Mecânica Quântica — 7600022

Segunda Lista — para praticar para a prova do dia 29/8/2017

1. Considere um elétron no poço infinito definido pelo potencial
$$V(x) = \begin{cases} 0 & (|x| < a/2) \\ \infty & (|x| > a/2). \end{cases}.$$
Se o elétron se encontrar no estado fundamental, qual será a corrente de probabilidade $J(x,t)$? *Sugestão: lembre-se da expressão $J(x,t) = (\hbar/m)\Im[\psi^*(x,t)\partial\psi(x,t)/\partial x]$, onde $\Im$ denota a parte imaginária.*

2. Encontre a densidade de corrente para a função de onda
$$\psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)},$$
onde A, k, e ω são constantes.

3. Um elétron é livre, isto é, está sujeito a um potencial $V(x) = 0$.
   (a) Encontre as autofunções de seu Hamiltoniano, a menos de uma constante multiplicativa.
   (b) Mostre que para cada autovalor E, há duas autofunções.
   (c) Mostre explicitamente que uma combinação linear qualquer das autofunções no item anterior é autofunção do mesmo Hamiltoniano.

4. Considere agora um elétron sujeito ao potencial
$$V(x) = \begin{cases} 0 & (x > 0) \\ \infty & (x < 0). \end{cases}$$
   (a) Encontre as autofunções do Hamiltoniano correspondente
   (b) Verifique que essas autofunções são não-degeneradas
   (c) Calcule a densidade de corrente para essas autofunções

5. Dado o operador $D_x = \partial/\partial x$, o operador xD_x é linear?

6. Define-se o exponencial de um operador A pela igualdade
$$e^A = 1 + A + \frac{1}{2!}A^2 + \frac{1}{3!}A^3 + \dots.$$
Encontre a função $e^{aD_x}\psi(x)$, onde a é uma constante com dimensão de distância. *Sugestão: lembre-se da série de Taylor.*

7. Se $\varphi(x)$ for uma autofunção do operador A com operador λ, mostre que $e^A\varphi(x) = e^\lambda\varphi(x)$.

8. Quanto vale $e^{(-i/\hbar)Ht}\psi(x,t)$, onde H é o Hamiltoniano e $\psi(x,t)$ uma função de onda de um dado sistema. *Lembre-se de que $\psi(x,t)$ obedece à Equação de Schrödinger e note que este problema é semelhante ao problema 6.*

9. Repita o problema anterior para uma autofunção $\varphi_n(t)$ do Hamiltoniano, com autovalor E. *Neste caso, é mais fácil seguir o procedimento do problema 7.*

10. Dois elétrons se encontram no poço do problema 1. Um está no estado fundamental e o outro, no primeiro estado excitado.
    (a) Qual é a Equação de Schrödinger independente do tempo para esse sistema?
    (b) Mostre que $\psi(x_1, x_2) = \varphi_1(x_1)\varphi_1(x_1)$ obedece à Equação de Schrödinger independente do tempo e às condições de contorno em $x = \pm a/2$, onde $\varphi_n(x)$ é a autofunção do poço infinito para um só elétron.
    (c) Apesar de satisfazer a Equação de Schrödinger independente do tempo e às condições de contorno, a função $\psi(x_1, x_2, t)$ não é a função de onda do par. Explique por quê e encontre a função de onda correta.

1)

Esse problema já foi resolvido na lista 1 para $\psi(x)$. Basta separar $\psi(x)$ em soluções pares e soluções ímpares:

$$\psi^{(par)} \sim \cos(kx) \qquad e \qquad \underbrace{\psi^{(par)}(\pm a/2) = \psi^{(impar)}(\pm a/2) = 0}_{\text{condição de contorno}}$$

$$\psi^{(impar)} \sim \operatorname{sen}(kx)$$

Usando as condições de contorno conseguimos determinar os k possíveis

$$k = k_n = \frac{n\pi}{a} \begin{cases} n = 1, 3, 5, \dots \text{ para } \psi^{(par)} \\ n = 2, 4, 6, \dots \text{ para } \psi^{(impar)} \end{cases}$$

e usando a condição de normalização:

