Primeira Prova de Mecânica Quântica: 18/Outubro/2023

Gabarito

Este gabarito é bem mais extenso que a resolução da prova.
Tem a intensão de ser instrutivo e não de apenas mostrar os resultados.
Estude-o!

1. Uma partícula de massa m encontra-se confinada no potencial tipo "caixa", $V(x) = 0$ se $0 < x < L$ e $V \to \infty$ fora desse intervalo. Então,

   (a) Determine, em detalhe, as possíveis energias e respectivas autofunções $\phi_n(x)$ normalizadas.

   (b) Se em $t = 0$ ela se encontrava no estado normalizado

   $$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\frac{2\pi x}{L} + \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\frac{3\pi x}{L} \ ,$$

   obtenha, em detalhe, o pacote de ondas num instante t qualquer. Sugestão: escreva $\psi(x,0)$ como combinação linear das $\phi_n(x)$.

   (c) Considerando ainda o item (b), calcule o valor médio de medidas da energia dessa partícula realizadas num instante t? Há mais de um caminho para resolver este item, e um deles sequer precisa da solução do item (b).

   (a) Para $x \leq 0$ ou $x \geq L$, como o potencial é infinito, necessariamente $\phi(x) = 0$. Para $0 \leq x \leq L$, $\phi(x)$ obedece

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

   cuja solução geral é

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

   onde $E = \hbar^2 k^2/2m$. As condições de contorno, neste caso a continuidade de $\phi(x)$, obrigam que

   $$\psi(0) = 0 \to B = 0 \quad \text{e} \quad \psi(L) = 0 \to kL = n\pi \to E = \hbar^2\pi^2 n^2/2mL^2 \ .$$

   Normalizando:

   $$1 = |A|^2 \int_0^L \sin^2(n\pi/L)dx \to A = \sqrt{2/L} \ .$$

   Essa integral é facilmente resolvida usando que $\sin^2 x = (1 - \cos 2x)/2$. Assim,

   $$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin(\frac{n\pi x}{L}) \ .$$

   (b) Por inspeção dos $\phi_n(x)$ acima, vemos que (isso foi sugerido na questão)

   $$\psi(x,0) = \frac{\phi_2(x) + \phi_3(x)}{\sqrt{2}} \ .$$

   Como a forma geral de $\psi(x,t)$ é

   $$\psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} C_n \phi_n e^{-iE_n t/\hbar} \ ,$$

   vemos que os únicos C_n não nulos são $C_2 = C_3 = 1/\sqrt{2}$. Ou, podemos calculá-los assim:

   $$C_n = \int_0^L \phi_n(x)^* \psi(x,0)dx = \frac{1}{\sqrt{2}}\int_0^L (\phi_n^*\phi_2 + \phi_n^*\phi_3)dx = \frac{1}{\sqrt{2}}(\delta_{n,2} + \delta_{n,3}) \ .$$

   Portanto,

   $$\psi(x,t) = \frac{\phi_2(x)e^{-iE_2 t/\hbar} + \phi_3(x)e^{-iE_3 t/\hbar}}{\sqrt{2}} \ .$$

(c)

$$\bar{E} = < H > = \sum_{n=1}^{\infty} |C_n|^2 E_n = |C_2|^2 E_2 + |C_3|^2 E_3 = \frac{E_2 + E_3}{2} \; .$$

Também poderia ser calculada, com um pouco mais de trabalho, via

$$\bar{E} = \int \psi(x,t)^* H \psi(x,t) dx \; , \quad \text{ou mesmo fazendo} \quad \bar{E} = \int \psi(x,0)^* H \psi(x,0) dx \; .$$

Você saberia argumentar por que essa última forma é válida?

2. Determine os elementos de matriz do operador A entre as autofunções do oscilador harmônico, isto é, expresse $\langle \phi_m | A | \phi_n \rangle$ nas seguintes situações (pode usar o caminho que quiser):

$$(a) \quad A = x\,p - p\,x \quad \text{e (b)} \quad A = x\,p + p\,x \; .$$

(a) $A = xp - px = [x, p] = i\hbar$, logo, $\langle \phi_m | A | \phi_n \rangle = i\hbar \delta_{m,n}$.

