

Resolução da Lista 1 de Mecânica Quântica I (F689, Turma B)

Pedro Rangel Caetano*

Universidade Estadual de Campinas, 10. semestre de 2017

Sumário

Exercício 1	2
Exercício 2	2
Exercício 3	3
Exercício 4	5
Exercício 5	6
Exercício 6	7
Exercício 7	8
Exercício 8	8
Exercício 9	9
Exercício 10	10
Exercício 11	13
Exercício 12	15
Exercício 13	16

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

1. Um padrão de difração com uma única fenda está em Padrão de um experimento com uma fenda. A figura representa os padrões de mínimos pela passagem de elétrons por uma fenda. Discuta e explique o raciocínio quando

- (a) a largura da fenda é diminuída pela metade
- (b) a energia cinética do elétron é diminuída pela metade

Resolução:

- (a) O ângulo referente ao n -ésimo mínimo de um padrão de difração obedece $n\lambda = a \sin \theta$. O comprimento de onda dos elétrons é dado pelas relações de De Broglie, logo mantêm-se constante se o momento dos elétrons não muda. A abertura das fendas a e o seno do ângulo de um mínimo são então inversamente proporcionais, portanto se a largura da fenda é diminuída pela metade o padrão se alarga (de fato, na aproximação de pequenos ângulos, a largura das franjas dobra).

Outra forma de entender o mesmo fenômeno é utilizando as relações de incerteza de Heisenberg: ao diminuir a abertura da fenda a localização do elétron ao passar pela fenda fica melhor determinada, e diminui a incerteza na posição do elétron no plano perpendicular à direção do movimento. Assim aumenta a incerteza do momento neste mesmo plano, e este aumento no momento transversal gera um aumento na abertura do padrão de interferência.

- (b) Por De Broglie $\lambda = \frac{h}{p}$. No regime newtoniano $p = \sqrt{2mE}$, logo se a energia cinética diminuir pela metade o comprimento de onda do elétron diminui por um fator $\sqrt{2}$. Como $\theta \approx \sin \theta = \frac{n\lambda}{a}$ isto significa que a largura do padrão reduzirá a aproximadamente 71 % da original (novamente, assumindo a aproximação de pequenos ângulos).

Entretanto, experimentos de difração de elétrons tipicamente acontecem no regime relativístico. Neste caso, $E^2 = (K + E_0)^2 = p^2 + m^2$, onde $E_0 = m$ é a energia/massa de repouso. Manipulando a expressão obtemos então $p = \sqrt{K^2 + 2Km} = K\sqrt{1 + \frac{2m}{K}}$. Quando K é grande comparado a m o momento é linearmente proporcional à energia, portanto neste limite o padrão reduzirá a 50 % da largura do original.

Note ainda que também é possível entender esta modificação no padrão com o princípio da incerteza (cf. Figura 1). Neste caso, como a abertura da fenda se manteve a incerteza do momento nas direções transversais Δp se manteve. O ângulo de abertura, entretanto, é proporcional à razão $\Delta p/p$. Como com a queda da energia o momento diminuiu esta razão aumentou, portanto o padrão se alargou.

2. Quando um elétron passa por uma fenda simples, conforme Figura da questão anterior temos a Figura de difração. Conforme discutido em sala de aula, o padrão da franja é dado pela fórmula $\sin \theta = \lambda/D$. Quando temos $\lambda = D$ temos que $\theta = 90$ graus e portanto a franja deve preencher todo o espaço a frente.

- (a) Imagine uma constante de Planck maior do que o valor medido de tal modo que você ao entrar num vão de 0.90 m de altura, com uma massa de 82 kg e com

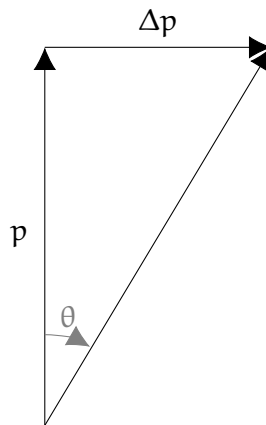


Figura 1: Determinação da abertura angular do padrão de difração utilizando o princípio da incerteza: note que $\Delta p/p = \tan \theta \approx \theta$ para pequenos ângulos.

velocidade de 0.50 m/s. Qual seria o valor desta constante de Planck neste mundo hipotético para que uma pessoa conseguisse se ver com a imagem espalhada na tela toda (quando $\theta = 90$ graus).

Resolução:

- (a) Da expressão para os mínimos de difração sabemos que a abertura da fenda D , que neste caso é a porta, deve ser igual ao comprimento de onda do objeto difratado, neste caso, você. Por outro lado, denotando por h_{hip} a constante de Planck deste mundo hipotético, o seu comprimento de onda é dado por $\lambda = \frac{h_{\text{hip}}}{p} = \frac{h_{\text{hip}}}{mv}$, então $h_{\text{hip}} = mv\lambda = mvD$. Substituindo $m = 82 \text{ kg}$, $v = 0.5 \text{ m/s}$ e $D = 0.90 \text{ m}$ temos $h_{\text{hip}} = 36.9 \text{ J}\cdot\text{s}$, um valor cerca de 10^{35} vezes maior que o valor da constante de Planck em nosso universo atualmente.