$$\psi_n^{(par)} = A_n^{(par)} \cos(k_n x)$$

$$\psi_n^{(impar)} = A_n^{(impar)} \operatorname{sen}(k_n x)$$

$$\rightarrow \int_{-a/2}^{+a/2} |\psi_n^{(par)}(x)|^2 dx = \int_{-a/2}^{+a/2} |\psi_n^{(impar)}(x)|^2 dx = 1$$

$$\qquad \| \qquad\qquad\qquad\qquad \|$$

$$|A_n^{(par)}|^2 \frac{a}{2} \qquad\qquad |A_n^{(impar)}|^2 \frac{a}{2}$$

$$\rightarrow \psi_n^{(par)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos(k_n x)$$

$$\psi_n^{(impar)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}(k_n x)$$

$$e \quad \psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=1,3,\dots} C_n \cos(k_n x) + \sqrt{\frac{2}{a}} \sum_{n=2,4,\dots} C_n \operatorname{sen}(k_n x)$$

se o elétron se encontra no estado fundamental, então apenas C_1 não será nulo, portanto:

$$C_n = \delta_{n,1}$$

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\cos(K_1 x) \quad ; \quad K_1 = \frac{\overset{1}{n}\pi}{a} = \frac{\pi}{a}$$

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) = \psi_1(x)$$

lembrando que

$$\psi(x,t) = \sum_n C_n e^{-iE_n t/\hbar}\psi_n(x) = \sum_n \delta_{n1} e^{-iE_n t/\hbar}\psi_n(x)$$

$$\psi(x,t) = e^{-iE_1 t/\hbar}\psi_1(x)$$

$$\text{e} \quad E_n = \frac{\hbar^2 K_n^2}{2m} \rightarrow E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$$

$$\therefore \psi(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}}\exp\left(-\frac{i\hbar\pi^2}{2ma^2}t\right)\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \qquad (1)$$

$$\text{e} \quad J(x,t) = \frac{\hbar}{m}\,\mathrm{Im}\left(\psi^*(x,t)\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x}\right) \qquad (2)$$

$$\psi^*(x,t) = \sqrt{\frac{2}{a}}\exp\left(+\frac{i\hbar\pi^2}{2ma^2}t\right)\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \qquad (3)$$

$$\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial x} = -\frac{\pi}{a}\sqrt{\frac{2}{a}}\exp\left(-\frac{i\hbar\pi^2}{2ma^2}t\right)\operatorname{sen}\left(\frac{\pi x}{a}\right) \qquad (4)$$

logo:

$$\psi^*(x,t)\,\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} = -\frac{2\pi}{a^2}\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\operatorname{sen}\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$ (que é real puro)

$$\rightarrow \operatorname{Im}\left(\psi^*(x,t)\,\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x}\right) = 0$$

$$\therefore J(x,t) = 0$$

2) $$J(x,t) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}\left(\psi^*(x,t) \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} \right)$$

$$\psi^*(x,t) = A e^{-i(kx-\omega t)}$$

$$\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} = ikA e^{i(kx-\omega t)}$$

$$\rightarrow \psi^*(x,t) \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} = ikA^2$$

$$\rightarrow J(x,t) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}(ikA^2) = \frac{\hbar k A^2}{m}$$

3) a) Partícula Livre

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

$$\rightarrow \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

onde $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ou $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \geq 0$

As autofunções naturalmente são

$\psi_k^+(x) = e^{ikx}$ (ou multiplique por uma constante se preferir)

$\psi_k^-(x) = e^{-ikx}$

e $k > 0$

Agora, se preferirmos usar uma notação mais compacta, podemos simplesmente escrever as autofunções de ψ como

$\psi_k(x) = e^{ikx}$, deixando k assumir qualquer valor real.

(ou $k \neq 0$, mas isso não importa, porque $\psi_0 = \text{cte}$ é solução de $\psi''(x) = 0$)

b) $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \rightarrow E$ para $\pm k$

c) Podemos escrever uma combinação linear arbitrária das autofunções de ψ como

$$\psi(x) = \sum_k c_k \psi_k(x)$$

A notação acima já funciona, mas como k é contínuo é mais conveniente escrevermos uma combinação linear arbitrária usando a transformada de Fourier,

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} g(k)\, e^{ikx}\, dk \quad \text{(combinação linear geral)}$$

~~[illegible]~~ (por isso queríamos manter k real na questão (a)).

