F689 Mecânica Quântica
Turma A
1^o Semestre de 2017
Gabarito da Prova 1

Nome: RA:

1. Seja o potencial V(x) tal que seja uma função par: $V(x) = V(-x)$

   (A) **Mostre** que em geral com um potencial sendo um função par podemos classificarmos as soluções em duas categorias:
   (a) soluções pares $\Psi_{\text{par}}(x) = \Psi_{\text{par}}(-x)$ e
   (b) soluções ímpares $\Psi_{\text{impar}}(x) = -\Psi_{\text{impar}}(-x)$.
   Resposta:
   • **Item A:**
   A equação de Schroendinger independente do tempo é

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

Vamos renomear a variavel indepedente :$x \to x'$:

A equação de Schroendinger independente do tempo é

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

que é verdade $\forall x'$. Então podemos colocar $x' \to -x$,

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d(x')^2}\Psi(x') + V(x')\Psi(x') &= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(-x) + V(-x)\Psi(-x) \\ &= E\Psi(x') = E\Psi(-x) \end{aligned}$$

Comparando os termos em azul temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d(x')^2}\Psi(x') + V(x')\Psi(x') = E\Psi(x') \quad (1)$$

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

Para um potencial par temos $V(-x) = V(x)$ então podemos reescrever:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \tag{3}$$
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Psi(-x) + V(x)\Psi(-x) = E\Psi(-x) \tag{4}$$

Então significa que se $\Psi(x)$ e $\Psi(-x)$ são soluções da Equação de Schorendinger para um potencial par. Podemos construir estas soluções da forma:

$$\Psi(x) = \frac{\Psi(x) + \Psi(x)}{2} + \frac{\Psi(-x) - \Psi(-x)}{2} = \frac{\Psi(x) + \Psi(-x)}{2} + \frac{\Psi(x) - \Psi(-x)}{2} = \Psi_{\text{par}} + \Psi_{\text{impar}}$$

onde somamos e diminuimos um quantidade nula e na segunda igualdade rearranjamos os termos. Na terceira igualdade identificamos uma função par: $\Psi_{\text{par}} \equiv \dfrac{\Psi(x) + \Psi(-x)}{2}$ e uma função ímpar: $\Psi_{\text{impar}} \equiv \dfrac{\Psi(x) - \Psi(-x)}{2}$.

(B) O valor médio da posição, $\langle x \rangle \equiv \int dx \Psi^*(x)\,(x)\,\Psi(x)$, para as soluções pares de um potencial par é (Justifique a resposta) ?

(a) Não Zero

(b) Zero.

• **Resposta Item B:**
O valor médio da posição é dado por $\langle x \rangle \equiv \int dx \Psi^*(x)\,(x)\,\Psi(x)$. Para uma função par, conforme definido no item anterior temos que $\Psi_{\text{par}} \equiv \dfrac{\Psi(x) + \Psi(-x)}{2}$.

O integrando é o produto de três funções : PAR $\times$ IMPAR $\times$ PAR, sendo portanto um função impar. Portanto no intervalo de $-\infty$ a ∞ a integral é nula.

(C) O valor médio do momento, $\langle p_x \rangle \equiv \int dx \Psi^*(x)\left(-i\hbar\dfrac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x)$, para as soluções pares de um potencial par é (Justifique a resposta.)?

(a) Zero

(b) Não Zero.

- **Resposta Item C:**

O valor médio do momento, $\langle p_x \rangle \equiv \int dx \Psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x)$. A quantidade

$$\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x) \tag{5}$$

para funcções pares $\Psi(x)$ é, fazendo $x \to x'$:

$$\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right) \Psi(x') \tag{6}$$

que vale $\forall x'$. Fazendo o caso particular de $x' \to -x$ temos

$$\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right) \Psi(x') \bigg|_{x' \to -x} = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial (-x)} \right) \Psi(-x) = \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial (-x)} \right) \Psi(x) = \left(+i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x)$$

portanto a função 6 é um função ímpar. Com isto o integrando do valor médio do momento para funções pares é uma função ímpar e portanto a integral é nula.

(D) Assuma um potencial da forma

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a \\ \infty & |x| > a \end{cases}$$

Determine a solução da Equação de Schroedinger independente do tempo para qualquer x e as respectivas possíveis energias.