3. Ordem de grandeza

- (a) O forno de microondas usa o comprimento de onda de 0.13 mm. Qual é o momento de um fóton de microonda?
- (b) Calcule o comprimento de de Broglie de
- uma massa de 1g com velocidade de 1 m/s.
 - um elétron com energia de 200 eV.
 - um elétron com energia de 50 GeV.
 - o próton do experimento LHC com energia de 1.3 TeV.
 - o neutron, a partícula fundamental, quando tem velocidades não-relativísticas é chamado de nêutron térmico. O nêutron tem massa de $1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ e a velocidade igual à energia térmica média correspondente a uma temperatura de 300 K.

Resolução:

(a) Temos $p = \frac{h}{\lambda}$, logo

$$\begin{aligned} p &= \frac{h}{\lambda} \\ &= \frac{6.63 \cdot 10^{-34}}{0.13 \cdot 10^{-3}} \text{ kg m s}^{-1} \\ &= 5.1 \cdot 10^{-30} \text{ kg m s}^{-1} \end{aligned}$$

(b) i. O momento da bala vale $p = mv = 10^{-3} \text{ kg m s}^{-1}$, logo

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{6.63 \cdot 10^{-34}}{10^{-3}} \\ &= 6.63 \cdot 10^{-31} \text{ m} \\ &= 6.63 \cdot 10^{-21} \text{ \AA}. \end{aligned}$$

ii. Este elétron é não-relativístico pois, sendo a massa do elétron $m_e = 511 \text{ keV}/c^2$, temos $\frac{E}{m_e} \approx 10^{-4}$. Então, como $E = \frac{p^2}{2m}$,

$$\begin{aligned} p &= \sqrt{2mE} \\ &= \sqrt{2 \cdot 0.511 \cdot 10^6 \cdot 200} \text{ eV}/c \\ &= 1.43 \cdot 10^4 \text{ eV}/c. \end{aligned}$$

Alternativamente, sem utilizar unidades naturais, obtemos

$$\begin{aligned} p &= \sqrt{2 \cdot 9.11 \cdot 10^{-31} \cdot 200 \cdot 1.6 \cdot 10^{19}} \text{ kg m s}^{-1} \\ &= 7.64 \cdot 10^{-24} \text{ kg m s}^{-1}. \end{aligned}$$

Sendo $h = 4.14 \cdot 10^{-15} \text{ eV}\cdot\text{s}$ temos

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{h}{p} \\ &= \frac{4.14 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s}}{1.43 \cdot 10^4 \text{ eV}} \\ &= 2.90 \cdot 10^{-19} \text{ s} \cdot c \\ &= 2.90 \cdot 10^{-19} \cdot 3 \cdot 10^8 \text{ m} \\ &= 8.69 \cdot 10^{-11} \text{ m} \\ &= 8.69 \cdot 10^{-1} \text{ \AA}. \end{aligned}$$

que é da ordem da dimensão de um átomo.

iii. Neste caso estamos no regime ultrarrelativístico pois $E \gg m$. Neste regime $E^2 = p^2 + m^2 \approx p^2$. Com boa aproximação, temos então $p = 50 \text{ GeV}/c$ e portanto

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{4.14 \cdot 10^{-15}}{50 \cdot 10^6} \text{ s} \cdot \text{c} \\ &= 2.484 \cdot 10^{-14} \text{ m} \\ &= 2.484 \cdot 10^{-4} \text{ \AA}\end{aligned}$$

iv. No regime ultrarrelativístico temos $E \approx p = 1.3 \text{ TeV}/c$, portanto

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{4.14 \cdot 10^{-15}}{1.3 \cdot 10^{12}} \text{ s} \cdot \text{c} \\ &= 3.18 \cdot 10^{-27} \text{ s} \cdot \text{c} \\ &= 3.18 \cdot 10^{-27} \cdot 3.00 \cdot 10^8 \text{ m} \\ &= 9.55 \cdot 10^{-19} \text{ m} \\ &= 9.55 \cdot 10^{-9} \text{ \AA}\end{aligned}$$

v. Como o regime é não-relativístico $K = \frac{p^2}{2m}$. Sendo K igual à energia térmica média correspondente à temperatura T temos

$$\begin{aligned}p &= \sqrt{2m \cdot \frac{3}{2}kT} \\ &= \sqrt{3mkT} \\ &= \sqrt{3 \cdot 1.6720 \cdot 10^{-27} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 300} \\ &= 4.55 \cdot 10^{-24} \text{ kg m s}^{-1}\end{aligned}$$

Portanto o comprimento de De Broglie deste nêutron vale

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{h}{p} \\ &= \frac{6.63 \cdot 10^{-34}}{4.55 \cdot 10^{-24}} \text{ m} \\ &= 1.46 \cdot 10^{-10} \text{ m} \\ &= 1.46 \text{ \AA}\end{aligned}$$

Note que este comprimento de onda esta na ordem de grandeza da separação entre os átomos numa estrutura cristalina: isto torna possível usar difração de nêutrons para investigar a estrutura atômica de materiais.

4. No experimento de Davisson e Germer elétrons monoenergéticos são ejetados num cristal. Espalhamento intenso é medido quando os ângulos observados satisfazem à condição de Bragg: $2d \sin \theta = n\lambda$. Para cada mudança abaixo determine qual será a mudança nos ângulos θ que fazem o espalhamento mais forte. Os ângulos θ ficam maiores, menores ou permanecem o mesmo.

- (a) O alvo é trocado por um outro cristal com a mesma estrutura mas cuja separação entre os cristais é menor que a primeiro cristal.
- (b) A velocidade do elétron é diminuído.
- (c) Os elétrons são trocados por nêutrons, em que cada nêutron tem a mesma energia cinética idêntica aos elétrons.