Se substituirmos $\psi(x)$ na equação de Schrodinger, temos

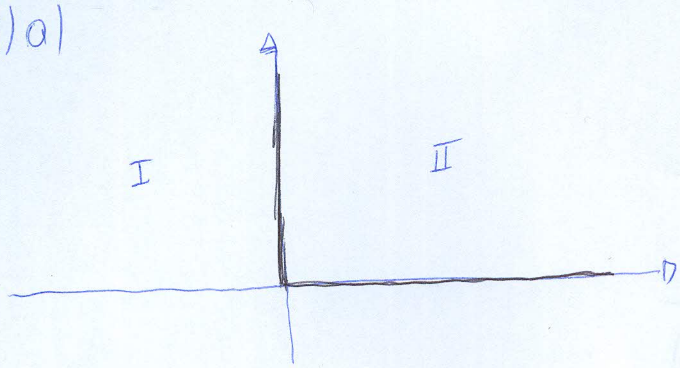
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) = E\psi(x) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi(x)$$

mas $\psi''(x) = (ik)^2 \psi(x) = -k^2 \psi(x)$

$$\Rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot (-k^2)\psi(x) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\psi(x)$$

como queríamos mostrar.

4) a)



para $x < 0$ (região I)

$\psi_I(x) = 0$

para $x > 0$ (região II)

$\psi_{II}(x) = A\,\text{sen}(kx) + B\cos(kx)$

com $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (solução para partícula livre)

da continuidade de ψ:

$0 = \psi_I(0) = \psi_{II}(0) = B \rightarrow B = 0$

$\rightarrow \psi_{II}(x) = A\,\text{sen}(kx)$

Seguindo o mesmo raciocínio da questão 3, podemos escrever as autofunções como

$\psi_k(x) = \text{sen}(kx)$

onde k é real positivo e $x \geq 0$ (para $x < 0 \rightarrow \psi = 0$)

b) $E_k = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$ e $k > 0$

c) $\psi_k(x) = \text{sen}(kx) \rightarrow \psi_k(x,t) = e^{-iE_k t/\hbar}\,\text{sen}(kx)$

$= \exp\left(-i\dfrac{\hbar k^2}{2m}t\right)\text{sen}(kx)$

$$\rightarrow \psi_k^*(x,t) = e^{+iE_k t/\hbar} \operatorname{sen}(kx)$$

$$\frac{\partial \psi_k(x,t)}{\partial x} = k e^{-iE_k t/\hbar} \cos(kx)$$

$$J_k(x,t) = \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}\left(\psi_k^*(x,t) \frac{\partial \psi_k(x,t)}{\partial x} \right)$$

$$= \frac{\hbar}{m} \operatorname{Im}\left(k \operatorname{sen}(kx) \cos(kx) \right) = 0$$

A densidade de corrente é nula para cada autofunção separadamente. Entretanto, se considerarmos uma combinação linear de autofunções, certamente isso provavelmente não ocorrerá.

Isto é, $\psi(x,t) = \sum_k c_k e^{-iE_k t/\hbar} \operatorname{sen}(kx)$

$$\text{ou } \psi(x,t) = \int_0^{+\infty} g(k) e^{-iE_k t/\hbar} \operatorname{sen}(kx)\, dk$$

5) Operador linear:

$$T(\alpha X + \alpha' X') = \alpha T(X) + \alpha' T(X')$$

onde α, α' são dois escalares e $X, X' \in \mathbb{R}^1$ (1D):

$$T(X) = X \frac{\partial}{\partial X} = X D_x$$

$$T(\alpha X) = (\alpha X) \frac{\partial}{\partial(\alpha X)} = \alpha X \cdot \frac{1}{\alpha} \frac{\partial}{\partial X} = X \frac{\partial}{\partial X} = T(X) \neq \alpha T(X)$$

α arbitrário

logo, $T(X) = X \frac{\partial}{\partial X}$ não é um operador linear.

