FMA0403 - MECÂNICA QUÂNTICA I
Segundo Semestre de 2008 - Diurno
Resolução Comentada da Primeira Lista de Problemas

Eduardo T. D. Matsushita

Dados:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ax^2+bx}dx = \sqrt{\frac{\pi}{-a}}e^{-\frac{b^2}{4a}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n}e^{ax^2}dx = \left(\frac{d}{da}\right)^n\sqrt{\frac{\pi}{-a}}$$

Exercício 1. Neste exercício o estado de uma partícula de massa m é caracterizado por uma função de onda da forma

$$\psi\left(x,t\right) = A\, e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}}\; e^{-i\frac{\omega t}{2}} \tag{1}$$

onde A e ω são constantes reais e positivas.

a) O primeiro passo é determinar a constante A que normaliza a função de onda acima. A normalização está associada com o caráter probabilístico de uma função de onda (interpretação de Born). Matematicamente a condição de normalização é dada por

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi\left(x,t\right)\right|^2 dx = 1. \tag{2}$$

Substituindo (1) na integral (2) temos

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi\left(x,t\right)\right|^2 dx &= A^2\overbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}dx}^{=\sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}}\\ &= 1\end{aligned}$$

de onde obtemos

$$A^2 = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \Rightarrow A = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}. \tag{3}$$

Assim a função de onda normalizada assume a forma

$$\psi(x,t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} e^{-i\frac{\omega t}{2}}. \tag{4}$$

b) Agora vamos mostrar, por substituição direta, que a função de onda (4) é solução da equação de Schrödinger dependente do tempo para um oscilador harmônico unidimensional com $V(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$:

$$\underbrace{i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}}_{(I)} = \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi(x,t)}_{(II)}.$$

Calculando explicitamente os membros (I) e (II) temos

$$(I) \quad i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \frac{\hbar\omega}{2}\psi(x,t)$$

e

$$(II) \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}\psi(x,t) = \frac{\hbar\omega}{2}\psi(x,t)$$

o que nos permite concluir que $(I) = (II)$.

c) Aqui calcularemos os valores médios de x, x^2, p e p^2.

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x\,|\psi(x,t)|^2\,dx \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{x e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}}_{\substack{\downarrow \\ \text{função ímpar}}}\,dx = 0 \end{aligned} \tag{5}$$

Lembre-se que a integral de uma função ímpar num intervalo simétrico é sempre nula!!

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\,|\psi(x,t)|^2\,dx = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\frac{m\omega x^2}{\hbar}}\,dx \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \end{aligned} \tag{6}$$

$$
\begin{aligned}
\langle p\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^{\star}(x,t)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x,t)\,dx = \frac{\hbar}{i}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^{\star}(x,t)\left[-\frac{m\omega}{\hbar}x\psi(x,t)\right]dx \\
&= im\omega\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} x\left|\psi(x,t)\right|^{2}dx}_{\langle x\rangle} = 0 \qquad (7)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\left\langle p^{2}\right\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^{\star}(x,t)\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right)^{2}\psi(x,t)\,dx = -\hbar^{2}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^{\star}(x,t)\,\frac{\partial^{2}}{\partial x^{2}}\psi(x,t)\,dx \\
&= -\hbar^{2}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^{\star}(x,t)\left[\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{2}x^{2}-\frac{m\omega}{\hbar}\right]\psi(x,t)\,dx \\
&= -m^{2}\omega^{2}\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2}\left|\psi(x,t)\right|^{2}dx}_{\langle x^{2}\rangle} + \hbar m\omega\underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi(x,t)\right|^{2}dx}_{1} \\
&= \frac{\hbar m\omega}{2} \qquad (8)
\end{aligned}
$$

d) Agora vamos testar o **princípio da incerteza**. Com os valores médios obtidos no item anterior, resultados (5) a (8), podemos calcular as variâncias e conseqüentemente os desvios padrões das medidas de posição e momento

$$
\sigma_{x}^{2} = \left\langle x^{2}\right\rangle - \langle x\rangle^{2} = \frac{\hbar}{2m\omega} \rightarrow \sigma_{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \qquad (9)
$$

e

$$
\sigma_{p}^{2} = \left\langle p^{2}\right\rangle - \langle p\rangle^{2} = \frac{\hbar m\omega}{2} \rightarrow \sigma_{p} = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}. \qquad (10)
$$

Multiplicando os desvios (9) e (10) obtemos

$$
\sigma_{x}\sigma_{p} = \frac{\hbar}{2} \qquad (11)
$$

que nos permite concluir que a relação de incerteza posição-momento é satisfeita e além disso assume o valor **mínimo**. No decorrer do curso verificaremos que o estado caracterizado pela função de onda (4) é o estado fundamental do oscilador harmônico quântico unidimensional.

