Resolução da Lista 2 de Mecânica Quântica I (F689, Turma B)

Pedro Rangel Caetano*

Universidade Estadual de Campinas, 1o. semestre de 2017

Sumário

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

1. Dada a função de onda

$$\psi(x) = \begin{cases} N & \text{, se } -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2} \\ 0 & \text{qualquer outro valor} \end{cases}$$

(a) Calcule a normalização N e o valor esperado de $\langle x \rangle$.

(b) Calcule a transformada de Fourier desta função $\phi(k)$ conforme fórmula Eq. 2.103 do Griffiths.

(c) Assuma que podemos definir o valor esperado do momento como

$$\langle p \rangle = \int \phi^*(k)\hbar k \phi(k) dk \qquad \left\langle p^2 \right\rangle = \int \phi^*(k)\hbar^2 k^2 \phi(k) dk$$

Calcule explicitamente o valor esperado do momento e do momento ao quadrado usando a resposta do item anterior. O valor esperado do momento ao quadrado, $\langle p^2 \rangle$ tem sentido?

Resolução:

(a) Temos para a normalização:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx \\ &= \int_{-a/2}^{a/2} N^2 dx \\ &= N^2 a \\ \therefore N &= \sqrt{\frac{1}{a}}. \end{aligned}$$

Já para o valor médio:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx \\ &= \int_{-a/2}^{a/2} \frac{1}{a} x dx \\ &= 0, \end{aligned}$$

(o integrando é ímpar e o intervalo simétrico).

(b) Temos

$$
\begin{aligned}
\phi(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-a/2}^{a/2} \frac{1}{\sqrt{a}} e^{-ikx} dx \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \left(\frac{e^{-ikx}}{-ik} \right)_{-a/2}^{a/2} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{1}{ik} \left(e^{ika/2} - e^{-ika/2} \right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi a}} \frac{2}{k} \sin(ka/2) \\
&= \sqrt{\frac{2}{\pi a}} \frac{\sin(ka/2)}{k}
\end{aligned}
$$

(c) Para o valor esperado do momento, temos

$$
\begin{aligned}
\langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \hbar k |\phi(k)|^2 dk \\
&= \hbar \frac{2}{\pi a} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(ka/2)}{k^2} k dk \\
&= \hbar \frac{2}{\pi a} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(ka/2)}{k} dk.
\end{aligned}
$$

Esta integral **não converge**, mas possui valor principal de Cauchy,

$$
\text{P.V} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sin^2(ka/2)}{k} dk = \lim_{A \to \infty} \int_{-A}^{A} \frac{\sin^2(ka/2)}{k} dk = 0
$$

pois o integrando é ímpar. Obtemos então, reinterpretando adequadamente o significado da integral:

$$
\langle p \rangle = 0.
$$

Note que este resultado concorda com o cálculo usando o operador momento na representação da posição: reescrevendo a função de onda como $\psi(x) = N(H(x + a/2) - H(x - a/2))$[1] obtemos

[1] $H(x)$ é a função de Heaviside, definida por

$$
H(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x > 0 \\ 0 & \text{se } x \leqslant 0 \end{cases}
$$

É útil saber que $\frac{d}{dx} H(x) = \delta(x)$.

$$
\begin{aligned}
\langle p\rangle &= N^2\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*(x)\frac{\hbar}{i}\left(\frac{d}{dx}H(x+a/2)-\frac{d}{dx}H(x-a/2)\right)dx\\
&= N^2\frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\psi^*(x)\delta(x+a/2)-\psi^*(x)\delta(x-a/2)\right)dx\\
&= N^2\frac{\hbar}{i}\left(\psi^*(-a/2)-\psi^*(a/2)\right)\\
&= 0.
\end{aligned}
$$

Agora, para o valor esperado do momento ao quadrado temos

$$
\begin{aligned}
\left\langle p^2\right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty}\hbar^2k^2|\phi(k)|^2dk\\
&= \hbar^2\frac{2}{\pi a}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin^2(ka/2)}{k^2}k^2dk\\
&= \hbar^2\frac{2}{\pi a}\int_{-\infty}^{\infty}\sin^2(ka/2)\,.
\end{aligned}
$$

Esta integral **não converge, e nem mesmo possui valor principal**: note que o integrando é sempre positivo, e que os limites do mesmo em $\pm\infty$ não existem. Temos então,

$$
\left\langle p^2\right\rangle = \infty
$$

Uma maneira de interpretar este resultado é notando que existem modos com momento ao quadrado arbitrariamente alto compondo $\psi(x)$, devido às descontinuidades em $\pm a/2$.

2. Uma partícula livre tem função de onda no instante $t = 0$

$$
\Psi(x,0) = Ae^{-ax^2}
$$

onde A e a são constantes e a é uma constante real e positiva.

(a) Normalize $\Psi(x,0)$.

(b) Determine $\Psi(x,t)$. Dica: Integrais na forma

$$
\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ax^2+bx}dx
$$

podem ser feitas *completando o quadrado*. Seja $y \equiv \sqrt{a}(x+b/a)$ e note que $(ax^2+bx) = y^2-b^2/4a$. Resposta

$$
\Psi(x,t) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4}\frac{e^{-ax^2/d(t)}}{\sqrt{d(t)}}
$$

$d(t) \equiv 1+2i\hbar at/m$.