Resolução:

- (a) A mudança corresponde a uma diminuição de d . Como λ se mantém isto implica num aumento de $\sin \theta$ para que a condição de Bragg seja satisfeita, ou seja, o ângulo aumentará.
- (b) Uma diminuição na velocidade do elétron implica numa redução do momento e portanto, pelas relações de De Broglie, num aumento do comprimento de onda do mesmo. λ portanto aumenta e, como d não se altera, a lei de Bragg força que $\sin \theta$ aumente, logo o ângulo aumentará.
- (c) Qualquer que seja o regime em que ocorre a difração um aumento da massa, mantendo a energia cinética constante, gera um aumento no momento: no regime newtoniano $p = \sqrt{2mK}$, portanto proporcional a \sqrt{m} ; no regime relativístico $(K + m)^2 = p^2 + m^2$, portanto $p = \sqrt{K^2 + 2mK}$, novamente crescente com m e mesmo no regime ultrarrelativístico $p = E = K + m$. Um aumento do momento gera uma diminuição do comprimento de De Broglie, portanto a lei de Bragg nos mostra que a troca de elétrons para nêutrons provoca uma diminuição no ângulo.

5. No experimento de duas fendas o que ocorre com a figura de interferência se

- (a) $\lambda \gg d$
- (b) $\lambda \ll d$
- (c) Para os elétrons da Questão 3 qual é a distância entre as fenda que podemos observar a interferência? onde d é a separação entre as fendas.

Resolução:

- (a) A intensidade como função do ângulo no experimento da dupla fenda é dada pela expressão

$$I(\theta) = I_{\max} \cos^2 \left(\frac{\pi d \sin \theta}{\lambda} \right) \text{sinc}^2 \left(\frac{\pi a \sin \theta}{\lambda} \right)$$

onde a e d denotam a largura e separação das fendas, respectivamente, I_{\max} a intensidade máxima do padrão e λ o comprimento de onda incidente. Como estamos mais preocupados com o padrão de interferência, consideraremos o limite $\lambda \gg a$, onde $\text{sinc}^2 \left(\frac{\pi a \sin \theta}{\lambda} \right) \rightarrow 1$, e a expressão da intensidade se torna

$$I(\theta) = I_{\max} \cos^2 \left(\frac{\pi d \sin \theta}{\lambda} \right).$$

Quando $\lambda \gg d$, $d/\lambda \approx 0$ e o argumento de \cos^2 se aproxima de 0 na expressão acima. Neste limite, $I(\theta)$ é aproximadamente constante e igual a I_{\max} (cf. a Figura 2).

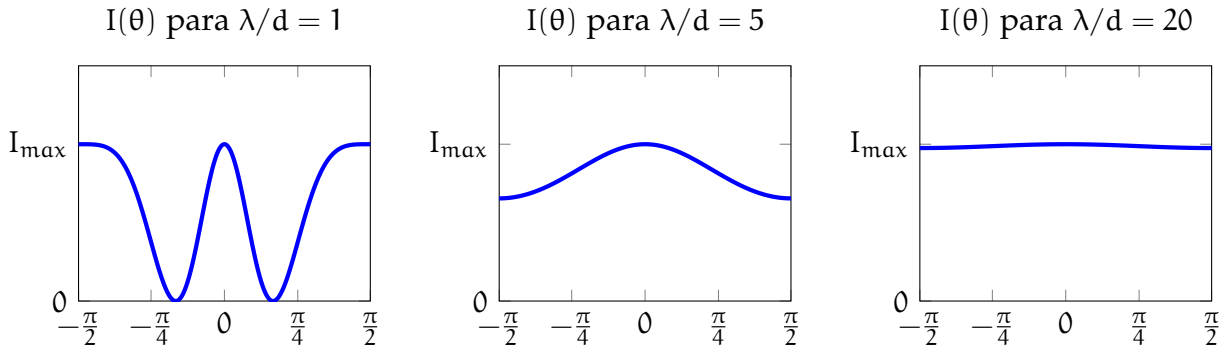


Figura 2: Comportamento de $I(\theta)$ conforme λ/d aumenta.

Outra forma de observar o mesmo fenômeno é perceber que na expressão dos máximos de interferência, $\frac{n\lambda}{d} = \sin \theta_n$, conforme λ/d cresce a separação entre os máximos aumenta (na verdade, quando $\lambda/d > 1$ passa a existir apenas um máximo).

- (b) Neste caso d/λ é muito grande, logo o argumento de \cos^2 na expressão para $I(\theta)$ varia rapidamente com θ . Observe também que na expressão dos máximos de interferência a densidade de máximos aumenta pois a distância entre os mesmos diminui. Concluimos que o padrão de máximos e mínimos é “comprimido”, a variação da intensidade tão brusca que sequer seria perceptível (cf. a Figura 3)