(b) $A = xp + px = i\hbar + 2px = i\hbar + 2i\frac{\hbar}{2}(a^\dagger a^\dagger - aa + a^\dagger a - aa^\dagger) = i\hbar + i\hbar(a^\dagger a^\dagger - aa - 1) = i\hbar(a^\dagger a^\dagger - aa)$, onde usei o formulário para trocar x e p por a e $a^\dagger$. Também usei (mas não é necessário) que $[a, a^\dagger] = aa^\dagger - a^\dagger a = 1$.
Assim,

$$\langle \phi_m | A | \phi_n \rangle = i\hbar \langle \phi_m | a^\dagger a^\dagger - aa | \phi_n \rangle = i\hbar(\sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\delta_{m,n+2} - \sqrt{n}\sqrt{n-1}\delta_{m,n-2}) \; .$$

Naturalmente que poderíamos ter resolvido desde o início utilizando as expressões de x e p em termos dos operadores a e $a^\dagger$.

3. Mostre que:

(a) o valor da incerteza numa medida de um observável A feita num de seus autoestados ϕ_n é nulo;

(b) se $\phi_1, \phi_2, ..., \phi_M$ são autofunções de um operador correspondentes a um mesmo autovalor, isto é, são degeneradas, então qualquer combinação linear delas também será uma autofunção e com o mesmo autovalor.

(a)

$$\langle A \rangle_n = \int \phi_n^* A \phi_n dx = \int \phi_n^* a_n \phi_n dx = a_n \; .$$

$$\langle A^2 \rangle_n = \int \phi_n^* A^2 \phi_n dx = \int \phi_n^* a_n A \phi_n dx = a_n = \int \phi_n^* a_n^2 \phi_n dx = a_n^2 \; .$$

Então,

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle_n - (\langle A \rangle_n)^2} = 0 \; .$$

Claro, esse é o conceito de autoestado, aquele que ao ser medido não sofre alteração, logo não há incerteza em sua medida.

(b) Seja $\psi = \sum_n C_n \phi_n$, sendo as ϕ_n degeneradas, isto é, $A\phi_n = a\phi_n$. Então,

$$A\psi = \sum C_n A \phi_n = \sum_n C_n a \phi_n = a \sum_n C_n a \phi_n = a\psi \; ,$$

o que mostra que ψ de fato é autofunção de A e com o mesmo autovalor a.

4. Um operador A tem a seguinte expressão, onde α é uma constante:

$$A = \alpha \frac{d}{dx} \; .$$

(a) Mostre que ele é linear.

(b) Sobre A, deseja-se que os valores médios de suas medidas sejam reais. Então, determine como deve ser em geral a constante α para isso acontecer.

(a) Para ser liner: $A(af(x)+bg(x))$ deve ser igual a: $aAf(x)+bAg(x)$. Vejamos, então, nosso caso:

$$A(af(x)+bg(x)) = \alpha\frac{d}{dx}(af(x)+bg(x)) = a\alpha\frac{df}{dx} + b\alpha\frac{dg}{dx} = aAf(x)+bAg(x) \ .$$

Portanto, A é linear. A última igualdade na expressão acima é importante: precisa ao final da demonstração que o operador A apareça atuando em $f(x)$ e em $g(x)$.

(b) Para que os valores médios de um operador A sejam sempre reais ele deve ser hermitiano. Então vamos encontrar o hermitiano de nosso operador $A = \alpha d/dx$. Vamos usar a definição:

$$\int f^* A g dx \equiv (\int g^* A^\dagger f dx)^* \ .$$

Mas,

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^* A g dx = \int_{-\infty}^{\infty} f^* \alpha \frac{dg}{dx} dx = \alpha f^* g|_{\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} g\alpha\frac{df^*}{dx} dx = (\int_{\infty}^{\infty} g^*(-\alpha^*\frac{d}{dx}f)^* \ .$$

Então, o hermitiano de A é:

$$A^\dagger = -\alpha^*\frac{d}{dx} \ .$$

Como desejamos que $A^\dagger = A$, isso implica que $\alpha = -\alpha^*$, ou seja, a constante α deve ser puramente imaginária. Exemplo: todos sabemos que o operador momento liner $p = -i\hbar d/dx$ é hermitiano; ele tem o formato que mostramos. Fica como sugestão caracterizar α para que o operador $\alpha d^2/dx^2$ seja hermitiano. Você conhece algum operador importante como esse formato?