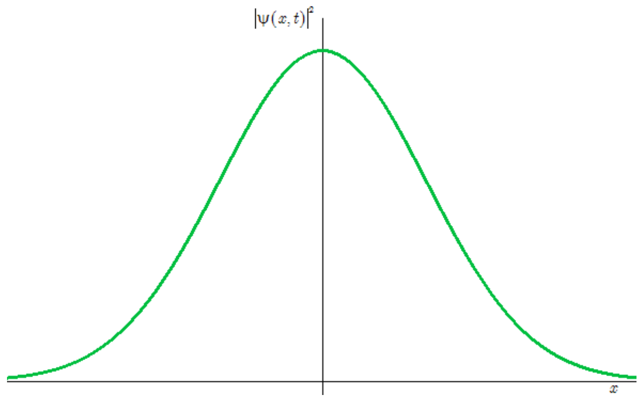

Figura 1: Perfil da densidade de probabilidade gaussiana.

♠ ♠ ♠

Exercício 2. Considere agora uma função de onda da forma

$$\psi\,(x,t) = A\,e^{-\lambda|x|}\,e^{-i\omega t}. \tag{12}$$

a) O primeiro passo é determinar para que valor de A a função de onda acima é normalizada. Recorrendo a condição (2) obtemos

$$A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2\lambda|x|} dx = A^2 \left[\int_{-\infty}^{0} e^{2\lambda x} dx + \int_{0}^{+\infty} e^{-2\lambda x} dx \right] = 1$$

onde utilizamos o fato que $|x| = \begin{cases} x & x > 0 \\ -x & x < 0 \end{cases}$. Levando em conta que A é uma constante real e positiva obtemos

$$A^2 = \lambda \Rightarrow A = \sqrt{\lambda}.$$

Assim a função de onda normalizada assume a forma

$$\psi\,(x,t) = \sqrt{\lambda}\,e^{-\lambda|x|}\,e^{-i\omega t}. \tag{13}$$

b) Vamos determinar os valores médios de x e x^2.

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x\left|\psi\left(x,t\right)\right|^2 dx = \lambda\int_{-\infty}^{+\infty} xe^{-2\lambda|x|}dx \\ &= 0 \end{aligned} \tag{14}$$

$$\begin{aligned}\left\langle x^2\right\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\left|\psi\left(x,t\right)\right|^2 dx = \lambda\int_{-\infty}^{+\infty} x^2e^{-2\lambda|x|}dx \\ &= \frac{1}{2\lambda^2}. \end{aligned} \tag{15}$$

c) O cálculo do desvio padrão das medidas de posição é trivial. Dos resultados calculados no item anterior é fácil verificar que

$$\sigma^2 = \left\langle x^2\right\rangle - \left\langle x\right\rangle^2 = \frac{1}{2\lambda^2} \Rightarrow \sigma = \frac{\sqrt{2}}{2\lambda}. \tag{16}$$

Questão: qual a probabilidade de encontrarmos a partícula fora do intervalo $[\langle x\rangle - \sigma, \langle x\rangle + \sigma]$?

No item anterior verificamos que $\langle x\rangle = 0$ de modo que a questão que devemos responder é qual a probabilidade da partícula estar fora do intervalo $[-\sigma, \sigma]$. Se denotarmos por $\wp\left(x<-\sigma\right)$ e $\wp\left(x>\sigma\right)$, respectivamente, as probabilidades de encontrarmos a partícula em $x<-\sigma$ e $x>\sigma$ então a probabilidade procurada será