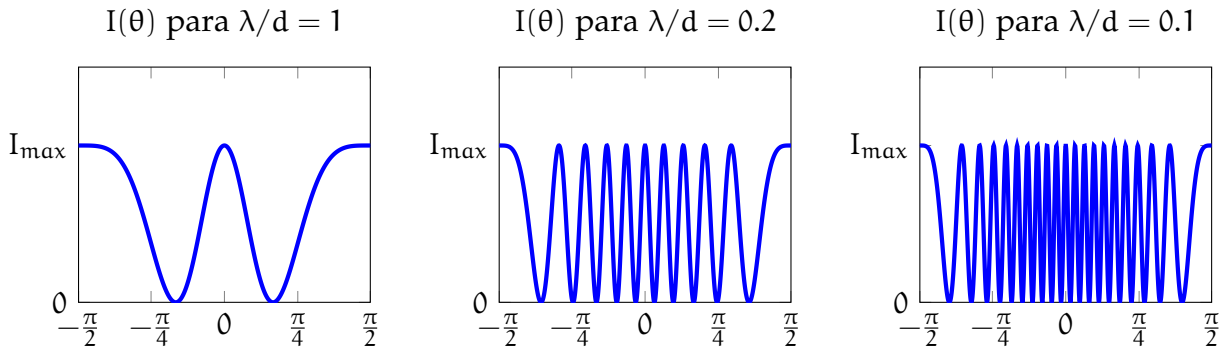


Figura 3: Comportamento de $I(\theta)$ conforme λ/d diminui.

- (c) Podemos observar interferência para $d \sim \lambda$, com d ligeiramente maior do que λ .

6. Mostre que no espalhamento Compton a luz espalhada tem um comprimento de onda maior do que a luz inicial.

Resolução:

Sejam \mathbf{p}_i , E_i o momento e a energia do fóton incidente, \mathbf{p}_f e E_f o momento e a

energia do fóton espalhado e \mathbf{p}_a e K_a o momento e a energia cinética do alvo após o espalhamento (supõe-se que inicialmente o alvo estava parado). Pela conservação da energia

$$E_f = E_i - K_a$$

Como para os fótons $\|\mathbf{p}\| = E/c$ temos

$$\|\mathbf{p}_f\| = \|\mathbf{p}_i\| - \frac{K_a}{c}$$

e já que $K_a \geq 0$,

$$\|\mathbf{p}_f\| \leq \|\mathbf{p}_i\|$$

Sendo $\lambda_f = \frac{h}{\|\mathbf{p}_f\|}$ e $\lambda_i = \frac{h}{\|\mathbf{p}_i\|}$ os comprimentos de onda dos fótons incidente e espalhado, respectivamente, é claro da expressão anterior que

$$\lambda_f \geq \lambda_i.$$

7. Uma pedra é solta de cima de um prédio. O comprimento de de Broglie aumenta, diminui ou fica o mesmo quando ele está caindo? Explique o raciocínio.

Resolução:

Diminui, pois conforme a pedra cai sua velocidade, e portanto seu momento, aumentam e as relações de De Broglie garantem que o comprimento de onda e o momento são inversamente proporcionais.

8. Seja um objeto com massa de 100 g e velocidade de 2,0 m/s. Seja que este objeto esteja numa caixa de 1.5 m.
- (a) Qual é a incerteza no momento se a incerteza na posição é do tamanho da caixa?
- (b) Seja um elétron confinado dentro de uma região de dimensões atômicas, $\sim 10^{-10}$ m. Qual a incerteza no momento?
- (c) Repita para um próton confinado numa região de dimensões nucleares, $\sim 10^{-14}$ m.

Resolução:

- (a) A incerteza na posição vale $\Delta x = 1.5$ m, logo pelo princípio da incerteza de Heisenberg a incerteza mínima do momento vale

$$\begin{aligned} \Delta p &= \frac{\hbar}{2 \Delta x} \\ &= \frac{1.05 \cdot 10^{-34}}{3} \text{ kg m s}^{-1} \\ &= 3.5 \cdot 10^{-35} \text{ kg m s}^{-1} \end{aligned}$$

(b) O mesmo raciocínio do item anterior fornece:

$$\begin{aligned}\Delta p &= \frac{\hbar}{2 \Delta x} \\ &= \frac{1.05 \cdot 10^{-34}}{2} \frac{1}{10^{-10}} \text{ kg m s}^{-1} \\ &= 5.28 \cdot 10^{-25} \text{ kg m s}^{-1}\end{aligned}$$

(c) Novamente o mesmo procedimento nos dá:

$$\begin{aligned}\Delta p &= \frac{\hbar}{2 \Delta x} \\ &= \frac{1.05 \cdot 10^{-34}}{2} \frac{1}{10^{-14}} \text{ kg m s}^{-1} \\ &= 5.28 \cdot 10^{-21} \text{ kg m s}^{-1}\end{aligned}$$

9. Imagine fazer o experimento com duas fendas com um anteparo situado após as fendas. Assista o vídeo após responder as questões.

- (a) Assuma que é feito com bolas de gude e um anteparo macroscópico. Qual a figura que aparece no anteparo?
- (b) Assuma que é feito com ondas. Qual é a figura que aparece no anteparo?
- (c) Assuma que é feito com elétrons com a separação entre as fendas é da ordem do comprimento de onda. Qual é a figura que aparece no anteparo? Vídeo sobre o experimento de Duas Fendas <https://www.youtube.com/watch?v=DfPeprQ7oGc>

Resolução:

- (a) Supondo que as duas fendas estão em $z = -b$ e $z = b$, ambas com largura a , a densidade de probabilidade em z de incidência das partículas é

$$P(z) = \begin{cases} \frac{1}{2a} & \text{se } \|z - (-b)\| < \frac{a}{2} \text{ ou } \|z - b\| < \frac{a}{2} \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

Obtendo uma amostra 500 pontos cuja coordenada x é obtida da densidade acima e na qual a coordenada y é obtida de uma distribuição uniforme obtemos a Figura 4, abaixo.