(c) Calcule $|\Psi(x,t)|^2$. Expresse a resposta em termos de $w \equiv \sqrt{\frac{a}{1+(2\hbar a t/m)^2}}$. Desenhe $|\psi(x,t)|^2$ como função de x em $t=0$ e um grande valor de t. De forma qualitativa o que acontece com $|\psi(x,t)|^2$?

(d) Determine $\langle x\rangle$, $\langle p\rangle$, $\langle x^2\rangle$, $\langle p^2\rangle$, σ_x, σ_p. Resposta parcial: $\langle p^2\rangle = a\hbar^2$.

(e) O princípio da incerteza é válido neste caso? Em qual tempo o sistema fica próximo do limite do princípio da incerteza?

Resolução:

(a) Temos

$$
\begin{aligned}
1 &= \int_{-\infty}^{\infty} A^2 e^{-2ax^2} dx \\
&= A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\sqrt{2a}x)^2} dx \\
&= \frac{A^2}{\sqrt{2a}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du \\
&= \frac{A^2}{\sqrt{2a}} \sqrt{\pi} \\
\therefore A &= \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4}
\end{aligned}
$$

(b) A estratégia aqui é decompor $\Psi(x,0)$ em ondas planas, o que corresponde a calcular a transformada de Fourier $\phi(k,0)$. Como sabemos a evolução temporal das ondas planas - elas são estados estacionários, portanto $\phi(k,t) = \phi(k,0)e^{-i\frac{E_k}{\hbar}t}$ com $E_k = \hbar^2 k^2/2m$ - para calcular $\Psi(x,t)$ basta realizar a transformada de Fourier inversa de $\phi(k,t)$. Primeiramente então calculamos $\phi(k,0)$:

$$
\begin{aligned}
\phi(k,0) &= \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x,0) e^{-ikx} dx \\
&= \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-ax^2 - ikx\right) dx \\
&= \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\left(\sqrt{a}x + \frac{ik}{2\sqrt{a}}\right)^2 - k^2/4a\right) dx \\
&= \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \left(\frac{2a}{\pi} e^{-k^2/a}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\left(\sqrt{a}x + \frac{ik}{2\sqrt{a}}\right)^2\right) dx \\
&= \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \left(\frac{2a}{\pi} e^{-k^2/a}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} \frac{du}{\sqrt{a}} \\
&= \sqrt{\frac{1}{2\pi a}} \left(\frac{2a}{\pi} e^{-k^2/a}\right)^{1/4} \sqrt{\pi} \\
&= \left(\frac{e^{-k^2/a}}{2a\pi}\right)^{1/4}
\end{aligned}
$$

Temos então para $\phi(k,t)$:

$$
\phi(k,t) = \left(\frac{e^{-k^2/a}}{2a\pi}\right)^{1/4} e^{-i\hbar k^2 t/2m}
$$

Daí, obtemos $\Psi(x,t)$:

$$
\begin{aligned}
\Psi(x,t) &= \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\left(\frac{1}{2a\pi}\right)^{1/4}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{k^2}{4a}-i\hbar\frac{k^2}{2m}t+ikx\right)dk \\
&= \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\left(\frac{1}{2a\pi}\right)^{1/4}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{k^2}{4a}\left(1+\frac{2i\hbar at}{m}\right)+ikx\right)dk \\
&= \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\left(\frac{1}{2a\pi}\right)^{1/4}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{k^2}{4a}d(t)+ikx\right)dk \\
&= \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\left(\frac{1}{2a\pi}\right)^{1/4}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\left(\frac{k}{2}\sqrt{\frac{d(t)}{a}}-ix\sqrt{\frac{a}{d(t)}}\right)^2-\frac{ax^2}{d(t)}\right)dk \\
&= \sqrt{\frac{1}{2\pi}}\left(\frac{1}{2a\pi}\right)^{1/4}e^{-ax^2/d(t)}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-u^2}2\sqrt{\frac{a}{d(t)}}du \\
&= 2\sqrt{\frac{a}{2\pi d(t)}}\left(\frac{1}{2a\pi}\right)^{1/4}\sqrt{\pi}e^{-ax^2/d(t)} \\
&= \sqrt{\frac{1}{d(t)}}\left(\frac{4a^2}{2a\pi}\right)^{1/4}\sqrt{\pi}e^{-ax^2/d(t)} \\
&= \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/4}\frac{e^{-ax^2/d(t)}}{\sqrt{d(t)}}
\end{aligned}
$$

(c) Temos

$$
\begin{aligned}
|\psi(x,t)|^2 &= \psi(x,t)^*\psi(x,t) \\
&= \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/2}\frac{e^{-ax^2/d(t)}e^{-ax^2/d^*(t)}}{\sqrt{d(t)d^*(t)}} \\
&= \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/2}\frac{e^{-ax^2(1/d(t)+1/d^*(t))}}{\sqrt{d(t)d^*(t)}} \\
&= \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/2}\frac{\exp\left(-ax^2\left(1/d(t)+1/d^*(t)\right)\right)}{\sqrt{d(t)d^*(t)}}
\end{aligned}
$$