b) $e^{aD_x}\psi(X)$? onde $D_x = \frac{\partial}{\partial X}$

$$e^{aD_x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!} D_x^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial X^n}$$

$$\rightarrow e^{aD_x}\psi(X) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{a^n}{n!} \frac{\partial^n \psi(X)}{\partial X^n}$$

$$= \psi(X) + a\psi'(X) + \frac{a^2}{2}\psi''(X) + \dots \quad (1)$$

lembre-se da série de Taylor:

$$f(X+h) = f(X) + f'(X)h + \frac{1}{2} f''(X) h^2 + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{h^n}{n!} f^{(n)}(X)$$

portanto, (1) pode ser escrito como

$$e^{aD_x}\psi(X) = \psi(X) + a\psi'(X) + \frac{a^2}{2}\psi''(X) + \dots = \psi(X+a)$$

$$\boxed{e^{aD_x}\psi(X) = \psi(X+a)}$$

e^{aD_x} é o operador de translação!

7) (autovalor λ)

$$A\varphi(x) = \lambda\varphi(x)$$

então mostre que $e^{A}\varphi(x) = e^{\lambda}\varphi(x)$

$$e^{A}\varphi(x) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{A^n}{n!}\varphi(x) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}A^n\varphi(x) \qquad (1)$$

note que $A\varphi(x) = \lambda\varphi(x)$

escalar (= comuta!)

$$A^2\varphi(x) = A(A\varphi(x)) = A\lambda\varphi(x) = \lambda A\varphi(x) = \lambda^2\varphi(x)$$

portanto, se A operar n vezes

$$\rightarrow A^n\varphi(x) = \lambda^n\varphi(x) \qquad (2)$$

de (1) e (2):

$$e^{A}\varphi(x) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}A^n\varphi(x) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{n!}\varphi(x) = e^{\lambda}\varphi(x)$$

$$\therefore \boxed{e^{A}\varphi(x) = e^{\lambda}\varphi(x)}$$

8)

$$e^{-iHt/\hbar}\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-it/\hbar)}{n!} H^n \psi(x,t)$$

sabemos que $H\psi(x,t) = E\psi(x,t)$

$$\Rightarrow e^{-iHt/\hbar}\psi(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-it/\hbar)}{n!} H^n \psi(x,t)$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-it/\hbar)}{n!} E^n \psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(x,t)$$

essa é uma resposta válida, mas praticamente sem valor prático. Será mais interessante se expandirmos ψ em termos de suas autofunções.

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n \psi_n(x,t)$$

tal que $H\psi_n(x) = E_n \psi_n(x)$

Assim $H^n\psi(x) = H^n \sum_j c_j \psi_j(x)$

$$= \sum_j c_j H^n \psi_j(x)$$

$$= \sum_j c_j E_j^n \psi_j(x)$$

Agora, retornando ao problema inicial $e^{-iHt/\hbar}\psi(x)$

] note que reti-
rei a dependência t...

Eu quero mostrar a evolução temporal de $\psi(x,t=0)$, isto é

$$\psi(x,t) = e^{-iHt/\hbar}\psi(x,t=0) = e^{-iHt/\hbar}\psi(x)$$

estado da partícula no tempo inicial.

então

$$e^{-iHt/\hbar}\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-it/\hbar)^n}{n!}H^n\sum_j c_j\psi_j(x)$$

$$= \sum_j\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-it/\hbar)^n}{n!}E_j^n c_j\psi_j(x)$$

$$= \sum_j\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-iE_jt/\hbar)^n}{n!}c_j\psi_j(x)$$

$$\boxed{\psi(x,t) = \sum_j c_j e^{-iE_jt/\hbar}\psi_j(x)}$$

$$\psi(x,t) = e^{-iHt/\hbar}\psi(x,t=0)$$

ou $\psi(x,t) = e^{-iH(t-t')/\hbar}\psi(x,t')$ (mostre!)

Se soubermos ψ para algum estado estacionario em t', então aplicando o operador $e^{-iH(t-t')/\hbar}$ em $\psi(x,t')$ iremos obter a evolução temporal de $\psi(x,t')$ para o tempo t.