$$\begin{aligned}\wp_{|x|>\sigma} &= \wp\left(x<-\sigma\right) + \wp\left(x>\sigma\right) \overset{\overset{simetria}{\uparrow}}{=} 2\wp\left(x>\sigma\right) \\ &= 2\int_{\sigma}^{+\infty}\left|\psi\left(x,t\right)\right|^2 dx = 2\lambda\int_{\sigma}^{+\infty} e^{-2\lambda x}dx \\ &= 2\lambda\left[-\frac{e^{-2\lambda x}}{2\lambda}\right]_{\sigma}^{+\infty} = e^{-2\lambda\sigma}\end{aligned}$$

de modo que, levando em conta o resultado $\sigma = \frac{\sqrt{2}}{2\lambda}$, finalmente obtemos

$$\wp_{|x|>\sigma} = e^{-\sqrt{2}} \approx 0.243. \tag{17}$$

Veremos posteriormente que a função (13) é a função de onda do estado ligado de uma particula submetida a um potencial do tipo delta de Dirac atrativo. Abaixo segue o esquema do perfil da densidade de probabilidade

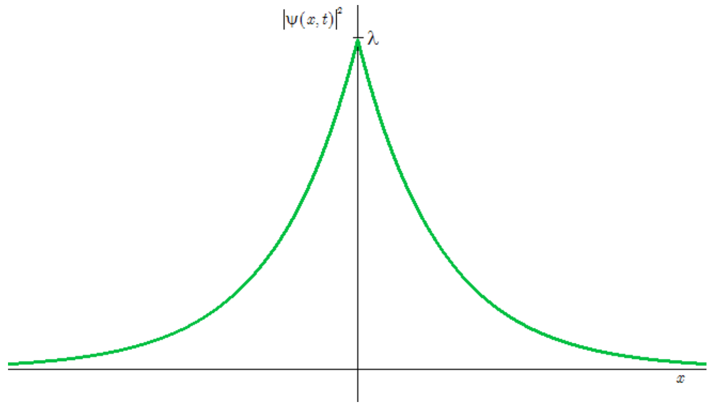

Figura 2: Perfil da densidade de probabilidade estudada neste exercício.

♠ ♠ ♠

Exercício 3. A função de onda de uma *partícula livre* no instante $t = 0$ é dada por

$$\psi\left(x, 0\right) = A\, e^{-ax^2} \tag{18}$$

com A e a sendo constantes reais e positivas.

a) Vamos determinar a constante A que normaliza o pacote gaussiano acima. Introduzindo a função (18) na condição (2) temos

$$A^2 \overbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2ax^2} dx}^{=\sqrt{\frac{\pi}{2a}}} = 1 \Rightarrow A = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}$$

A função de onda normalizada em $t = 0$ é dada por

$$\psi\left(x, 0\right) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-ax^2}. \tag{19}$$

b) O próximo passo é determinar como essa função de onda evolui no tempo. A evolução temporal da função de onda é determinada pela equação de Schrödinger dependente do tempo. Para uma partícula livre a solução mais geral dessa equação é dada pela combinação linear de onda plana

$$\psi\left(x,t\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{\frac{i}{\hbar}px}e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^{2}}{2m}t}\phi\left(p,0\right)dp \tag{20}$$

onde

$$\phi\left(p,0\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\psi\left(x,0\right)e^{-\frac{i}{\hbar}px}dx$$

é a transformada de Fourier de (19). Vamos calcular explicitamente essa transformada

$$\begin{aligned}\phi\left(p,0\right) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\left(\frac{2a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{-ax^{2}-\frac{i}{\hbar}px}dx\\ &= \frac{1}{\left(2\pi a\hbar^{2}\right)^{\frac{1}{4}}}e^{-\frac{p^{2}}{4a\hbar^{2}}}.\end{aligned} \tag{21}$$

Substituindo o resultado (21) em (20) finalmente obtemos

$$\begin{aligned}\psi\left(x,t\right) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\frac{1}{\left(2\pi a\hbar^{2}\right)^{\frac{1}{4}}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}e^{-\left(\frac{1}{4a\hbar^{2}}+i\frac{t}{2m\hbar}\right)p^{2}+\frac{i}{\hbar}px}dp\\ &= \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\frac{e^{-\frac{ax^{2}}{1+i\frac{2a\hbar t}{m}}}}{\sqrt{1+i\frac{2a\hbar t}{m}}}\end{aligned} \tag{22}$$