Como

$$
\begin{aligned}
d(t)d^*(t) &= (1+2i\hbar at/m)\cdot(1-2i\hbar at/m) \\
&= 1+(2\hbar at/m)^2 \\
&= a/w^2
\end{aligned}
$$

e

$$\frac{1}{d(t)} + \frac{1}{d^*(t)} = \frac{d^*(t) + d(t)}{d(t)d^*(t)}$$
$$= \frac{2}{a/w^2}$$
$$= \frac{2w^2}{a}$$

obtemos

$$|\psi(x,t)|^2 = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{1/2} \exp\left(-ax^2\left(\frac{2w^2}{a}\right)\right)\frac{w}{\sqrt{a}}$$
$$= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} we^{-2w^2x^2}$$

Note que w é mínimo para $t = 0$ e, conforme o tempo passa, w diminui. Acontecem então dois fenômenos. Primeiro, calculando a largura da função de onda a meia altura $x_{1/2}$ temos

$$1/2 = \frac{\psi(x_{1/2}, t)}{\psi(0,t)}$$
$$= e^{-2w^2x^2}$$

$$\Rightarrow 2w^2x^2 = \ln 2$$
$$\therefore x_{1/2} = \sqrt{\frac{\ln 2}{2w}}$$

É claro então que com a passagem do tempo $|\psi(x,t)|^2$ se alarga. Além disso, o valor máximo $\psi(0,t) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} w$ diminui. A partícula portanto "se espalha" pelo espaço com o passar do tempo, sua posição ficando cada vez menos definida.

(d) Temos

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,t) x \psi(x,t) dx$$
$$= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} wxe^{-2w^2x^2} dx$$
$$= 0 \qquad \text{(o integrando é ímpar.)}$$

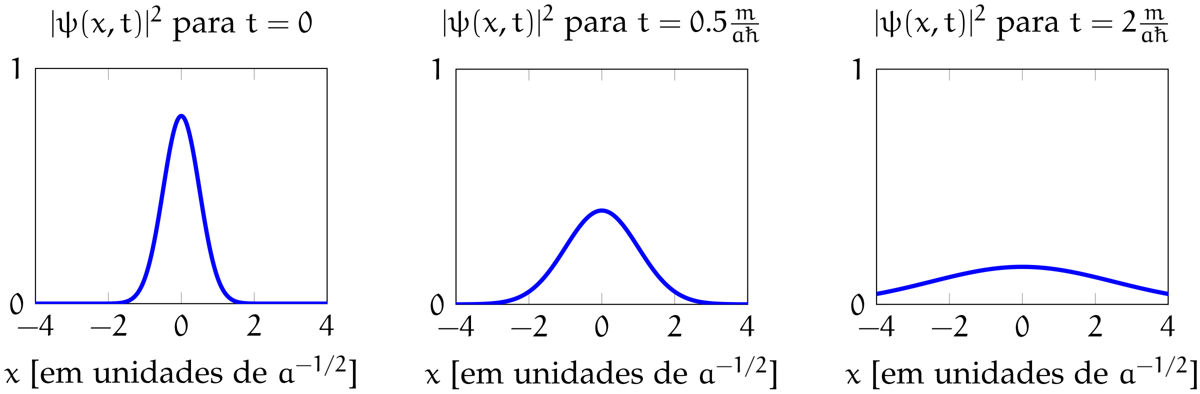

Figura 1: Evolução temporal de $|\psi(x,t)|^2$.

$$
\begin{aligned}
\left\langle x^2 \right\rangle &= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} w x^2 e^{-2w^2x^2} dx \\
&= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{-4} \frac{d}{dw} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2w^2x^2} dx \\
&= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{-4} \frac{d}{dw} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} \frac{du}{\sqrt{2}w} \\
&= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{-4\sqrt{2}} \frac{d}{dw} \left(\frac{\sqrt{\pi}}{w}\right) \\
&= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{-4\sqrt{2}} \frac{-\sqrt{\pi}}{w^2} \\
&= \frac{1}{4w^2}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \hbar k |\phi(k,t)|^2 dk \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \hbar k \left(\frac{e^{-k^2/a}}{2a\pi}\right)^{1/2} dk \\
&= 0 \qquad \text{(o integrando é impar).}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left\langle p^2 \right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \hbar^2 k^2 |\phi(k,t)|^2 dk \\
&= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2a\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} k^2 e^{-k^2/2a} dk \\
&= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2a\pi}} \left[-\frac{d}{d\beta} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta k^2} dk \right]_{\beta=1/2a} \\
&= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2a\pi}} \left[-\frac{d}{d\beta} \left(\sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \right) \right]_{\beta=1/2a} \\
&= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2a\pi}} \frac{1}{2} \left[\sqrt{\frac{\pi}{\beta^3}} \right]_{\beta=1/2a} \\
&= \frac{\hbar^2}{\sqrt{2a\pi}} \frac{1}{2} \sqrt{(2a)^3 \pi} \\
&= a\hbar^2
\end{aligned}
$$

Temos então, enfim

$$
\begin{aligned}
\sigma_x &= \left(\left\langle x^2 \right\rangle - \langle x \rangle^2 \right)^{1/2} \\
&= \left(\frac{1}{4w^2} \right)^{1/2} \\
&= \frac{1}{2w}
\end{aligned}
$$

e

$$
\begin{aligned}
\sigma_p &= \left(\left\langle p^2 \right\rangle - \langle p \rangle^2 \right)^{1/2} \\
&= \sqrt{a}\hbar
\end{aligned}
$$

(e) Considerando $\Delta x = \sigma_x$ e $\Delta p = \sigma_p$ temos

$$
\begin{aligned}
\Delta x \cdot \Delta p &= \frac{1}{2w} \sqrt{a}\hbar \\
&= \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \left(\frac{2\hbar a t}{m} \right)^2}
\end{aligned}
$$

Obtemos então $\Delta x \cdot \Delta p \geqslant \hbar/2$ para todos os valores de t, logo o princípio da incerteza é respeitado. Para $t = 0$ o sistema atinge o mínimo do produto das incertezas do momento e da posição permitido pelo princípio da incerteza: $\hbar/2$.

