$ e determine a constante A.
   (b) Escreva a função de onda inicial em termos das funções discretas de energia do poço infinito e encontre a função $\psi(x, t)$.
   (c) Qual é a probabilidade $P(E_1)$ de a medida de energia produza o valor E_1, o valor mais baixo possível de energia do sistema?

O poço infinito tem soluções $\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \qquad E_n = \frac{n^2\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$.

$$\int_0^{a/2} dx x \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = \frac{a^2}{n^2\pi^2}\left(-n\pi\cos(n\pi/2) + \sin(n\pi/2)\right)$$
$$\int_0^{a} dx x^2 \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) = \frac{a^3}{n^3\pi^3}\Big(-2 + (2 - n^2\pi^2)\cos(n\pi) + 2n\pi\sin(n\pi)\Big)$$

Resolução:

(a) Temos

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,0)|^2 dx &= \int_0^{a/2} A^2x^2 dx + \int_{a/2}^{a} A^2(a-x)^2 dx \\ &= A^2\left[\frac{a^3}{24} + \int_{a/2}^{0} x^2(-dx)\right] \\ &= A^2\left[\frac{a^3}{24} + \frac{a^3}{24}\right] \\ &= A^2\frac{a^3}{12}\end{aligned}$$

*Email: p.r.caetano@gmail.com

Portanto

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x,0)|^2 dx = 1$$
$$\Rightarrow A = \sqrt{\frac{12}{a^3}}$$

O esboço de $\psi(x,0)$ pode ser visto na Figura 1.

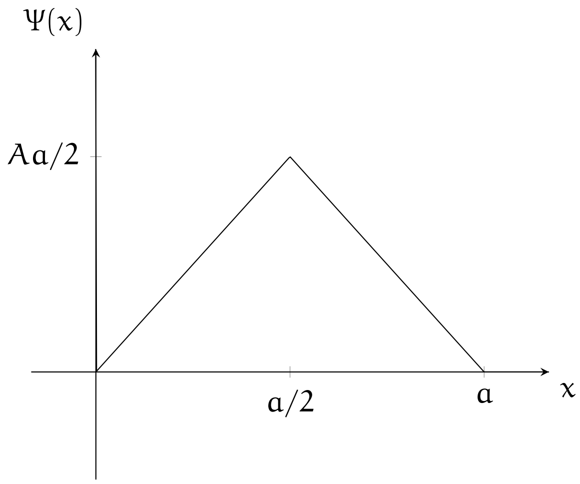

Figura 1: Gráfico de $\Psi(x)$.

(b) Temos

$$\psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)$$

com

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \psi(x,0) dx$$

Calculando os coeficientes c_n:

$$
\begin{aligned}
c_n &= \frac{2\sqrt{6}}{a^2}\left[\int_0^{a/2} x\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx + \int_{a/2}^{a}(a-x)\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right] \\
&= \frac{2\sqrt{6}}{a^2}\left[\int_0^{a/2} x\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx + \int_{a/2}^{0} x\sin\left(n\pi - \frac{n\pi x}{a}\right)(-dx)\right] \\
&= \frac{2\sqrt{6}}{a^2}\left[\int_0^{a/2} x\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx - \int_0^{a/2} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\cos(n\pi)dx\right] \\
&= \frac{2\sqrt{6}}{a^2}\left(1-\cos(n\pi)\right)\int_0^{a/2} x\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx \\
&= \frac{2\sqrt{6}}{a^2}\left(1-\cos(n\pi)\right)\frac{a^2}{n^2\pi^2}\left(-n\pi\cos(n\pi/2)+\sin(n\pi/2)\right) \\
&= \begin{cases} 0 & \text{para } n \text{ par} \\ \frac{4\sqrt{6}}{n^2\pi^2}\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) & \text{para } n \text{ ímpar} \end{cases}
\end{aligned}
$$

Portanto

$$\psi(x,t) = \sum_{\text{n ímpar}} c_n \psi_n(x) e^{-i\omega_n t}$$

onde $\omega_n = E_n/\hbar = n^2\pi^2\hbar/(2ma^2)$.