Figura 4: Padrão observado no experimento da dupla fenda para partículas clássicas.

- (b) Neste caso, desconsiderando o efeito da difração devido à largura das fendas, a intensidade angular após as fendas obedece, sendo d a separação das fendas e λ o comprimento de onda da onda incidente:

$$I_{\text{ang}}(\theta) = I_{\text{max}} \cos^2 \left(\pi \frac{d}{\lambda} \sin(\theta) \right).$$

Sendo D a distância entre as fendas e o anteparo a intensidade na coordenada transversal do anteparo é dada por

$$I_{\text{lin}}(z) = I \left(\arctan \left(\frac{z}{D} \right) \right).$$

A imagem observada no anteparo neste caso pode ser vista na Figura 5.

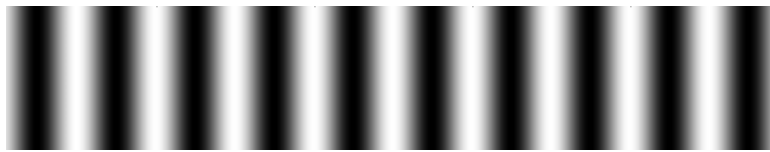


Figura 5: Padrão observado no experimento da dupla fenda para ondas (clássicas).

- (c) Agora, sendo λ o comprimento de onda de De Broglie dos elétrons, a densidade de probabilidade de incidência de elétrons na coordenada transversal do anteparo é proporcional à intensidade I_{lin} do item anterior:

$$p(z) \propto I_{\text{lin}}(z).$$

Plotando uma amostra de 500 pontos cuja coordenada x é amostrada da distribuição $p(z)$ e onde a coordenada y segue uma distribuição uniforme obtemos a Figura 6.

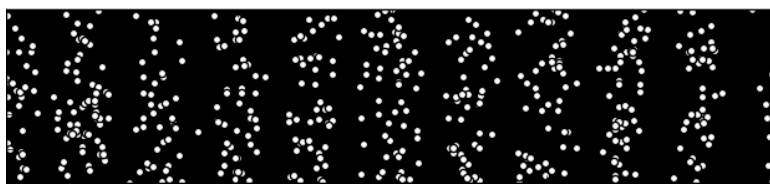


Figura 6: Padrão observado no experimento da dupla fenda para partículas quânticas com comprimento de onda da ordem da separação entre as fendas.

10. (Griffiths 1.4) No tempo $t = 0$ uma partícula é representada pela função de onda

$$\Psi(x, 0) = \begin{cases} \frac{Ax}{a} & 0 \leq x \leq a \\ \frac{A(b-x)}{(b-a)} & a \leq x \leq b \\ 0 & \text{qualquer outro valor} \end{cases}$$

- (a) Normalize a função de onda Ψ , i.e., encontre A em função de a e b .

- (b) Desenhe $\Psi(x, 0)$ como função de x .
- (c) Qual a posição mais provável que a partícula ser encontrada em $x = 0$?
- (d) Qual é a probabilidade de encontrar a partícula para valores menores de $x = a$?
Faça os casos limites $b = a$ e $b = 2a$ e veja se o resultado tem consistência.
- (e) Qual é o valor esperado de x ?

Resolução:

- (a) Impondo a normalização obtemos

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, 0)|^2 dx &= 1 \\ \int_0^a A^2 \frac{x^2}{a^2} dx + \int_a^b A^2 \frac{(b-x)^2}{(b-a)^2} dx &= 1 \\ A^2 \left(\frac{1}{a^2} \frac{x^3}{3} \Big|_0^a + \frac{1}{(b-a)^2} \left(-\frac{(b-x)^3}{3} \right) \Big|_a^b \right) &= 1 \\ A^2 \frac{(a + (b-a))}{3} &= 1 \\ A^2 b &= 3 \\ A &= \sqrt{\frac{3}{b}} \end{aligned}$$

- (b)

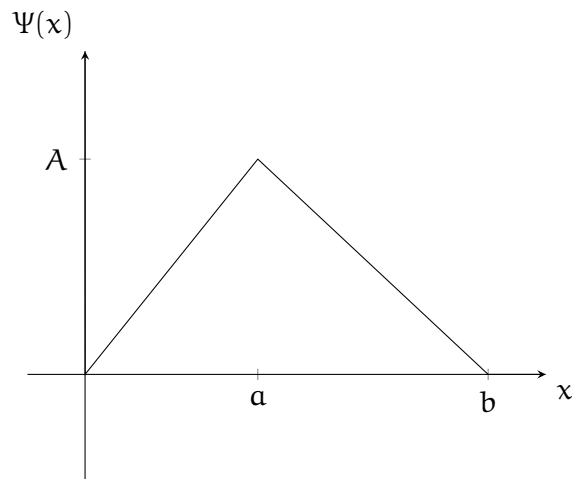


Figura 7: Gráfico de $\Psi(x)$.

- (c) A posição mais provável é $x = a$, onde $|\Psi(x, 0)|^2$ é máximo.