3. (Griffiths 2.5).
Uma partícula no poço infinito tem como estado inicial uma mistura entre os dois primeiros estados estacionários:

$$\Psi(x,0) = A\left(\Psi_1(x) + \Psi_2(x)\right)$$

(a) Normalize $\Psi(x,0)$. Lembre que se você normalizar em $t = 0$ a função de onda fica normalizada $\forall t$.

(b) Encontre $\Psi(x,t)$ e $|\Psi(x,t)|^2$.

(c) Determine $\langle x \rangle$. Qual a frequência de oscilação? Qual é a amplitude de oscilação?

Resolução:

(a) Temos, lembrando que os estados representados por $\psi_n(x)$ e $\psi_m(x)$ com $n \neq m$ são ortogonais e que as $\psi_n(x)$ já estão normalizadas:

$$\begin{aligned}
1 &= |A|^2 \left(\int_{-\infty}^{\infty} \left(|\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + \psi_1^*(x)\psi_2(x) + \psi_1(x)\psi_2^*(x) \right) dx \right) \\
&= |A|^2 \left(1 + 1 + 0 + 0\right) \\
\therefore |A| &= \frac{1}{\sqrt{2}}
\end{aligned}$$

Assumindo A real temos

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_2(x).$$

(b) Como $\psi(x,0)$ já é escrita em termos dos estados estacionários $\psi_1(x)$ e $\psi_2(x)$ precisamos apenas descobrir a evolução temporal destes. Lembrando que as energias E_n do poço infinito são

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

temos, definindo $\omega = E_1/\hbar = \pi^2\hbar/(2ma^2)$,

$$\begin{aligned}
\psi_1(x,t) &= \psi_1(x)e^{-iE_1t/\hbar} \\
&= \psi_1(x)e^{-i\omega t} \\
&= \sqrt{2}a\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)e^{-i\omega t}
\end{aligned}$$

e

$$
\begin{aligned}
\psi_2(x,t) &= \psi_2(x)e^{-iE_2t/\hbar} \\
&= \psi_2(x)e^{-i(4E_1/\hbar)t} \\
&= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)e^{-i(4\omega)t}
\end{aligned}
$$

portanto

$$
\begin{aligned}
\psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1(x,t)+\psi_2(x,t)\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{a}}\left(\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)e^{-i\omega t}+\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)e^{-4i\omega t}\right) \\
&= \frac{1}{\sqrt{a}}e^{-i\omega t}\left(\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)+\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)e^{-3i\omega t}\right)
\end{aligned}
$$

Calculando $|\psi(x,t)|^2$ temos, notando que as $\psi_n(x)$ são reais:

$$
\begin{aligned}
|\psi(x,t)|^2 &= \psi(x,t)\psi^*(x,t) \\
&= \frac{1}{a}\left[\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)+\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)e^{-3i\omega t}\right]\left[\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)+\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)e^{+3i\omega t}\right] \\
&= \frac{1}{a}\left[\sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)+\sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right)+\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)\left(e^{i(3\omega t)}+e^{-i(3\omega t)}\right)\right] \\
&= \frac{1}{a}\left[\sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)+\sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right)+2\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)\cos\left(3\omega t\right)\right] \\
&= \frac{1}{a}\left[\sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)+\sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right)+2\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right)\cos\left(\Omega t\right)\right]
\end{aligned}
$$

Onde fizemos $\Omega = 3\omega$.

(c) Temos

$$
\begin{aligned}
\langle x\rangle &= \int_0^a x|\psi(x,t)|^2 dx \\
&= \frac{1}{a}\left[\int_0^a x\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)dx+\int_0^a x\sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx+2\cos\left(\Omega t\right)\int_0^a x\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx\right]
\end{aligned}
$$

Calculando as integrais necessárias

$$\begin{aligned}
\int_0^a x\sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx &= a^2\int_0^1 x\sin^2(n\pi x)\,dx\\
&= \frac{a^2}{2}\left(\int_0^1 x dx - \int_0^1 x\cos(2n\pi x)dx\right)\\
&= \frac{a^2}{2}\left(\frac{1}{2} - \left[\frac{x\sin(2n\pi x)}{2n\pi}\right]_0^1 + \frac{1}{2n\pi}\int_0^1 \sin(2n\pi x)dx\right)\\
&= \frac{a^2}{2}\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2n\pi}\left[\frac{\cos(2n\pi x)}{2n\pi}\right]_0^1\right)\\
&= \frac{a^2}{4}
\end{aligned}$$

e, lembrando que $\cos(a-b)-\cos(a+b) = 2\sin(a)\sin(b)$,

$$\int_0^a x\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx = \frac{a^2}{2}\int_0^1 x\left(\cos(\pi x)-\cos(3\pi x)\right)dx$$

como

$$\begin{aligned}
\int_0^1 x\cos(n\pi x)dx &= \left[\frac{x\sin(n\pi x)}{n\pi}\right]_0^1 - \frac{1}{n\pi}\int_0^1 \sin(n\pi x)dx\\
&= \left[\frac{1}{(n\pi)^2}\cos(n\pi x)\right]_0^1\\
&= \frac{(-1)^n-1}{(n\pi)^2}
\end{aligned}$$

obtemos

$$\begin{aligned}
\int_0^a x\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx &= \frac{a^2}{2}\left(-\frac{2}{\pi^2}+\frac{2}{9\pi^2}\right)\\
&= -\frac{8a^2}{9\pi^2}
\end{aligned}$$

