Resolução da P3 - 08/12
Mecânica Quântica 1 - Diurno

Exercício 1: Considere uma partícula de massa m num poço esférico infinito

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

Vamos nos restringir ao caso $l = 0$.

a) Para calcular os níveis de energia do sistema precisamos resolver a equação radial. Para $l = 0$ a equação radial assume a forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(r)}{dr^2} + V(r)\,u(r) = Eu(r)$$

com $u(r) \equiv rR(r)$.

- Região 1: $r > a$

$$u_1(r) = 0.$$

- Região 2: $r < a$

$$\frac{d^2u_2(r)}{dr^2} = -k^2u_2(r)$$

com $k \equiv \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$. A solução geral da equação acima é da forma

$$u_2(r) = A\sin kr + B\cos kr.$$

Levando em conta que a solução radial é da forma $R(r) = \frac{u(r)}{r}$ verificamos que $u_2(0) = 0$ para que $R(r)$ seja finita na origem $r = 0$. Assim devemos tomar $B = 0$. Logo

$$u(r) = \begin{cases} 0 & r > a \\ A\sin kr & r < a. \end{cases}$$

Agora vamos aplicar a condição de contorno $u(a) = 0$ associada com a continuidade da função de onda radial em $r = a$. Obtemos a relação

$$\sin ka = 0 \Rightarrow k_{n0} = \frac{n\pi}{a} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

da qual identificamos os níveis de energia

$$E_{n0} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{1}$$

e as funções de onda radiais

$$R_{n,0}(r) = \begin{cases} 0 & r > a \\ A\frac{\sin\frac{n\pi r}{a}}{r} & r < a. \end{cases} \tag{2}$$

A constante A, que pode ser tomada como real e positiva, é obtida da condição de normalização $\int_0^\infty r^2 |R(r)|^2 dr = 1$. Mais explicitamente temos

$$A^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi r}{a} dr = A^2 \frac{a}{2} = 1 \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{a}}.$$

e portanto

$$R_{n,0}(r) = \begin{cases} 0 & r > a \\ \sqrt{\frac{2}{a}}\frac{\sin\frac{n\pi r}{a}}{r} & r < a. \end{cases} \tag{3}$$

Finalmente, levando em conta que para $l = 0$ (e portanto $m = 0$) temos $Y_{0,0}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ a função de onda completa tem a forma

$$\psi_{n,0,0}(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & r > a \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}\frac{\sin\frac{n\pi r}{a}}{r} & r < a. \end{cases} \tag{4}$$

b) Analisando a expressão da energia (1) verificamos que o estado de mais baixa energia corresponde ao estado com $n = 1$. A função de onda do estado de menor energia é da forma

$$\psi_{1,0,0}(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & r > a \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}\frac{\sin\frac{\pi r}{a}}{r} & r < a. \end{cases} \tag{5}$$

Já a função de onda do primeiro estado excitado, que corresponde ao estado com $n = 2$, é da forma

$$\psi_{2,0,0}(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & r > a \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi a}}\frac{\sin\frac{2\pi r}{a}}{r} & r < a. \end{cases} \tag{6}$$

c) As densidades de probabilidade para os estados obtidos acima são da forma

$$\rho_{1,0,0}(\vec{r}) = |\psi_{1,0,0}(\vec{r})|^2 = \begin{cases} 0 & r > a \\ \frac{1}{2\pi a}\frac{\sin^2\frac{\pi r}{a}}{r^2} & r < a \end{cases} \tag{7}$$

e

$$\rho_{2,0,0}(\vec{r}) = |\psi_{2,0,0}(\vec{r})|^2 = \begin{cases} 0 & r > a \\ \frac{1}{2\pi a}\frac{\sin^2\frac{2\pi r}{a}}{r^2} & r < a. \end{cases} \tag{8}$$

Vamos analisar o comportamento das densidades como função de r.

- Limite para $r \to 0$: Levando em consideração o limite fundamental $\lim_{x\to 0} \frac{\sin x}{x} = 1$ é fácil verificar que

$$\lim_{r\to 0} \rho_{n,0,0}(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi a} \lim_{r\to 0} \frac{\sin^2 \frac{n\pi r}{a}}{r^2} = \frac{n^2 \pi}{2a^3}.$$

Assim, as densidades $\rho_{1,0,0}(\vec{r})$ e $\rho_{2,0,0}(\vec{r})$ assumem em $r = 0$, respectivamente, os valores $\frac{\pi}{2a^3}$ e $\frac{2\pi}{a^3}$.

- Zeros das densidades: De (7) e (8) verificamos que a densidade $\rho_{1,0,0}(\vec{r})$ se anula apenas em $r = a$ e que a densidade $\rho_{2,0,0}(\vec{r})$ se anula em $r = \frac{a}{2}$ e $r = a$.

- Derivada primeira: A derivada primeira de $\rho_{n,0,0}(\vec{r})$ é dada por

$$\begin{aligned} \frac{d\rho_{n,0,0}(\vec{r})}{dr} &= 2\psi_{n,0,0}(\vec{r}) \frac{d\psi_{n,0,0}(\vec{r})}{dr} \\ &= \frac{1}{\pi a} \frac{\sin \frac{n\pi r}{a}}{r} \left[\frac{n\pi \cos \frac{n\pi r}{a}}{ar} - \frac{\sin \frac{n\pi r}{a}}{r^2} \right]. \end{aligned}$$

  Assim, verificamos que as derivadas primeiras das densidades $\rho_{1,0,0}(\vec{r})$ e $\rho_{2,0,0}(\vec{r})$ se anulam na origem, $r = 0$, e nos pontos onde as funções $\psi_{1,0,0}(\vec{r})$ e $\psi_{2,0,0}(\vec{r})$ se anulam.