(d) A probabilidade $P(x \leq a)$ corresponde à integral

$$\begin{aligned} P(x \leq a) &= \int_{-\infty}^a |\Psi(x, 0)|^2 dx \\ &= \int_0^a \frac{3}{b} \frac{x^2}{a^2} dx \\ &= \frac{3}{b} \frac{1}{a^2} \frac{a^3}{3} \\ &= \frac{a}{b} \end{aligned}$$

Quando $b = a$ temos

$$\begin{aligned} P(x \leq a) &= \frac{a}{a} \\ &= 1 \end{aligned}$$

Como esperado, já que neste caso a função de onda se anula à direita de $x = a$. Por outro lado, quando $b = 2a$ temos

$$\begin{aligned} P(x \leq a) &= \frac{a}{2a} \\ &= \frac{1}{2} \end{aligned}$$

O que também coincide com o resultado esperado (neste caso a função de onda é simétrica com relação ao eixo $x = a$).

(e) Temos

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x |\Psi(x, 0)|^2 dx \\ &= \int_0^a x \left(\frac{3x^2}{a^2 b} \right) dx + \int_a^b x \left(\frac{3(b-x)^2}{b(b-a)^2} \right) dx \\ &= \frac{3}{b} \int_0^a \frac{x^3}{a^2} dx + \int_{b-a}^0 (b-x) \frac{3x^2}{b(b-a)^2} (-dx) \\ &= \frac{3}{b} \int_0^a \frac{x^3}{a^2} dx + \int_0^{b-a} \frac{3b}{b} \frac{x^2}{(b-a)^2} dx - \int_0^{b-a} \frac{3}{b} \frac{x^3}{(b-a)^2} dx \\ &= \frac{3}{b} \int_0^a \frac{x^3}{a^2} dx + 3 \int_0^{b-a} \frac{x^2}{(b-a)^2} dx - \frac{3}{b} \int_0^{b-a} \frac{x^3}{(b-a)^2} dx \\ &= \frac{3}{4b} \frac{x^4}{a^2} \Big|_0^a + \frac{x^3}{(b-a)^2} \Big|_0^{b-a} - \frac{3}{4b} \frac{x^4}{(b-a)^2} \Big|_0^{b-a} \\ &= \frac{3a^2}{4b} + (b-a) - \frac{3}{4b} (b^2 - 2ab + a^2) \\ &= \frac{3a^2}{4b} + b - a - \frac{3b}{4} + \frac{3a}{2} - \frac{3a^2}{4b} \\ &= \frac{2a+b}{4} \end{aligned}$$

Note que no caso em que a distribuição é simétrica, i.e., $b = 2a$, obtemos $\langle x \rangle = a$, e o valor esperado coincide com o valor mais provável da posição. Em geral, entretanto, eles diferem.

11. (Griffiths 1.5) Considera a função

$$\Psi(x, t) = A e^{-\lambda|x|} e^{-i\omega t}$$

onde A , λ e ω são constantes reais e positivas.

- Normalize a função de onda Ψ .
- Determine o valor esperado de x e x^2 .
- Encontre o desvio padrão de x . Faça o gráfico de $|\Psi|^2$ como função de x e indique os pontos $(\langle x \rangle + \sigma, \langle x \rangle - \sigma)$ para ilustrar o sentido que σ representa a incerteza de x . Qual a probabilidade de a partícula ser encontrada fora deste intervalo?

Resolução:

(a)

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx &= 1 \\ \int_{-\infty}^{\infty} A^2 e^{-2\lambda|x|} dx &= 1 \\ 2A^2 \int_0^{\infty} e^{-2\lambda x} dx &= 1 \\ 2A^2 \frac{-1}{2\lambda} \left(e^{-2\lambda x} \right) \Big|_0^{\infty} &= 1 \\ \frac{2A^2}{2\lambda} &= 1 \\ A &= \sqrt{\lambda} \end{aligned}$$

(b) Para o valor esperado de x temos

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x \lambda e^{-2\lambda|x|} dx \\ &= 0 \end{aligned}$$

Já para o valor esperado de x^2

$$\begin{aligned}
 \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \lambda e^{-2\lambda|x|} dx \\
 &= 2\lambda \int_0^{\infty} x^2 \lambda e^{-2\lambda x} dx \\
 &= \frac{\lambda}{2} \int_0^{\infty} \frac{\partial^2}{\partial \lambda^2} e^{-2\lambda x} dx \\
 &= \frac{\lambda}{2} \frac{d^2}{d\lambda^2} \int_0^{\infty} e^{-2\lambda x} dx \\
 &= \frac{\lambda}{2} \frac{d^2}{d\lambda^2} \left(\frac{1}{2\lambda} \right) \\
 &= \frac{\lambda}{2} \left(\frac{1}{\lambda^3} \right) \\
 &= \frac{1}{2\lambda^2}
 \end{aligned}$$

(c) Como $\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$ temos

$$\sigma = \frac{1}{\sqrt{2}\lambda}$$

A densidade de probabilidade é então dada por

$$|\Psi(x, t)|^2 = \lambda e^{-2\lambda|x|}.$$

O gráfico desta função (para t constante) pode ser visto na Figura 8.

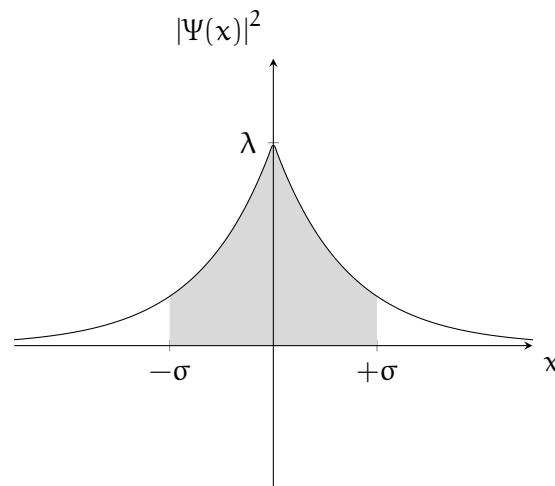


Figura 8: Gráfico de $|\Psi(x)|^2$.