Vamos introduzir a mudança de variável $b\left(t\right)\equiv\frac{a}{1+i\frac{2a\hbar t}{m}}$ que facilitará os cálculos dos valores médios no próximo item. A função de onda então assume a forma

$$\psi\left(x,t\right)=\left(\frac{2}{a\pi}\right)^{\frac{1}{4}}\sqrt{b\left(t\right)}e^{-b(t)x^{2}}. \tag{23}$$

Com o resultado (23) podemos calcular a densidade de probabilidade $\left|\psi\left(x,t\right)\right|^{2}$

$$\begin{aligned}\left|\psi\left(x,t\right)\right|^{2} &= \psi^{\star}\left(x,t\right)\psi\left(x,t\right)=\left(\frac{2}{a\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\left|b\left(t\right)\right|e^{-\left(b^{\star}(t)+b(t)\right)x^{2}}\\ &\underset{b(t)=\frac{a}{1+i\frac{2a\hbar t}{m}}}{\overset{\downarrow}{=}} \sqrt{\frac{2a}{\pi\left[1+\left(\frac{2a\hbar t}{m}\right)^{2}\right]}}e^{-\frac{2a}{1+\left(\frac{2a\hbar t}{m}\right)^{2}}x^{2}}.\end{aligned} \tag{24}$$

Observe que a densidade de probabilidade $\left|\psi\left(x,t\right)\right|^{2}$ pode ser reescrita da forma

$$|\psi(x,t)|^2 = \sqrt{\frac{2a(t)}{\pi}} e^{-2a(t)x^2}$$

com

$$a(t) = \frac{a}{1 + \left(\frac{2a\hbar t}{m}\right)^2} \tag{25}$$

o que nos permite verificar claramente que continua sendo uma gaussiana, porém, agora com uma largura dependente do tempo.

c) Vamos analisar graficamente a densidade de probabilidade $|\psi(x,t)|^2$ para $t = 0$ e $t \neq 0$.

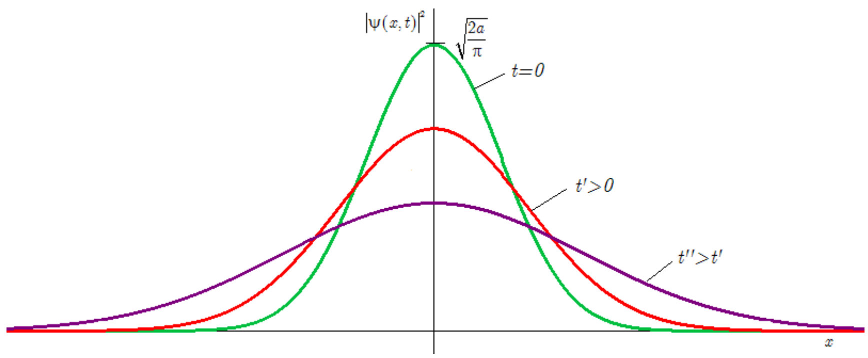

Figura 3: Perfil da densidade de probabilidade gaussiana para $t = 0$ e valores de $t \neq 0$.

À medida em que o tempo aumenta o perfil gaussiano vai se tornando mais alargado e achatado. Observe que, a partir da expressão (25) para a largura da gaussiana, podemos definir uma escala

$$\tau \equiv \frac{m}{2a\hbar}$$

de modo que

$$a(t) = \frac{a}{1 + \frac{t^2}{\tau^2}}.$$

Note que é possível dar uma estimativa para um tempo "muito grande":

$$t \gg \tau \rightarrow t \gg \frac{m}{2a\hbar}.$$

d) Aqui calcularemos os valores médios de x, x^2, p e p^2. Levando em conta que a densidade de probabilidade é uma gaussiana e os cálculos efetuados no exercício 1 facilmente verificamos que

$$\langle x \rangle = 0 \tag{26}$$

e

$$\langle p \rangle = 0. \tag{27}$$

Resta calcular $\left\langle x^2 \right\rangle$ e $\left\langle p^2 \right\rangle$.