(c) A probabilidade de obter no instante t o valor E_n para a energia é dada por

$$
\begin{aligned}
P(E=E_n) &= \left|\int \psi_n^*(x)\psi(x,t)dx\right|^2 \\
&= \left|c_n e^{-i\omega_n t}\right|^2 \\
&= |c_n|^2
\end{aligned}
$$

Então,

$$
\begin{aligned}
P(E=E_1) &= \left|\frac{4\sqrt{6}}{\pi^2}\right|^2 \\
&= \frac{96}{\pi^4}
\end{aligned}
$$

2. Seja o potencial $V(x)$ dado por

$$
V(x) = \begin{cases} 0 & x<0 \\ V_1 & 0<x<a \\ V_2 & a<x<b \\ V_3 & b<x<c \\ 0 & x>c \end{cases}
$$

onde $V_1 > V_3 > V_2$. Observe o ordenamento dos valores do potencial.

(a) Assuma que a energia da partícula $V_2 < E < V_3$. Determine as soluções nas diferentes regiões. As soluções encontradas tem estados ligados?

(b) Quais são as regiões classicamente proibidas no caso $V_3 < E < V_2$. Existem soluções quanticamente permitidas nesta região?

(c) Mostre graficamente uma possível solução $\psi(x)$ e seu comportamento em todas as regiões.

Resolução:

(a) Sabemos que as soluções da equação de Schrödinger em regiões de potencial V constante são

- ondas evanescentes da forma $e^{\pm kx}$, com $k = \frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}$, se $V < E$ ou
- ondas planas da forma e^{ikx}, com $k = \frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}$, se $V > E$.

Tendo em vista que $V_1 > V_3 > E > V_2$ as soluções serão ondas planas para $x < 0$, $a < x < b$ e $x > c$ e ondas evanescentes para $0 < x < a$ e $b < x < c$. Assumindo que a partícula vem da esquerda para a direita:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_0x} & x < 0 \\ Be^{-k_1x} + Ce^{k_1x} & 0 < x < a \\ De^{ik_2x} + Ee^{-ik_3x} & a < x < b \\ Fe^{-k_3x} + Ge^{k_3x} & b < x < c \\ He^{ik_0x} & x > c \end{cases}$$

onde as constantes de A a H são fixadas pelas condições de continuidade de ψ e da derivada de ψ e pela normalização, e $k_i = \frac{\sqrt{2m|E-V_i|}}{\hbar}$ para $i \neq 0$ e $k_0 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. Não há estados ligados: a condição para isto é que $E < 0$ (já que $\lim_{x\to\pm\infty} V(x) = 0$), mas não existem estados que satisfaçam isso, já que neste caso $E < V_{min}$ e portanto as soluções não são normalizáveis (da equação de Schrödinger obtemos que a derivada de ψ e ψ deveriam ter o mesmo sinal para todo valor de x caso isso ocorresse, mas neste caso o gráfico da função se afasta do eixo x e disto decorre que é impossível que a integral de $|\psi|^2$ convirja).

(b) Esta condição é impossível pois $V_3 > V_2$. As regiões classicamente proibidas são, porém, as regiões para as quais $E < V$. Se $E < V_2$, a região $a < x < b$ é classicamente proibida.

(c) Confira a Figura 2.

3. Seja a Equação de Schrödinger independente do tempo.

(a) Escreve a Equação de Schrödinger independente do tempo para o caso unidimensional. Quais são as condições gerais que qualquer função de onda deve satisfazer?

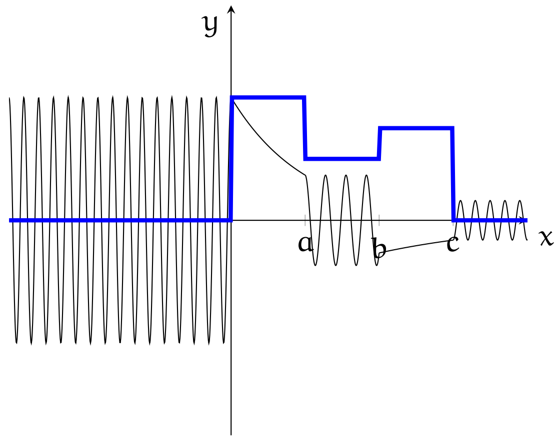

Figura 2: Esboço da função de onda no caso em que a partícula incide da esquerda para a direita.

(b) Assuma que o potencial unidimensional $V(x)$ seja dado por $V(x) = -\alpha\left(\delta(x+a) + \delta(x-a)\right)$. Ache a solução geral da função de onda devido a este potencial quando a energia for $E < 0$.

(c) Encontre a condição do estado ligado neste caso. Não é necessário resolver a equação.

A função Delta de Dirac satisfaz $\int f(x)\delta(x-a)dx = f(a)$.

Resolução: Confira o exercício 5 da lista 2.