- **Resposta Item D**:

A equação de Schorendinger para $|x| < a$ é

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

com soluções :

$$\Psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

As condições de contorno são $\Psi(a) = \Psi(-a) = 0$ que impôs os vínculos:

$$\Psi(a) = A \sin ka + B \cos ka = 0 \quad \Psi(-a) = -A \sin ka + B \cos ka = 0$$

Se somarmos as equações temos:

$$B \cos ka = 0 \qquad \begin{cases} \text{B} = 0 \\ \cos ka = 0 \end{cases} \tag{7}$$

Temos dois tipos de soluções:
$B = 0$ que implica a solução ser $\Psi(x) = A \sin kx$
$B \neq 0$ que implica a solução ser $\Psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$
Do item A desta questão vemos que para um potencial par então temos soluções pares e ímpares, então podemos escolher para o segundo caso, quando $B \neq 0, implicaque$ A=0, e temos uma função par. Outra forma de ver isto é voltar as condições de contorno: se subtraímos as duas condições teríamos : $A \sin ka + B \cos ka - (-A \sin ka + B \cos ka) = 2A \sin ka = 0$ Como $B \neq 0$, não podemos ter $A = 0$ e portanto a condição é $\sin ka = 0$. A solução para $B = 0$ é uma função ímpar.
Portanto a solução é

$$\Psi(x) = \begin{cases} A \sin kx & \text{com} \sin ka = 0 \quad \to k_n a = n\pi \quad n = 1, 2, 3, .. \\ B \cos kx & \text{com} \cos ka = 0 \quad \to k_{n'} a = (n' + 1/2)\,\pi \quad n' = 0, 1, 2, 3, .. \end{cases} \tag{8}$$

o caso n=0 não é possível seria uma função de onda nula.
sendo as soluções pares e ímpares e a energia é respectivamente $E_n = \dfrac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$ e $E_{n'} = \dfrac{\hbar^2 k_{n'}^2}{2m}$. A condição de normalização é

$$\int_{-a}^{a} dx |\Psi(x)|^2 = 1 \tag{9}$$

que implica

$$\int_{-a}^{a} dx A^2 |\sin kx|^2 = 1 \quad \int_{-a}^{a} dx B^2 |\cos kx|^2 = 1 \quad \to A = \sqrt{\frac{1}{a}} = B \tag{10}$$

então

$$\Psi(x)=\begin{cases}\sqrt{\frac{1}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) n=1,2,3,..\\ \sqrt{\frac{1}{a}}\cos\left(\frac{(n'+1/2)\pi x}{a}\right) \quad n'=0,1,2,3,..\end{cases} \tag{11}$$

A expressão de $(n'+1/2)$ são número semi-inteiros ímpares então podemos escrever: $(n'+1/2)=\frac{q}{2}$, onde q=1,3,5,...

(E) A função de onda de uma partícula de massa m é no instante inicial é

$$\psi(x,t=0)=\sqrt{\frac{1}{a}}\sin\frac{3\pi x}{a}$$

Encontre os coeficientes da expansão da função de onda inicial em termos da soluções encontradas no item (D).

• **Resposta Item E**:
Dada a função de onda inicial

$$\psi(x,t=0)=\sqrt{\frac{1}{a}}\sin\frac{3\pi x}{a}$$

queremos os coeficientes da nossa solução em termos da função de onda inicial. Queremos os coeficientes:

$$\psi(x,t=0)=\sum_n c_n\Psi_n \quad c_n=\int\psi(x,t=0)(\Psi_n)^*$$

onde Ψ_n é a solução 11, primeiro para soluções ímpares:

$$c_n=\int_{-a}^{a}dx\sqrt{\frac{1}{a}}\sin\frac{3\pi x}{a}\left(\sqrt{\frac{1}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}\right)^* \tag{12}$$

como senos e cossenos são funções ortonormais tempos que a integral só não é não nula se n=3.
Segundo para soluções pares, chamamos os coeficientes de d_n

$$d_n=\int_{-a}^{a}dx\sqrt{\frac{1}{a}}\sin\frac{3\pi x}{a}\left(\sqrt{\frac{1}{a}}\cos\frac{(n'+1/2)\pi x}{a}\right)^* \tag{13}$$

onde q é ímpar. Como senos e cossenos são funcções ortonormais então a integral só não nula se $3 = (n' + 1/2)$, que a solução é $n' = 5/2$, mas é n' somente é inteiro. então a integral é nula:

$$d_n = 0 \quad c_n = \delta_{n3} \tag{14}$$

Outra forma de achar a resposta é que o integrando 13 é uma função ímpar e portanto $d_n = 0$.