$$\begin{aligned}
\left\langle x^2 \right\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \left|\psi\left(x,t\right)\right|^2 dx = \left(\frac{2}{a\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left|b\left(t\right)\right| \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\left[b^\star(t)+b(t)\right]x^2} dx \\
&= \left(\frac{2}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\left|b\left(t\right)\right|}{2\left[b^\star\left(t\right)+b\left(t\right)\right]^{\frac{3}{2}}} \underset{b(t)=\frac{a}{1+i\frac{2a\hbar t}{m}}}{\underset{\downarrow}{=}} \frac{1}{4a}\left[1+\left(\frac{2a\hbar t}{m}\right)^2\right]
\end{aligned} \tag{28}$$

$$\begin{aligned}
\left\langle p^2 \right\rangle &= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^\star\left(x,t\right) \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi\left(x,t\right) dx \\
&= -\hbar^2 \left(\frac{2}{a\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \left|b\left(t\right)\right| \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-b^\star(t)x^2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} e^{-b(t)x^2} dx \\
&= 2\hbar^2 b\left(t\right) \int_{-\infty}^{+\infty} \left[1-2b\left(t\right)x^2\right] \left|\psi\left(x,t\right)\right|^2 dx \\
&= 2\hbar^2 b\left(t\right) \left[1-2b\left(t\right)\left\langle x\right\rangle^2\right] \underset{b(t)=\frac{a}{1+i\frac{2a\hbar t}{m}}}{\underset{\downarrow}{=}} \hbar^2 a
\end{aligned} \tag{29}$$

e) Com os valores médios obtidos no item anterior, resultados (26) a (29), podemos calcular as variâncias e conseqüentemente os desvios padrões das medidas de posição e momento

$$\sigma_x^2 = \left\langle x^2 \right\rangle - \left\langle x \right\rangle^2 = \frac{1}{4a}\left[1+\left(\frac{2a\hbar t}{m}\right)^2\right] \rightarrow \sigma_x = \sqrt{\frac{1}{4a}\left[1+\left(\frac{2a\hbar t}{m}\right)^2\right]} \tag{30}$$

$$\sigma_p^2 = \left\langle p^2 \right\rangle - \left\langle p \right\rangle^2 = \hbar^2 a \rightarrow \sigma_p = \sqrt{\hbar^2 a} \tag{31}$$

Note que o o desvio padrão σ_x depende do tempo e essa quantidade descreve o alargamento do pacote como função do tempo. No limite de "tempos grandes" podemos ainda escrever

$$\sigma_x \approx \frac{t}{m}\sigma_p.$$

Multiplicando os desvios (30) e (31) obtemos

$$\sigma_x \sigma_p = \frac{\hbar}{2}\sqrt{1+\left(\frac{2a\hbar t}{m}\right)^2} \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{32}$$

Observe que o princípio de incerteza é sempre satisfeito pois $\sqrt{1+\left(\frac{2a\hbar t}{m}\right)^2} \geq 1\, \forall t \geq 0$. Além disso verificamos que no instante $t=0$ a relação de incerteza é mínima.

f) A transformada de Fourier $\phi(p,t)$ da função de onda (22) é simplesmente

$$\phi(p,t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}\phi(p,0) \tag{33}$$

com $\phi(p,0)$ dado em (21). Observe que $\phi(p,t)$ é a solução da equação de Schrödinger dependente do tempo na representação dos momentos para uma partícula livre.

A densidade de probabilidade $|\phi(p,t)|^2$, dada explicitamente por

$$|\phi(p,t)|^2 = |\phi(p,0)|^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi a\hbar^2}}e^{-\frac{p^2}{2a\hbar^2}}, \tag{34}$$

é normalizada e **independe do tempo**.

g) Vamos recalcular os valores médios de p e p^2 utilizando a representação do momento.

$$\langle p\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p\,|\phi(p,0)|^2\,dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi a\hbar^2}}\int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{pe^{-\frac{p^2}{2a\hbar^2}}}_{\text{função ímpar}}\,dp = 0 \tag{35}$$

e

$$\begin{aligned}\left\langle p^2\right\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} p^2\,|\phi(p,0)|^2\,dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi a\hbar^2}}\int_{-\infty}^{+\infty} p^2 e^{-\frac{p^2}{2a\hbar^2}}\,dp \\ &= \hbar^2 a \end{aligned} \tag{36}$$

que concordam, respectivamente, com os resultados (27) e (29) calculados no item d).