9)

$$\boxed{\begin{aligned} &e^{(-i/\hbar)Ht}\varphi_n(t) = e^{(-i/\hbar)Et}\varphi_n(t) \\ &\text{se} \quad H\varphi_n(t) = E\varphi_n(t) \end{aligned}}$$

e como mostrei na questão anterior

se $H\varphi_n(x,t=0) = E_n \varphi_n(x,t=0)$

com $\psi(x,t=0) = \sum_n c_n \psi_n(x)$

$$\rightarrow e^{-iHt/\hbar}\psi(x,t=0) = \sum_n c_n e^{-iE_nt/\hbar}\psi_n(x,t=0) = \psi(x,t)$$

10) a) Na solução da questão 1, obtemos

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)$$

$$\psi_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$$

Agora, usando o índice 1 (x_1) para a partícula 1 e o índice 2 (x_2) para a partícula 2, temos

$$\psi_1(x_1) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{\pi x_1}{a}\right)$$

$$\psi_2(x_2) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right)$$

A equação de Schrödinger independente do tempo para esse sistema é:

$$H\psi(x_1, x_2) = E\psi(x_1, x_2)$$

com $H = \frac{P_1^2}{2m} + \frac{P_2^2}{2m} + V(x_1, x_2)$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_2^2} + V(x_1, x_2)$$

ou seja,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_1^2}\psi(x_1, x_2) - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx_2^2}\psi(x_1, x_2) + V(x_1, x_2)\psi(x_1, x_2) =$$

$$= E\psi(x_1, x_2) \qquad (1)$$

onde $\psi(x_1, x_2)$ é a função de onda resultante do sistema de duas partículas e $V(x_1, x_2)$ é o potencial do poço.

$$V(x_1, x_2) = \begin{cases} 0 & \text{se} \quad |x_1|, |x_2| < a/2 \\ \infty & \text{se} \quad |x_1|, |x_2| > a/2 \end{cases}$$

b) $\psi(x_1, x_2) = \psi_1(x_1)\,\psi_2(x_2) = \frac{2}{a} \cos\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right)$, $|x| < a/2$

$$\frac{d^2}{dx_1^2}\psi(x_1, x_2) = -\frac{2}{a}\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \cos\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right) = -\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \psi \quad (2)$$

e $$\frac{d^2}{dx_2^2}\psi(x_1, x_2) = -\frac{2}{a}\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 \cos\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \operatorname{sen}\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right) = -\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 \psi \quad (3)$$

$$E = E_1 + E_2 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} + \frac{4\hbar^2\pi^2}{2ma^2} = 5\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} \quad (4)$$

Substituindo (2), (3) e (4) em (1), obtemos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 \psi(x_1, x_2)\right) - \frac{\hbar^2}{2m}\left(-\left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 \psi(x_1, x_2)\right) + 0\,\psi(x_1, x_2) =$$

$$= \left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} + \frac{4\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\right)\psi(x_1, x_2)$$

logo, $\psi(x_1, x_2)$ satisfaz a equação de Schrödinger independente do tempo.

e $\psi(x_1, x_2) = \psi_1(x_1)\,\psi_2(x_2)$ satisfaz as condições de contorno já que $\psi_1(x_1)$ e $\psi_2(x_2)$ satisfaz!

c) elétron é um férmion, portanto, deve satisfazer o princípio de exclusão de Pauli, isto é, dois elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico.

Se escrevemos

$$\psi(x_1 = x, x_2 = x) = \frac{2}{a} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$$

que não é necessariamente nulo, assim violando o princípio de exclusão de Pauli!

Férmions são descritos por função de onda antissimétrica

$$\psi(x_1, x_2) \sim \psi_1(x_1)\,\psi_2(x_2) - \psi_1(x_2)\,\psi_2(x_1)$$

$$\Rightarrow \psi(x_1, x_2) = -\psi(x_2, x_1)$$

$$\text{e } \psi(x_1, x_2) = 0 \text{ se } x_1 = x_2$$

$$\therefore \psi(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\psi_1(x_1)\,\psi_2(x_2) - \psi_1(x_2)\,\psi_2(x_1) \right]$$

fator de normalização

$$\boxed{\psi(x_1, x_2) = \frac{\sqrt{2}}{a} \left[\cos\left(\frac{\pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_2}{a}\right) - \cos\left(\frac{\pi x_2}{a}\right) \sin\left(\frac{2\pi x_1}{a}\right) \right]}$$

Participem da monitoria

:)