Resolução da Lista 1 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. 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

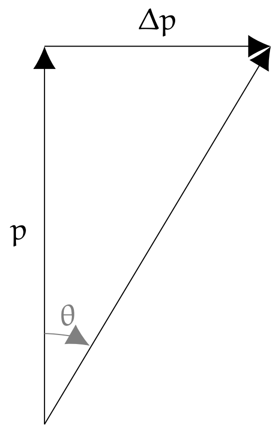

Figura 1: Determinação da abertura angular do padrão de difração utilizando o princípio da incerteza: note que $\Delta p/p = \tan\theta \approx \theta$ para pequenos ângulos.

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 $\lambda = \frac{h_{hip}}{p} = \frac{h_{hip}}{mv}$, então $h_{hip} = mv\lambda = mvD$. Substituindo $m = 82$ kg, $v = 0.5$ m/s e $D = 0.90$ m temos $h_{hip} = 36.9$ J·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

i. uma massa de 1g com velocidade de 1 m/s.

ii. um elétron com energia de 200 eV.

iii. um elétron com energia de 50 GeV.

iv. o próton do experimento LHC com energia de 1.3 TeV.

v. o neutron, a partícula fundamental, quando tem velocidades não-relativísticas é chamado de nêutron térmico. O nêutron tem massa de $1.67 \cdot 10^{-27}$ 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 $p = mv = 10^{-3}$ kg m s^{-1}, logo

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

ii. Este elétron é não-relativístico pois, sendo a massa do elétron $m_e = 511$ 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 $h = 4.14 \cdot 10^{-15}$ eV·s temos

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

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 $p = 50$ GeV/c e portanto

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{4.14\cdot 10^{-15}}{50\cdot 10^{9}}\ \mathrm{s}\cdot c\\ &= 2.484\cdot 10^{-17}\ \mathrm{m}\\ &= 2.484\cdot 10^{-7}\ \text{Å}\end{aligned}$$

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

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

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

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

Portanto o comprimento de De Broglie deste nêutron vale

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

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 mantêm 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 $\text{sinc}^2\left(\frac{\pi a \sin\theta}{\lambda}\right) \to 1$, 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).

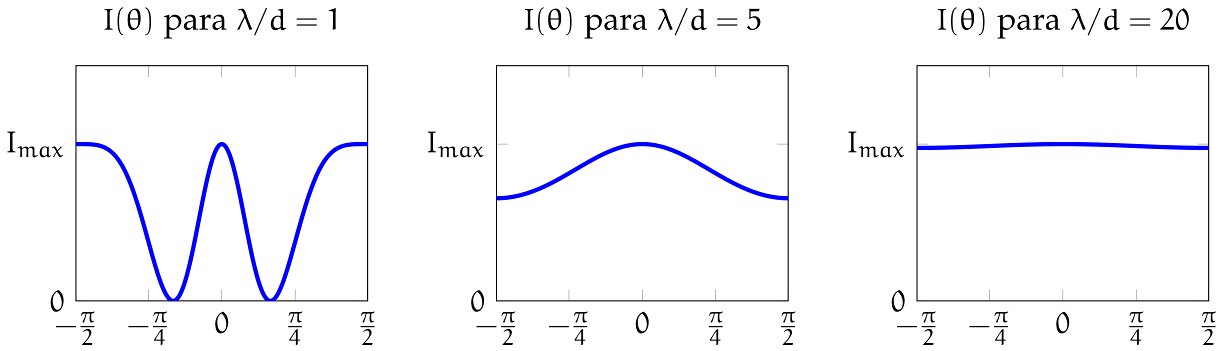

Figura 2: Comportamento de $I(\theta)$ conforme λ/d aumenta.

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. Concluímos que o padrão de máximos e mínimos é "comprimido", a variação da intensidade tão brusca que sequer seria perceptível (cf. a Figura 3)