Portanto,

$$\begin{aligned}
\langle x\rangle &= \frac{1}{a}\left[\frac{a^2}{4}+\frac{a^2}{4}-\frac{16a^2}{9\pi^2}\cos(\Omega t)\right]\\
&= \frac{a}{2} - \frac{16a}{9\pi^2}\cos(\Omega t)\\
&= \frac{a}{2}\left[1-\frac{32}{9\pi^2}\cos(\Omega t)\right]
\end{aligned}$$

Por fim, a frequência das oscilações vale

$$\begin{aligned} f &= \frac{\Omega}{2\pi} \\ &= \frac{3\omega}{2\pi} \\ &= \frac{3\pi^2\hbar}{4\pi m a^2} \\ &= \frac{3\pi\hbar}{4ma^2} \end{aligned}$$

e a amplitude

$$A = \frac{32}{9\pi^2}\frac{a}{2} \approx 0.3603\left(\frac{a}{2}\right).$$

4. Versão modificada do Exemplo 2.2 do Griffiths. Dada a função de onda

$$\Psi(x,0) = Ax(a-x)$$

como condição inicial das soluções do poço infinito. Ache os primeiros coeficientes c_n para $n = 1, 2$ e 3.

   (a) No instante $t_0 > 0$ foi medido que o sistema estava no estado de energia E_3 que corresponde a energia do estado $n = 3$. Em um instante $t > t_0$ foi medido a energia do sistema. Qual o valor de c_n para $n = 1, 2$ e 3 neste instante?

Resolução: Primeiramente devemos normalizar a função de onda.

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^a A^2x^2(a-x)^2dx \\ &= A^2\int_0^a x^2(a^2-2ax+x^2)dx \\ &= A^2\left[a^2\int_0^a x^2dx - 2a\int_0^a xdx + \int_0^a x^4dx\right] \\ &= A^2\left[a^2\frac{a^3}{3} - 2a\frac{a^4}{4} + \frac{a^5}{5}\right] \\ &= A^2\left(\frac{a^5}{3} - \frac{a^5}{2} + \frac{a^5}{5}\right) \\ &= A^2\frac{a^5}{30} \\ \therefore A &= \sqrt{\frac{30}{a^5}} \end{aligned}$$

Agora, como (Eq. 2.37 do Griffiths)

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

temos

$$\begin{aligned}
c_n &= \sqrt{\frac{30}{a^5}}\sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) x(a-x)dx \\
&= \frac{2\sqrt{15}}{a^3}\left[a\int_0^a x\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx - \int_0^a x^2\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx\right]
\end{aligned}$$

Calculando as integrais necessárias:

$$\begin{aligned}
\int_0^a x\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx &= a^2\int_0^1 x\sin(n\pi x)dx \\
&= a^2\left[\left[\frac{-x\cos(n\pi x)}{n\pi}\right]_0^1 + \frac{1}{n\pi}\int_0^1 \cos(n\pi x)dx\right] \\
&= a^2\left[\left[\frac{-x\cos(n\pi x)}{n\pi}\right]_0^1 + \frac{1}{(n\pi)^2}\left[\sin(n\pi x)\right]_0^1\right] \\
&= \frac{-a^2}{n\pi}(-1)^n \\
&= \begin{cases} \frac{-a^2}{n\pi} & \text{se n é par,} \\ \frac{a^2}{n\pi} & \text{se n é ímpar.} \end{cases}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\int_0^a x^2\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)dx &= a^3\int_0^1 x^2\sin(n\pi x)dx \\
&= a^3\frac{-1}{\pi^2}\frac{d^2}{dn^2}\int_0^1 \sin(n\pi x)dx \\
&= \frac{a^3}{\pi^2}\frac{d^2}{dn^2}\frac{\cos(n\pi)-1}{n\pi} \\
&= \frac{a^3}{\pi^2}\frac{d}{dn}\left[\frac{-\sin(n\pi)\pi}{n\pi} - \frac{\cos(n\pi)-1}{n^2\pi}\right] \\
&= \frac{a^3}{\pi^2}\left[\frac{-\cos(n\pi)\pi^2}{n\pi} + \frac{\sin(n\pi)\pi}{n^2\pi} + \frac{\sin(n\pi)\pi}{n^2\pi} + 2\frac{\cos(n\pi)-1}{n^3\pi}\right] \\
&= \frac{a^3}{\pi^3}\left[2\frac{\cos(n\pi)-1}{n^3} - \frac{\cos(n\pi)\pi^2}{n}\right] \\
&= \frac{a^3}{\pi^3}\left[\frac{2((-1)^n-1)}{n^3} - \frac{(-1)^n\pi^2}{n}\right] \\
&= \begin{cases} \frac{-a^3}{n\pi} & \text{se n é par,} \\ \frac{a^3}{\pi^3}\left[\frac{\pi^2}{n} - \frac{4}{n^3}\right] & \text{se n é ímpar.} \end{cases}
\end{aligned}$$