A probabilidade de a partícula ser encontrada fora do intervalo $(\langle x \rangle - \sigma, \langle x \rangle + \sigma)$ é dada por

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{-\sigma} |\Psi(x)|^2 dx + \int_{\sigma}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx &= 1 - \int_{-\sigma}^{\sigma} |\Psi(x)|^2 dx \\
&= 1 - \int_{-\sigma}^{\sigma} \lambda e^{-2\lambda|x|} dx \\
&= 1 - 2\lambda \int_0^{\sigma} e^{-2\lambda x} dx \\
&= 1 - 2\lambda \left. \frac{e^{-2\lambda x}}{-2\lambda} \right|_0^{\sigma} \\
&= 1 + e^{-2\lambda\sigma} - 1 \\
&= e^{-2\lambda \frac{1}{\sqrt{2\lambda}}} \\
&= e^{-\sqrt{2}} \\
&= 0.243.
\end{aligned}$$

12. Seja o poço infinito. Em vez da solução dada na Equação 2.28 do Griffiths, página 32, assumamos que a solução é

$$\psi(x, t) = Ce^{ikx} + De^{-ikx}$$

- (a) Refaça o problema assumindo esta solução. Ache as energias e as funções de onda deste problema.

Resolução:

- (a) Considerando o potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & \text{caso contrário.} \end{cases}$$

temos para $\psi(x, t)$ as condições de contorno $\psi(0, t) = \psi(a, t) = 0$ que fornecem

$$\psi(0, t) = 0$$

$$C + D = 0$$

$$C = -D$$

e, já substituindo a condição anterior na definição de $\psi(x, t)$,

$$\psi(a, t) = 0$$

$$C(e^{ika} - e^{-ika}) = 0$$

$$\sin(ka) = 0.$$

Concluimos então que os valores permitidos de k são

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad \text{para } n \in \{1, 2, 3, \dots\}.$$

Para encontrar as funções de onda $\Psi_n(x, t) = C (e^{ik_n x} - e^{-ik_n x})$ (para $x \in [0, a]$) resta-nos apenas encontrar a constante de normalização C .

$$\begin{aligned}
 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx \\
 1 &= |C|^2 \int_0^a (e^{ik_n x} - e^{-ik_n x}) (e^{-ik_n x} - e^{ik_n x}) dx \\
 1 &= |C|^2 \int_0^a (2 - (e^{2ik_n x} + e^{-2ik_n x})) dx \\
 1 &= 2|C|^2 \int_0^a (1 - \cos(2k_n x)) dx \\
 1 &= 2|C|^2 \left(a - \frac{\sin(2k_n x)}{2k_n} \Big|_0^a \right) \\
 1 &= 2|C|^2 a \\
 |C| &= \sqrt{\frac{1}{2a}}.
 \end{aligned}$$

A menos de fases imaginárias, irrelevantes para medidas físicas, as funções de onda do problema são

$$\Psi_n(x, t) = \sqrt{\frac{1}{2a}} (e^{i\frac{n\pi}{a}x} - e^{-i\frac{n\pi}{a}x}) \quad \text{para } n \in \{1, 2, 3, \dots\}.$$

Para encontrar as energias basta substituir as funções encontradas na equação de Schrödinger independente do tempo:

$$\begin{aligned}
 E_n \Psi_n &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_n}{dx^2} \\
 &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2 \sqrt{\frac{1}{2a}} (e^{i\frac{n\pi}{a}x} - e^{-i\frac{n\pi}{a}x}) \\
 &= \frac{\hbar^2}{8m\pi^2} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^2 \Psi_n \\
 &= \left(\frac{(nh)^2}{8ma^2} \right) \Psi_n
 \end{aligned}$$

As energias permitidas são portanto dadas por

$$E_n = \frac{(nh)^2}{8ma^2}.$$

Alternativamente, sendo k_n os números de onda permitidos dentro do poço, os momentos associados, dados pelas relações de De Broglie, são $p_n = \hbar k_n$, logo as energias associadas são $E_n = 1/2m (\hbar k_n)^2$. Substituindo $k_n = n\pi/a$ obtemos $E_n = n^2 \hbar^2 / (8ma^2)$.

13. (Griffiths 2.2) Mostre que E precisa ser maior do que o valor mínimo de $V(x)$ para cada solução normalizável da equação de Schrodinger independente do tempo.

- (a) Qual é o análogo clássico deste teorema?
 (b) Reescreva a Equação 2.5 do Griffiths na forma,

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

Se $E < V_{\min}$ então Ψ e a segunda derivada precisam ter sempre o mesmo sinal, e argumente que tal função não pode ser normalizada.