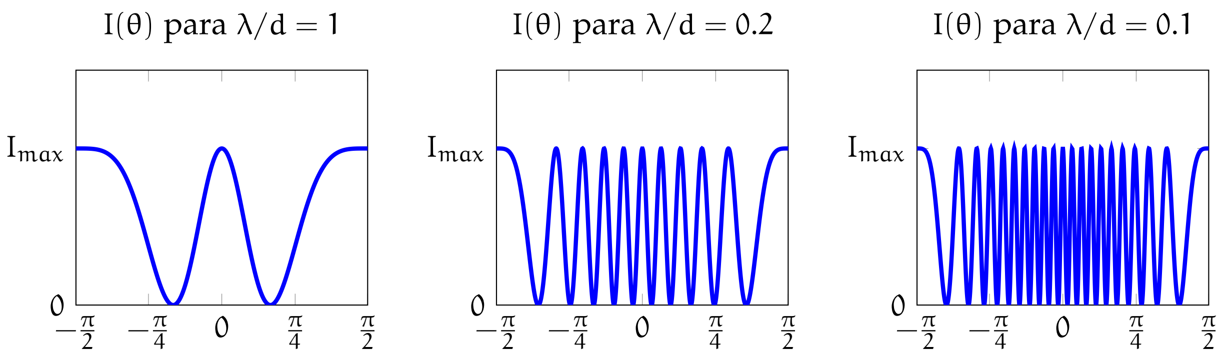

Figura 3: Comportamento de $I(\theta)$ conforme λ/d diminui.

(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 $K_a \geqslant 0$,

$$\|\mathbf{p_f}\| \leqslant \|\mathbf{p_i}\|$$

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

$$\lambda_f \geqslant \lambda_i.$$

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:
   Assumindo que a resistência do ar é linear na velocidade o comprimento de onda diminui até que a pedra atinja a velocidade limite, 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. Após atingir a velocidade limite o comprimento de De Broglie se mantêm constante.

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

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

(b) O mesmo raciocínio do item anterior fornece:

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

(c) Novamente o mesmo procedimento nos dá:

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

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.

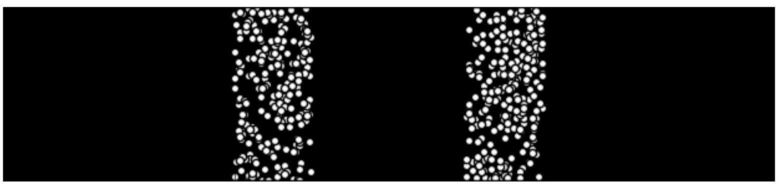

Figura 4: Padrão observado no experimento da dupla fenda para partículas clássicas.

(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:

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

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

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

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:

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

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.

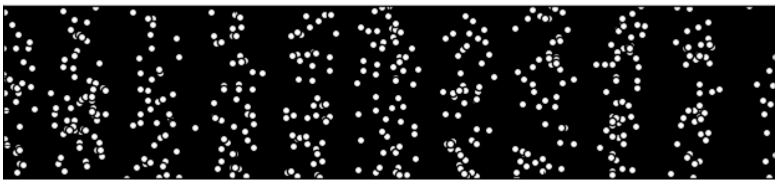

Figura 6: Padrão observado no experimento da dupla fenda para partículas quânticas com comprimento de onda da ordem da separação entre as fendas.

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

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

(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)

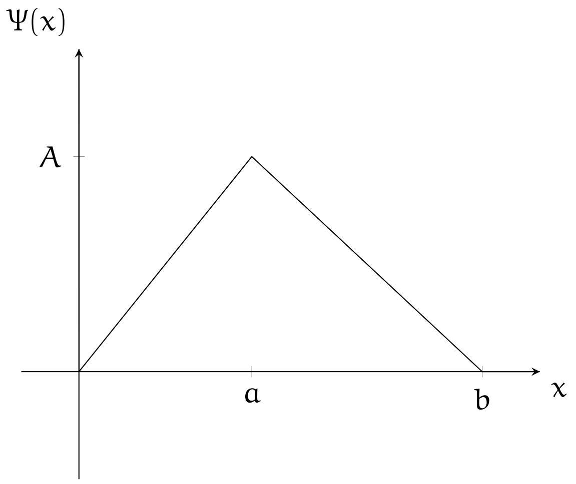

Figura 7: Gráfico de $\Psi(x)$.

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

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

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

Quando $b = a$ temos

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

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

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

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

(e) Temos

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

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

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

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

(a) Normalize a função de onda Ψ.

(b) Determine o valor esperado de x e x^2.

(c) 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

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

(c) Como $\sigma^2 = \left\langle x^2 \right\rangle - \langle x \rangle^2$ 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.