Portanto, se n é par temos

$$
\begin{aligned}
c_n &= 2\sqrt{15}\left[\frac{-1}{n\pi} - \frac{-1}{n\pi}\right] \\
&= 0
\end{aligned}
$$

e, se n é ímpar,

$$
\begin{aligned}
c_n &= 2\sqrt{15\pi^3}\left[\frac{\pi^2}{n} - \frac{4}{n^3} - \frac{pi^2}{n}\right] \\
&= \frac{8\sqrt{15}}{(n\pi)^3}
\end{aligned}
$$

Portanto, temos

$$
\begin{aligned}
c_1 &= \frac{8\sqrt{15}}{\pi^3} \approx 0.9993 \\
c_2 &= 0 \\
c_3 &= \frac{8\sqrt{15}}{27\pi^3} \approx 0.0370
\end{aligned}
$$

(a) No instante t_0 a função de onda colapsou no estado estacionário com energia E_3, i.e., $\psi(x, t_0) = \psi_3$. Como $\psi(x, t > t_0) = \psi_3(x)e^{iE_3(t-t_0)/\hbar} = 0 \cdot \psi_1(x) + 0 \cdot \psi_2(x) + e^{-iE_3(t-t_0)/\hbar} \cdot \psi_3(c)$ temos,

$$
\begin{aligned}
c_1 &= 0 \\
c_2 &= 0 \\
c_3 &= e^{-iE_3(t-t_0)/\hbar}
\end{aligned}
$$

Como fases puramente imaginárias são irrelevantes (quase sempre), podemos redefinir as constantes para $c_1 = 0$, $c_2 = 0$ e $c_3 = 1$.

5. Assuma que o potencial unidimensional $V(x)$ seja dado por $V(x) = -\alpha\left(\delta(x+a) + \delta(x-a)\right)$.

   (a) Ache a solução geral da função de onda devido a este potencial quando a energia for $E < 0$.

   (b) Encontre a condição do estado ligado neste caso.

Resolução:

(a) Começamos notando que, nas regiões onde o potencial é nulo, a equação de Schrödinger independente do tempo é escrita, quando $E < 0$:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{(-2mE)}{\hbar^2}\psi$$
$$\therefore \frac{d^2\psi}{dx^2} = k^2\psi \qquad \text{para } k = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}}$$

As soluções são portanto ondas evanescentes

$$\psi(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx}.$$

Para encontrar as soluções da equação de Schrödinger no caso em que estamos trabalhando, separaremos o domínio em três regiões: $x < -a$, $-a < x < a$ e $x > a$. Nestas regiões já sabemos que as soluções serão ondas evanescentes: precisamos então encontrar as condições a impor em $x = -a$ e $x = a$. A primeira é a continuidade das soluções; a segunda costuma ser a continuidade da derivada das soluções, mas esta condição só se aplica quando o potencial é limitado, o que falha neste caso. Para encontrar a condição satisfeita pela derivada, integraremos a equação de Schrödinger ao redor dos pontos de divergência do potencial $p \in \{-a, a\}$:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\int_{p-\epsilon}^{p+\epsilon}\frac{d^2\psi}{dx^2}dx + \int_{p-\epsilon}^{p+\epsilon}V(x)\psi(x)dx = \int_{p-\epsilon}^{p+\epsilon}E\psi(x)dx$$
$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d\psi}{dx}\bigg|_{p-\epsilon}^{p+\epsilon} = \int_{p-\epsilon}^{p+\epsilon}E\psi(x)dx - \int_{p-\epsilon}^{p+\epsilon}V(x)\psi(x)dx$$

Definindo a descontinuidade da derivada como

$$\Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x=p} = \lim_{\epsilon\to 0}\frac{d\psi}{dx}\bigg|_{p-\epsilon}^{p+\epsilon}$$

temos

$$\Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x=p} = -\frac{2m}{\hbar^2}\lim_{\epsilon\to 0}\int_{p-\epsilon}^{p+\epsilon}E\psi(x)dx - \int_{p-\epsilon}^{p+\epsilon}V(x)\psi(x)dx$$
$$\Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x=p} = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{p-\epsilon}^{p+\epsilon}-\alpha\left(\delta(x-a)+\delta(x+a)\right)\psi(x)dx$$
$$\Delta\left(\frac{d\psi}{dx}\right)_{x=p} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\psi(p).$$

Agora observamos que, uma vez que o potencial é par, podemos supor que as soluções possuem paridade definida (todas são pares ou ímpares), pois é sempre possível encontrar uma base de soluções pares ou ímpares neste caso[2]. Buscaremos então soluções pares e ímpares, começando com soluções pares. Separando o domínio em três regiões onde o potencial é nulo e impondo que a solução seja par, obtemos

$$\psi_{par}(x) = \begin{cases} Ae^{kx} & \text{se } x \leqslant -a \\ B\left(e^{kx} + e^{-kx}\right) & \text{se } -a < x \leqslant a \\ Ae^{-kx} & \text{se } x > a \end{cases}$$

Possuímos agora as condições de continuidade de ψ e descontinuidade da derivada. A imposição da paridade faz com que as condições em $-a$ e a são redundantes, logo temos duas condições. Impondo a continuidade em $x = a$ obtemos

$$\begin{aligned} B\left(e^{ka} + e^{-ka}\right) &= Ae^{-ka} \\ B &= A\frac{e^{-ka}}{e^{ka} + e^{-ka}}. \end{aligned}$$