5. Um certo observável, em notação de Dirac, é expresso numa base ortonormal $\{|1\rangle, |2\rangle\}$ como

$$\hat{A} = |1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1| \ .$$

Encontre os possíveis estados resultantes de medidas desse observável.

Os possíveis resultados de uma medida são os autovalores, e respectivos autovetores, do observável que representa a medida. Assim, precisamos achar os autovalores e autovetores de A. O caminho mais fácil é encontrar a representação matricial de A:

$$\hat{A}|1\rangle = |1\rangle + |2\rangle \quad \text{e} \quad \hat{A}|2\rangle = |2\rangle + |1\rangle \ .$$

Assim,

$$A_{1,1} = \langle 1|\hat{A}|1\rangle = 1 \ ,$$
$$A_{1,2} = \langle 1|\hat{A}|2\rangle = 1 \ ,$$
$$A_{2,1} = \langle 2|\hat{A}|1\rangle = 1 \ ,$$
$$A_{2,2} = \langle 2|\hat{A}|2\rangle = 1 \ ,$$

Logo,

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \ .$$

A equação secular é: $(1-a)^2 - 1 = 0$, cujas soluções são: $a = 0$ ou $a = 2$. Então, os possíveis valores de uma medida do observável A são os autovalores $a_1 = 0$ ou $a_2 = 2$.
Achando o autovetor correspondente a $a_1 = 0$:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 0 \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \ ,$$

que implica $x + y = 0$, portanto, $x = -y$. Qualquer escolha de x e y que satisfaça $x = -y$ serve. Em particular, $x = 1$ e $y = -1$. Se quiser o autovetor normalizado, escolha $x = -y = 1/\sqrt{2}$.

Achando o autovetor correspondente a $a_2 = 2$:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = 2 \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} ,$$

que implica $x+y = 2x$, portanto, $x = y$. Qualquer escolha de x e y que satisfaça $x = y$ serve. Em particular, $x = 1$ e $y = 1$. Se quiser o autovetor normalizado, escolha $x = y = 1/\sqrt{2}$.
Assim,

$$|a_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |a_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Vamos aproveitar para observar algumas propriedades:

1. O traço de uma matriz, isto é, a soma de seus elementos diagonais, é igual à soma de seus autovalores. Verifique isso na matriz acima.

2. O determinante de uma matriz é o produto de seus autovalores. Verifique. Essas propriedades ajudam a checar os resultados.

3. Os autovetores são ortogonais, já que correspondem a autovalores distintos: $\langle a_i | a_j \rangle = \delta_{i,j}$. Verifique usando os autovetores acima.

4. Os autovetores forman uma base, isto é qualquer vetor nesse espaço bidimensional pode ser escrito como combinação de $|a_1\rangle$ e $|a_2\rangle$. Por exemplo, dados x e y quaisquer, podemos achar α e β tais que:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \alpha |a_1\rangle + \beta |a_2\rangle \ .$$

   Verifique que essa igualdade implica $\alpha = (x - y)/\sqrt{2}$ e $\beta = (x + y)/\sqrt{2}$.

   Como saber se um conjunto de estados $\{|a_i\rangle\}$ é completo? Tente mostrar, seguindo o que fizemos em aula, que o critério é: $\sum_i |a_i\rangle\langle a_i| = I$, sendo I o operador identidade.

Formulário:

$A_{m,n} = \langle \psi_m | A | \phi_n \rangle = \int \phi_m^* A \phi_n dx \qquad \Delta\psi' = -\int V(x)\psi(x)dx \qquad \langle A \rangle = \int \psi A \psi dx$

$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \frac{ip}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \qquad \langle \psi | A^\dagger | \phi \rangle = \langle \phi | A | \psi \rangle^* \qquad [A, B] = AB - BA$

$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \qquad a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \qquad \phi_n = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\phi_0$

$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2} = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}.$