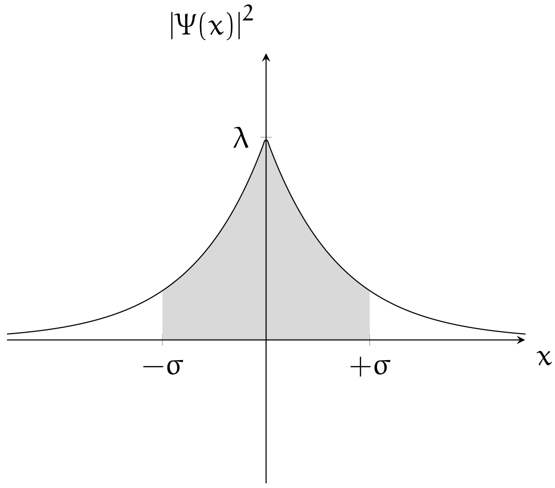

Figura 8: Gráfico de $|\Psi(x)|^2$.

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

$$
\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{-\sigma} |\Psi(x)|^2 dx + \int_{\sigma}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx &= 1 - \int_{-\sigma}^{\sigma} |\Psi(x)|^2 dx \\
&= 1 - \int_{-\sigma}^{\sigma} \lambda e^{-2\lambda|x|} dx \\
&= 1 - 2\lambda \int_{0}^{\sigma} e^{-2\lambda x} dx \\
&= 1 - 2\lambda \frac{e^{-2\lambda x}}{-2\lambda}\Big|_0^{\sigma} \\
&= 1 + e^{-2\lambda\sigma} - 1 \\
&= e^{-2\lambda \frac{1}{\sqrt{2}\lambda}} \\
&= e^{-\sqrt{2}} \\
&= 0.243.
\end{aligned}
$$

12. Seja o poço infinito. Em vez da solução dada na Equação 2.28 do Griffiths, página 32, assuma 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

$$
\begin{aligned}
\psi(0,t) &= 0 \\
C + D &= 0 \\
C &= -D
\end{aligned}
$$

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

$$
\begin{aligned}
\psi(a,t) &= 0 \\
C\left(e^{ika} - e^{-ika}\right) &= 0 \\
\sin(ka) &= 0.
\end{aligned}
$$

Concluímos então que os valores permitidos de k são

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

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

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

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

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

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

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

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 $E_n = n^2h^2/(8ma^2)$.

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,

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

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

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

Sendo V_{min} o valor mínimo de $V(x)$, se $E < V_{min}$ é claro que $V(x) - E \geqslant V_{min} - E > 0$, 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 $\mathrm{Re}(\Psi)$ e $\mathrm{Im}(\Psi)$ em algum momento se afastarem do eixo x (o que necessariamente deve ocorrer para que as integrais $(\mathrm{Re}(\Psi))^2$ e $(\mathrm{Im}(\Psi))^2$ não se anulem), eles se curvariam para fora do eixo x, e portanto se afastariam deste eixo nos limites $x \to \pm\infty$ (cf. Figura 9), fazendo com que as integrais citadas não sejam convergentes. Isto implica que a integral $\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\mathrm{Re}\left(\Psi(x)\right)\right)^2 + \left(\mathrm{Im}\left(\Psi(x)\right)\right)^2 dx$ 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* $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ *função duas vezes derivável tal que existe* $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}_+$ *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 $[a_1, a_2]$. ■

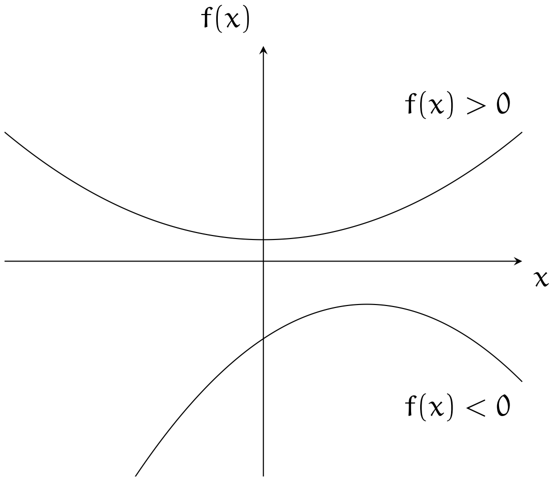

Figura 9: Ilustração de como a concavidade/convexidade de uma função f impede que $\lim_{x\to\pm\infty} f(x) = 0$.

Teorema 1. *Seja* $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ *função duas vezes derivável tal que existe* $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}_+$ *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 $f'(a) \geqslant 0$ é impossível que $\lim_{x\to\infty} f(x) = 0$, 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 $\lim_{x\to-\infty} f(x) = 0$ 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 $\lim_{x\to\infty} f(x) = 0$ 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 $\lim_{x\to\infty} f(x) = 0$ é falsa concluímos que a integral de f^2 na reta não pode convergir, logo f^2 não é normalizável.

$\blacksquare$