2. Seja o potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & x > a \\ \infty & x < 0 \end{cases}$$

Com soluções da Equação de Schroedinger independente do tempo da forma $\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$. No instante t=0 a função de onda é

$$\psi(x, t=0) = \begin{cases} \left(\frac{1+i}{2}\right)\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) & 0 < x < a \\ 0 & x > a \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$

(A) Determine $\Psi(x,t)$.

•Resposta

Da equação de Schroendinger dependente do tempo temos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)$$

É dado a função de onda independente do tempo: $\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$. Substituindo na equação de Schroendinger dependente do tempo para a região $0 < x < a$. Nesta região o potencial é nulo. Sabemos que nas outras regiões $\Psi = 0$. Então

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi x}{a}\right)^2\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)$$

Portanto para achar a dependência temos que resolver esta equação que será

$$\Psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)e^{-iE_n t/\hbar}$$

com a energia $E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2$.
A solução no instante t=0 é dada e se pede achar $\Psi(x,t)$. Observando vemos que a função em t=0 é composta de duas soluções estacionárias para n=1 e n=2. Então:

$$\psi(x,t=0) = \left(\frac{1+i}{2}\right)\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) = \left(\frac{1+i}{2}\right)\psi_{n=1} + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\psi_{n=2}$$

então a solução em $t \neq 0$ é

$$\psi(x,t) = \left(\frac{1+i}{2}\right)\psi_{n=1}e^{-iE_{n=1}t/\hbar} + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\psi_{n=2}e^{-iE_{n=2}t/\hbar}$$

(B) Qual é o valor médio da energia para este estado $\Psi(x,t)$.

- **Resposta**

O valor médio da energia é $\langle E\rangle \equiv \Psi(x,t)^* E\Psi(x,t)$:

$$\begin{aligned}\langle E\rangle = \int dx \left\{\left(\frac{1-i}{2}\right)\psi^*_{n=1}e^{iE_{n=1}t/\hbar} + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\psi^*_{n=2}e^{iE_{n=2}t/\hbar}\right\} \times \\ H\left\{\left(\frac{1+i}{2}\right)\psi_{n=1}e^{-iE_{n=1}t/\hbar} + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\psi_{n=2}e^{-iE_{n=2}t/\hbar}\right\} = \\ \int dx \left\{\left(\frac{1-i}{2}\right)\psi^*_{n=1}e^{iE_{n=1}t/\hbar} + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\psi^*_{n=2}e^{iE_{n=2}t/\hbar}\right\} \times \\ \left\{\left(\frac{1+i}{2}\right)E_1\psi_{n=1}e^{-iE_{n=1}t/\hbar} + \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)E_2\psi_{n=2}e^{-iE_{n=2}t/\hbar}\right\} =\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle E\rangle = \left|\frac{1-i}{2}\right|^2 \int dx E_1\psi^*_{n=1}e^{iE_{n=1}t/\hbar}\psi_{n=1}e^{-iE_{n=1}t/\hbar} + \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 \int dx E_2\psi^*_{n=2}e^{iE_{n=2}t/\hbar}\psi_{n=2}e^{-iE_{n=2}t/\hbar} \\ + \left(\frac{1-i}{2}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\int dx \int \psi^*_{n=1}e^{iE_{n=1}t/\hbar}E_2\psi_{n=2}e^{-iE_{n=2}t/\hbar} \\ + \left(\frac{1+i}{2}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)\int dx E_1\psi_{n=1}e^{-iE_{n=1}t/\hbar}\psi^*_{n=2}e^{iE_{n=2}t/\hbar}\end{aligned} \tag{15}$$

onde os termos em azul sõ termos de interferência de dois estados ortogonais que resulta em integrais nulas. Os outros termos são de estados normalizados e portanto a integral é 1. Então:

$$\langle E\rangle = \left|\frac{1-i}{2}\right|^2 E_1 + \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 E_2 = \frac{1}{2}E_1 + \frac{1}{2}E_2 \tag{16}$$

(C) Qual é a probabilidade de uma medida da energia seja $E = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$?