Impondo agora a condição para a derivada:

$$\begin{aligned} \Delta\left(\frac{d\psi_{par}}{dx}\right)_{x=a} &= -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}Ae^{-ka} \\ -Ake^{-ka} - Bk\left(e^{ka} - e^{-ka}\right) &= -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}Ae^{-ka} \\ Ae^{-ka}\left(\frac{2m\alpha}{\hbar^2} - k\right) - Ake^{-ka}\frac{e^{ka} - e^{-ka}}{e^{ka} + e^{-ka}} &= 0 \\ \left(\frac{2m\alpha}{\hbar^2} - k\right)\left(e^{ka} + e^{-ka}\right) - k\left(e^{ka} - e^{-ka}\right) &= 0 \\ \frac{2m\alpha}{\hbar^2}\left(e^{ka} + e^{-ka}\right) &= k\left(e^{ka} - e^{-ka} + e^{ka} + e^{-ka}\right) \\ \frac{m\alpha}{\hbar^2}\left(1 + e^{-2ka}\right) &= k \end{aligned}$$

As funções de k de ambos os membros da expressão anterior devem coincidir. Observando a Figura 2, notamos que os valores de k permitidos são aqueles na intersecção dos dois gráficos. Há portanto apenas um valor de k permitido neste caso, que chamaremos k_{par}.

Procederemos de forma semelhante agora, porém buscando soluções ímpares. Estas soluções possuem a forma

$$\psi_{mpar}(x) = \begin{cases} -Ae^{kx} & \text{se } x \leqslant -a \\ B\left(e^{kx} - e^{-kx}\right) & \text{se } -a < x \leqslant a \\ Ae^{-kx} & \text{se } x > a \end{cases}$$

[2]Note que se $\psi(x)$ é solução da equação de Schrödinger, então $\psi(-x)$ também o é, se o potencial é par, e $\frac{\psi(x)+\psi(-x)}{\sqrt{2}}$ e $\frac{\psi(x)-\psi(-x)}{\sqrt{2}}$ são, respectivamente, soluções par e ímpar da equação de Schrödinger.

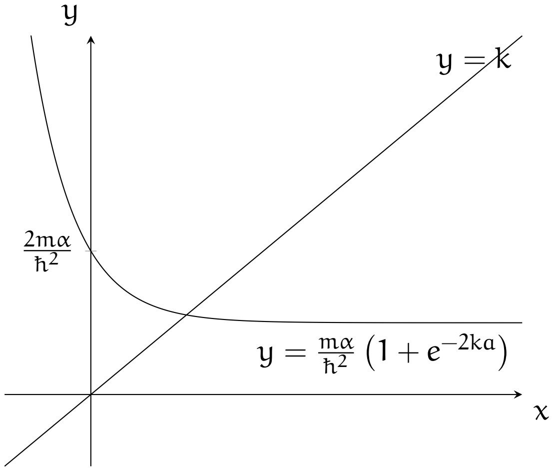

Figura 2: Valores de k permitidos para soluções pares do poço-delta duplo.

Impondo a condição de continuidade em $x = a$, temos

$$B\left(e^{ka} - e^{-ka}\right) = Ae^{-ka}$$
$$B = A\frac{e^{-ka}}{e^{ka} - e^{-ka}}.$$

Por outro lado, impondo que a derivada satisfaça à condição já deduzida,

$$\Delta\left(\frac{d\psi_{mpar}}{dx}\right)_{x=a} = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}Ae^{-ka}$$
$$-Ake^{-ka} - Bk\left(e^{ka} + e^{-ka}\right) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}Ae^{-ka}$$
$$Ae^{-ka}\left(\frac{2m\alpha}{\hbar^2} - k\right) - Ake^{-ka}\frac{e^{ka} + e^{-ka}}{e^{ka} - e^{-ka}} = 0$$
$$\left(\frac{2m\alpha}{\hbar^2} - k\right)\left(e^{ka} - e^{-ka}\right) - k\left(e^{ka} + e^{-ka}\right) = 0$$
$$\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\left(e^{ka} - e^{-ka}\right) = k\left(e^{ka} + e^{-ka} + e^{ka} - e^{-ka}\right)$$
$$\frac{m\alpha}{\hbar^2}\left(1 - e^{-2ka}\right) = k$$

Há agora duas situações distintas. Quando $\alpha > \hbar^2/(2ma)$ a derivada do membro direito é maior que 1 em $k = 0$, portanto temos a situação no gráfico da direita da Figura 3: além de $k = 0$ - inválido, pois não-normalizável - temos mais um único valor de k permitido, que chamaremos k_{mpar}. Se $\alpha < \hbar^2/(2ma)$, por outro lado, não há valor de k permitido nesta situação (cf. gráfico da esquerda na Figura 3).

A solução geral quando $E < 0$ depende portanto do valor de α: para $\alpha > \hbar^2/(2ma)$ a solução é combinação linear de ψ_{par} e ψ_{impar}. Senão, a solução é ψ_{par}.

