Resolução da P1 - 18/09
Mecânica Quântica 1 - Diurno

Exercício 1: Temos uma partícula de massa m submetido a um potencial delta de Dirac repulsivo

$$V(x) = \lambda \delta(x)$$

com $\lambda > 0$. Queremos calcular o coeficiente de reflexão R.

O ponto de partida é determinar as soluções da equação de Schrödinger independente do tempo

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

onde $E > 0$. Para $|x| > 0$ temos

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) \rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x)$$

com $k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}$. Facilmente constatamos que

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx} & x > 0. \end{cases}$$

Levando em conta que a partícula incide da esquerda, temos $D = 0$ de modo que

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ Ce^{ikx} & x > 0. \end{cases}$$

Agora vamos aplicar as condições de contorno para a solução obtida.

- A continuidade da função de onda em $x = 0$ implica

$$A + B = C. \tag{1}$$

- Descontinuidade da derivada primeira da função de onda em $x = 0$. De fato, integrando ambos os membros da equação de Schrödinger independente do tempo no intervalo $[-\epsilon, \epsilon]$ com $\epsilon > 0$ fornece

$$\left[\left.\frac{d\psi(x)}{dx}\right|_{\epsilon} - \left.\frac{d\psi(x)}{dx}\right|_{-\epsilon}\right] - \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0) = -k^2\int_{-\epsilon}^{\epsilon} dx\psi(x).$$

No limite $\epsilon \to 0$ a integral do segundo membro é nula já que a função de onda é contínua. Logo o salto da derivada em $x = 0$ é dado por

$$\frac{d\psi(0^+)}{dx} - \frac{d\psi(0^-)}{dx} = \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(0).$$

A descontinuidade da derivada primeira na origem implica

$$ik\,(C - A + B) = \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\,(A + B)$$

ou mais compactamente

$$C = (1 - 2i\beta)\,A - (1 + 2i\beta)\,B \tag{2}$$

onde $\beta \equiv \frac{m\lambda}{\hbar^2 k}$. De (1) e (2) segue

$$\begin{aligned} B &= -\frac{i\beta}{1 + i\beta}A \\ C &= \frac{1}{1 + i\beta}A \end{aligned}$$

de onde identificamos o coeficiente de reflexão

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2} = \frac{1}{1 + \frac{2\hbar^2 E}{m\lambda^2}}. \tag{3}$$

Exercício 2: Temos uma partícula de massa m submetido a um potencial do tipo poço quadrado

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ -V_0 & 0 < x < a \\ 0 & x > a. \end{cases}$$

Vamos considerar $E > 0$.

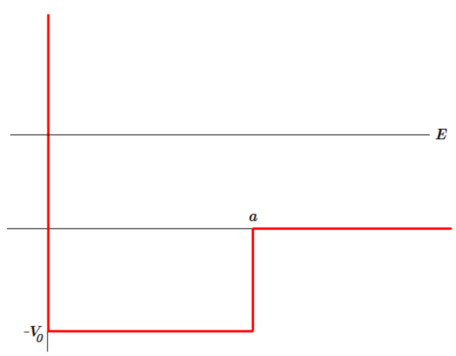

Figura 1: Poço quadrado.

O ponto de partida é a equação de Schrödinger independente do tempo

1. Região I: $0 < x < a$

$$\frac{d^2\psi_I(x)}{dx^2} = -q^2\psi_I(x)$$

com $q = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$. A solução é da forma

$$\psi_I(x) = D\sin qx + C\cos qx.$$

Região II: $x > a$

$$\frac{d^2\psi_{II}(x)}{dx^2} = -k^2\psi_{II}(x)$$

com $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. A solução é da forma

$$\psi_{II}(x) = Ae^{-ikx} + Be^{ikx}.$$

Vamos aplicar as condições de contorno.

- Função de onda se anula em $x = 0$:

$$\psi_I(0) = 0 \to C = 0.$$

- Continuidade da função de onda e da derivada primeira em $x = a$:

$$\begin{aligned} D\sin qa &= Ae^{-ika} + Be^{ika} \\ Dq\cos qa &= -ik\left(Ae^{-ika} - Be^{ika}\right) \end{aligned}$$

de onde extraímos

$$\frac{D}{A} = \frac{-2i\frac{k}{q}e^{-ika}}{\cos qa - i\frac{k}{q}\sin qa}$$

e

$$\frac{B}{A} = e^{-2ika}\left(\frac{-\cos qa - i\frac{k}{q}\sin qa}{\cos qa - i\frac{k}{q}\sin qa}\right) \to fase.$$

Assim, finalmente concluímos:

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1. \tag{4}$$

Verificamos que o coeficiente de reflexão é 1 o que nos mostra que a partícula sofre reflexão total quando encontra a "parede infinita". Esse resultado era esperado já que a probabilidade de encontrar a partícula em $x < 0$ é nula.