Resolução:

- (a) É a constatação de que a energia mecânica de uma partícula é sempre maior que o potencial onde a partícula está, e que portanto as únicas regiões acessíveis a uma partícula são aquelas onde a energia da partícula é maior que o potencial.
 (b) A equação de Schrödinger independente do tempo em uma dimensão é

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

Isolando a derivada segunda de $\Psi(x)$ temos

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V - E) \Psi.$$

Sendo V_{\min} o valor mínimo de $V(x)$, se $E < V_{\min}$ é claro que $V(x) - E \geq V_{\min} - E > 0$, logo na equação acima notamos que tanto as partes imaginárias quanto as reais de $d^2\Psi/dx^2$ e Ψ sempre possuem o mesmo sinal. Como a derivada segunda mede a concavidade/convexidade de uma função, isto significa que se os gráficos de $\text{Re}(\Psi)$ e $\text{Im}(\Psi)$ em algum momento se afastarem do eixo x (o que necessariamente deve ocorrer para que as integrais $(\text{Re}(\Psi))^2$ e $(\text{Im}(\Psi))^2$ não se anulem), eles se curvariam para fora do eixo x , e portanto se afastariam deste eixo nos limites $x \rightarrow \pm\infty$ (cf. Figura 9), fazendo com que as integrais citadas não sejam convergentes. Isto implica que a integral $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\text{Re}(\Psi(x)))^2 + (\text{Im}(\Psi(x)))^2 dx$ é nula ou não converge, logo a função de onda não pode ser normalizável.

Bônus: Abaixo segue uma demonstração mais formal de que as partes reais e imaginárias de Ψ não podem ser normalizáveis. Não é necessário argumentar neste nível de rigor neste problema, mas o argumento pode ser interessante aos mais céticos.

Lema 1. *Seja $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ função duas vezes derivável tal que existe $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+$ com $f'' = g \cdot f$. Se $a_1 < a_2$ são duas raízes de f , $f(x) = 0$ para todo $x \in [a_1, a_2]$.*

Demonstração. O teorema do valor extremo garante que existem b_+ e b_- em $[a_1, a_2]$ tais que $f(b_+)$ é o máximo e $f(b_-)$ o mínimo de f neste intervalo. Se $f(b_+) > 0$ então $b_+ \in (a_1, a_2)$ e $f'(b_+) = 0$. Mas $f''(b_+)$ tem o mesmo sinal de $f(b_+)$, logo $f''(b_+) > 0$ e b_+ é mínimo local de f . Conclui-se então que f é localmente constante em b_+ , mas isto implica $f''(b_+) = 0$, e desta contradição concluímos que o valor máximo de f em $[a_1, a_2]$ é 0. Argumento análogo mostra que o valor mínimo de f no mesmo intervalo é 0, logo $f(x) = 0$ para todo x em $[a_1, a_2]$. ■

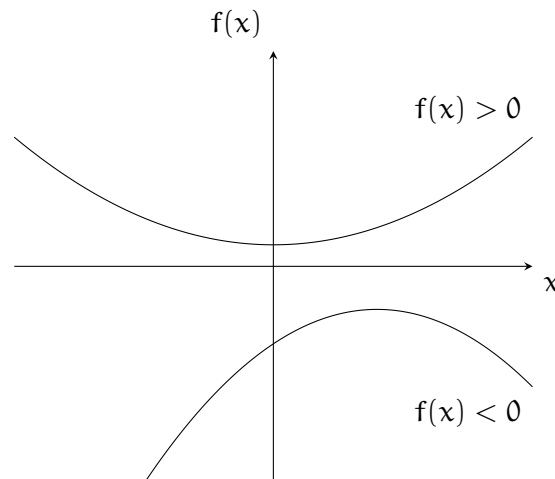


Figura 9: Ilustração de como a concavidade/convexidade de uma função f impede que $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} f(x) = 0$.

Teorema 1. *Seja $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ função duas vezes derivável tal que existe $g : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}_+$ com $f'' = g \cdot f$. f^2 não é normalizável (i.e., a integral $\int_{-\infty}^{\infty} f^2(x) dx$ não converge para um valor não nulo).*

Demonstração. Separamos a demonstração em dois casos:

- $f(x) \neq 0$ para todo $x \in \mathbb{R}$.

Neste caso o sinal de f é constante, suponha sem perda de generalidade positivo. Então f é convexa. Seja $a \in \mathbb{R}$ qualquer. Se $f'(a) \geq 0$ é impossível que $\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = 0$, pois, por convexidade, o gráfico de f deve ficar acima da reta tangente a f por $(a, f(a))$. Se $f'(a) < 0$ então é impossível que $\lim_{x \rightarrow -\infty} f(x) = 0$ por argumento análogo. É claro portanto que a integral de f^2 em \mathbb{R} não converge.

- Existe $b \in \mathbb{R}$ tal que $f(b) = 0$.

Assumindo que f não é identicamente nula em toda a reta (caso na qual f^2 trivialmente é não normalizável), como pelo Lema 1 f é identicamente nula entre duas raízes, neste caso existe c suficientemente grande tal que $f(c) = 0$ e $f(x) \neq 0$ para $x \in (c, \infty)$ ou $f(-c) = 0$ e $f(x) \neq 0$ para $x \in (-\infty, -c)$. Sem perda de generalidade nos restringiremos ao primeiro caso, e suporemos $f(x) > 0$ para $x \in (c, \infty)$. Neste caso f restrita a este intervalo é convexa. Supondo por absurdo que $\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = 0$ existem secantes ao gráfico de f restrita ao intervalo (c, ∞) arbitrariamente próximas do eixo x . Por convexidade portanto o gráfico de f deve estar abaixo do eixo x , o que é absurdo. Como a hipótese que $\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = 0$ é falsa concluímos que a integral de f^2 na reta não pode convergir, logo f^2 não é normalizável.

■