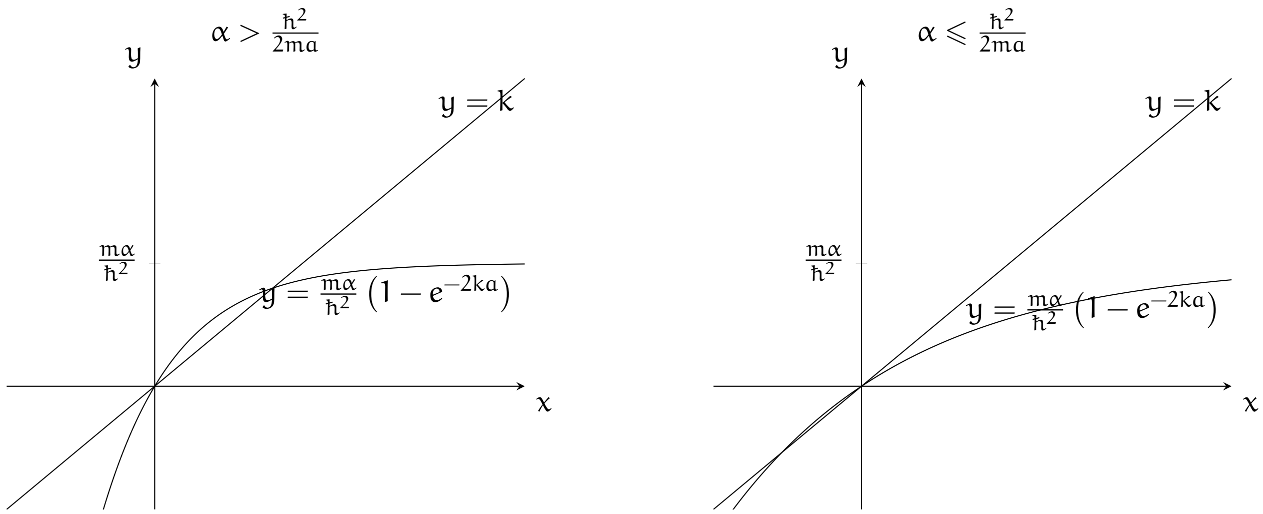

Figura 3: Valores de k permitidos para soluções ímpares do poço-delta duplo (para $\alpha > \hbar^2/(2ma)$ e $\alpha \leqslant \hbar^2/(2ma)$).

(b) Como $\lim_{x\to\pm\infty} V(x) = 0$, a condição de estado ligado é $E < 0$.

6. Descreva a função de onda para quaisquer valores de x para o potencial $V(x)$ mostrado abaixo. Assuma que a energia $E < V_0$. Você deve descrever se é um estado ligado ou um estado de espalhamento, e se possue soluções evanescentes. Não é necessário calcular a função de onda.

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < x < a \\ 0 & \text{qualquer outro valor.} \end{cases}$$

Resolução: Para regiões do espaço onde o potencial é constante, sabemos que as soluções da equação de Schrödinger são de dois tipos: ondas planas e ondas evanescentes, a primeira ocorrendo quando a energia da partícula é maior que o potencial e a segunda no caso contrário. Neste caso temos necessariamente $E < V_0$, logo a solução para x entre 0 e a é do tipo evanescente. Há então duas possibilidades: $E < 0$, caso em que a solução em todo o espaço seria evanescente, e $E > 0$, onde a solução para $x < 0$ e $x > a$ é do tipo onda plana. O primeiro caso, entretanto, é impossível pelo Problema 13 da lista 1. Temos portanto $E > 0$, um estado de espalhamento. Há então essencialmente duas situações: uma em que a partícula incide da esquerda, podendo tunelar pela barreira de potencial, e outra em que a partícula incide da direita. O esboço destas situações pode ser visto na Figura 4.

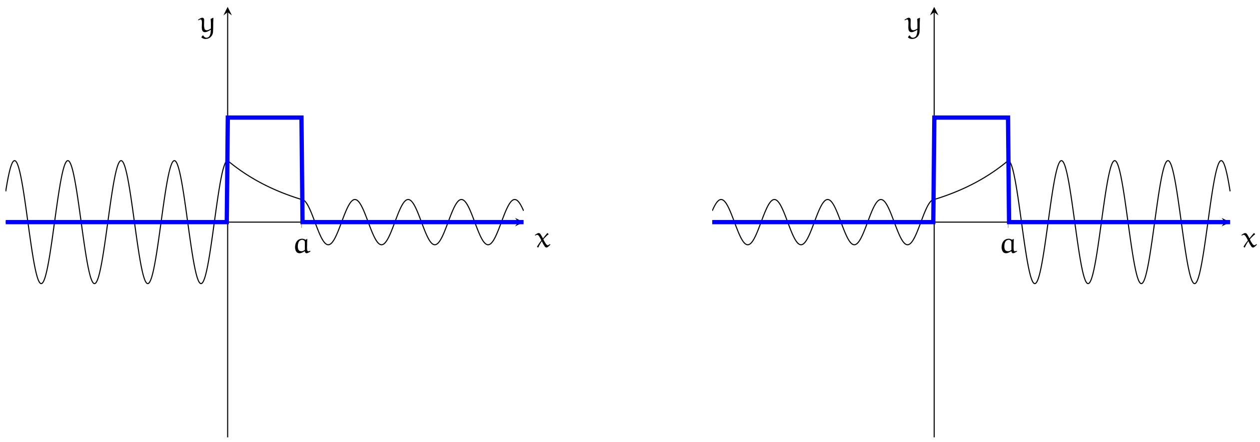

Figura 4: Comportamento qualitativo das soluções do potencial do problema 6.