b) Agora utilizaremos a equação da continuidade para determinar o coeficiente de reflexão. Levando em conta que a densidade de probabilidade é uma constante do movimento devemos ter

$$j_I = j_{II}$$

com $j = \frac{\hbar}{m} Im\left(\psi^{\star}\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)$. Temos

$$\psi_I(x) = D\sin qx \rightarrow j_I = 0$$

e

$$\psi_{II}(x) = Ae^{-ikx} + Be^{ikx} \rightarrow j_{II} = \frac{\hbar k}{m}\left(|B|^2 - |A|^2\right).$$

Da conservação da corrente decorre

$$|B|^2 = |A|^2 \Rightarrow R = 1. \tag{5}$$

Exercício 3: Temos uma partícula de massa m submetido a um potencial do tipo poço quadrado

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & \text{nos outros casos.} \end{cases}$$

Sabemos que os estados estacionários e os níveis de energia são

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\frac{n\pi x}{a}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}$$

Vamos supor que no instante inicial a função de onda da partícula seja

$$\Psi(x,0) = A\sin^3\frac{\pi x}{a}$$

onde A é uma constante real e positiva.

a) O primeiro passo é escrever a função de onda $\Psi(x,0)$ na base constituída pelos estados estacionários $\{\psi_n(x)\}$. Com auxílio da identidade trigonométrica $\sin\theta = \frac{e^{i\theta}-e^{-i\theta}}{2i}$ facilmente verificamos que

$$\begin{aligned}
\Psi(x,0) &= A\left(\frac{e^{i\frac{\pi x}{a}} - e^{-i\frac{\pi x}{a}}}{2i}\right)^3 \\
&= -\frac{A}{4}\left[\left(\frac{e^{3i\frac{\pi x}{a}} - e^{-3i\frac{\pi x}{a}}}{2i}\right) - 3\left(\frac{e^{i\frac{\pi x}{a}} - e^{-i\frac{\pi x}{a}}}{2i}\right)\right] \\
&= -\frac{A}{4}\sqrt{\frac{a}{2}}\left(\psi_3(x) - 3\psi_1(x)\right).
\end{aligned}$$

Logo

$$\Psi(x,0) = \frac{A}{4}\sqrt{\frac{a}{2}}\left(3\psi_1(x) - \psi_3(x)\right). \tag{6}$$

b) Vamos normalizar a função de onda acima. A condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,0)|^2 \, dx = 1$$

implica

$$\frac{A^2 a}{32}\int_0^a \left(3\psi_1(x) - \psi_3(x)\right)\left(3\psi_1(x) - \psi_3(x)\right) dx = 1 \to A = \frac{4}{\sqrt{5a}}$$

onde utilizamos $\int_0^a \psi_m(x)^\star \psi_n(x)\, dx = \delta_{mn}$. Assim a função de onda devidamente normalizada assume a forma

$$\Psi(x,0) = \frac{3}{\sqrt{10}}\psi_1(x) - \frac{1}{\sqrt{10}}\psi_3(x). \tag{7}$$

c) Sabemos que uma solução geral da equação de Schrödinger independente do tempo no poço quadrado infinito tem a forma

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}.$$

Note que temos $c_1 = \frac{3}{\sqrt{10}}$, $c_3 = -\frac{1}{\sqrt{10}}$ e $c_n = 0$ para todo $n \neq 3$ e $n \neq 10$. Dessa forma temos

$$\Psi(x,t) = \frac{3}{\sqrt{10}}\psi_1(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} - \frac{1}{\sqrt{10}}\psi_3(x)\, e^{-\frac{i}{\hbar}E_3 t} \tag{8}$$

onde $E_1 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$ e $E_3 = \frac{9\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$.

d) A densidade de probabilidade $|\Psi(x,t)|^2$ é

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{9}{10}\psi_1(x)^2 + \frac{1}{10}\psi_3(x)^2 - \frac{3}{5}\psi_1(x)\,\psi_3(x)\cos\omega_{31}t$$

onde $\omega_{31} \equiv E_3 - E_1$. A densidade obtida é uma função oscilante no tempo.

e) Vamos agora calcular o valor médio das medidas de energia no instante t. Sabemos que

$$\langle H\rangle = \int \Psi(x,t)^\star \hat{H}\Psi(x,t)\, dx.$$

Levando em conta que $\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x)$ facilmente constatamos que

$$\hat{H}\Psi(x,t) = \frac{3}{\sqrt{10}}E_1\psi_1(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} - \frac{1}{\sqrt{10}}E_3\psi_3(x)\,e^{-\frac{i}{\hbar}E_3 t}$$

de modo que

$$\begin{aligned}
\langle H\rangle &= \int_0^a \left[\frac{9E_1}{10}\psi_1(x)^2 + \frac{E_3}{10}\psi_3(x)^2 - \frac{3}{10}\psi_1(x)\,\psi_3(x)\left(E_3 e^{\frac{i}{\hbar}(E_1-E_3)t} - E_1 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_1-E_3)t}\right)\right]dx \\
&= \frac{9E_1}{10} + \frac{E_3}{10}.
\end{aligned}$$

Logo

$$\langle H\rangle = \frac{9E_1}{10} + \frac{E_3}{10}. \tag{9}$$