• **Resposta**

Comparando com os valores de energia temos que $E = E_{n=1}$. a probabilidade será

$$\begin{aligned} P(E = E_1) &= \left| \int dx (\Psi_{E=E_1)})^* \Psi(x,t) \right|^2 = \\ &\left| \int dx \left\{ (\psi_{n=1})^* e^{iE_{n=1}t/\hbar} \right\} \left\{ \left(\frac{1+i}{2} \right) \psi_{n=1} e^{-iE_{n=1}t/\hbar} + \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right) \psi_{n=2} e^{-iE_{n=2}t/\hbar} \right\} \right|^2 \\ &= \left| \left(\frac{1+i}{2} \right) \right|^2 = \frac{1}{2} \end{aligned} \tag{17}$$

3. Responda as questões justificando se a sentença está correta ou não.

(A) Dados duas soluções **dependentes** do tempo da equação de Schroedinger, eu posso sempre usar combinaçãoes lineares arbitrárias para obter outras soluções.

Resposta

Se uma solução Ψ_1 e Ψ_2 são soluções da equação de Schroedinger dependente do tempo, então:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi_{1,2}(x,t) + V(x)\Psi_{1,2}(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_{1,2}(x,t)$$

então sempre podemos ter $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$ como solução da equação de Schroedinger dependente do tempo.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2\right) + V(x)\left(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2\right) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2\right)$$

Então a afirmação é **VERDADEIRA**.

(B) Dados duas soluções **independentes** do tempo da equação de Schroedinger, eu posso sempre usar combinações lineares arbitrárias para obter outras soluções.

Resposta

Se uma solução Ψ_1 e Ψ_2 são soluções da equação de Schroedinger independente do tempo, então:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi_{1,2}(x) + V(x)\Psi_{1,2}(x) = iE_{1,2}\Psi_{1,2}(x)$$

Então uma combinação linear arbitrária $\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2\right) + V(x)\left(c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2\right) = c_1E_1\Psi_1(x) + c_2E_2\Psi_2(x) \neq \text{constante} \times \left(c_1\Psi_1(x) + c_2\Psi_2(x)\right)$$

Então a afirmação é **FALSA**.

(C) Se o valor esperado da energia é E_0, então ao medirmos a energia mais provavelmente obteremos a energia E_0.

Resposta

O valor esperado da energia é a média dos valores possíveis. O Valor mais provável é o pico da distribuição e não necessariamente é o valor médio.

Então a afirmação é **FALSA**.

(D) Se pode medir simultaneamente o momento e a energia de uma partícula livre.

Resposta

Para uma partícula livre a energia é dada por $H = E = \dfrac{p^2}{2m}$ e p é o momento e podemos definir o momento e a energia da partícula. Para partículas no poço infinito não é o caso e podemos ter diferentes valores de momento para o mesmo valor de energia.

Então a afirmação é **VERDADEIRA**.

(E) As funções de onda e sua derivada primeira precisam serem contínuas, a menos que exista pontos com potencial infinito.

Resposta

Para potenciais finitos sempre precisamos que a função de onda e sua derivada primeira seja contínua, mas para potencias infinitos a derivada primeira é descontínua. Um exemplo foi dado na Lista 2.

Então a afirmação é **VERDADEIRA**.

(F) A probabilidade de encontrar um partícula que está num estado estacionário não é independente do tempo.

Resposta

Uma partícula que está num estado estacinório irá se manter neste estado para sempre. Portanto a probabilidade é independente do tempo. Outra forma de ver isto é que os valores médios são da forma $\langle(\hat{A})\rangle = \Psi^*(A)\Psi$, para um estado estacionário temos que $\Psi(x,t) \propto \psi(x)e^{-IEt/\hbar}$ então $\langle(\hat{A})\rangle \propto \psi^*(A)\psi$ e portanto fica independente do tempo.

Então a afirmação é **FALSA**.

(G) A probabilidade de encontrar um partícula que está numa combinação de dois estados estacionários não é independente do tempo.

Resposta

Uma partícula que está numa combinação de estados estacinórios terá que os valores médios são da forma $\langle(\hat{A})\rangle = \Psi^*(A)\Psi$, para um estado estacionário temos que $\Psi(x,t) \propto \sum_n c_n\psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar}$ então $\langle(\hat{A})\rangle \propto \sum_n c_n\psi_n(x)^*e^{iE_nt/\hbar}(A)\sum_m c_m\psi_m(x)e^{-iE_mt/\hbar} \propto e^{-i(E_n-E_n)mt/\hbar}$ e portanto fica dependente do tempo.
Então a afirmação é **VERDADEIRA**.

(H) O valor esperado do momento só pode ter valores reais e nunca imaginários.
O valor esperado do momento é defi-

nido como $\langle p_x \rangle \equiv \int dx \Psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(x)$. Integrando por partes podemos mostrar que é uma quantidade real.

Então a afirmação é <u>**VERDADEIRA**</u>.