Na figura abaixo temos o esboço das densidades de probabilidade calculadas.

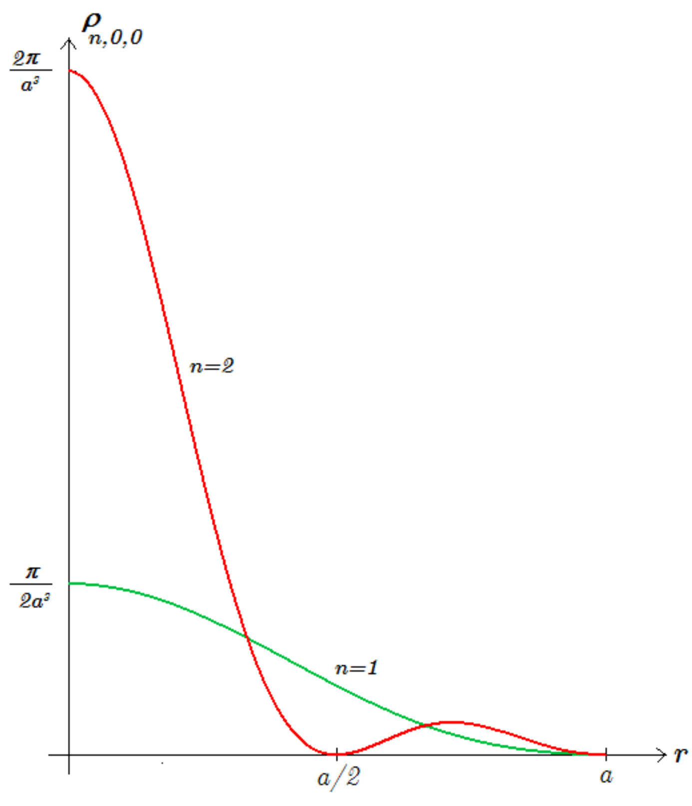

Figura 1: Densidades de probabilidade, para $l = 0$, associadas ao estado de mais baixo energia ($n = 1$) e ao primeiro estado excitado ($n = 2$).

d) Diretamente do gráfico, se a partícula se encontra no estado de mais baixa energia, verificamos que numa medida da posição a distância mais provável é $r = 0$.

Exercício 2: Uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ está no estado

$$|\chi\rangle = \frac{3}{5}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle + i\frac{4}{5}\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle \to \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 3 \\ 4i \end{pmatrix}.$$

a) A representação do operador $\hat{S}_y$ na base constituída pelos auto estados simultâneos de $\hat{\vec{S}}^2$ e $\hat{S}_z$ é dada pela matriz

$$S_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Tomarei a liberdade de não explicitar os cálculos da diagonalização da matriz S_y pois como vocês devem ter reparado já efetuamos essa diagonalização na lista 3. Os autovalores da matriz S_y são $\frac{\hbar}{2}$ e $-\frac{\hbar}{2}$ e portanto estes são os possíveis valores que podemos obter numa medida do observável $\hat{S}_y$. Os autovetores correspondentes são da forma

$$\left|S_y,\frac{\hbar}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle + i\frac{1}{\sqrt{2}}\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle \to \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

e

$$\left|S_y,-\frac{\hbar}{2}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle - i\frac{1}{\sqrt{2}}\left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle \to \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}.$$

Suponha que o sistema se encontre no estado descrito pelo vetor $|\chi\rangle$. A probabilidade $\wp\left(S_y,\frac{\hbar}{2}\right)$ de obtermos o valor $\frac{\hbar}{2}$ numa medida do observável $\hat{S}_y$ é

$$\wp\left(S_y,\frac{\hbar}{2}\right) = \left|\left\langle S_y,\frac{\hbar}{2}|\chi\right\rangle\right|^2 = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & -i \end{pmatrix}\frac{1}{5}\begin{pmatrix} 3 \\ 4i \end{pmatrix}\right|^2 = \frac{49}{50} \tag{9}$$

enquanto que a probabilidade $\wp\left(S_y,-\frac{\hbar}{2}\right)$ de obtermos o valor $-\frac{\hbar}{2}$ numa medida do observável $\hat{S}_y$ é

$$\wp\left(S_y,-\frac{\hbar}{2}\right) = 1 - \wp\left(S_y,\frac{\hbar}{2}\right) = \frac{1}{50}. \tag{10}$$

b) A representação do operador $\hat{S}_y^2$ na base constituída pelos auto estados simultâneos de $\hat{\vec{S}}^2$ e $\hat{S}_z$ é uma matriz múltipla da matriz unidade, ou seja,

$$S_y^2 = \frac{\hbar^2}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Tal fato nos permite concluir que numa medida de $\hat{S}_y^2$ só podemos obter o valor $\frac{\hbar^2}{4}$, que é um autovalor duplamente degenerado, com probabilidade igual a 100%.

c) Vamos agora supor que o hamiltoniano da partícula seja

$$\hat{H} = \omega \hat{S}_z.$$

Os auto estados de $\hat{H}$ são os próprios auto estados de $\hat{S}_z$:

$$\begin{cases} \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle, & \text{com energia } E_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = \frac{\hbar\omega}{2}, \\ \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle, & \text{com energia } E_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = -\frac{\hbar\omega}{2}. \end{cases}$$

Se no instante inicial $t = 0$ o sistema se encontra no estado $|\chi\rangle$ o vetor de estado no instante t será

$$|\chi(t)\rangle = \frac{3}{5} e^{-i\frac{\omega t}{2}} \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle + \frac{4}{5} i e^{i\frac{\omega t}{2}} \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle. \tag{11}$$

d) A representação do operador $\hat{S}_x$ na base constituída pelos auto estados simultâneos de $\hat{\vec{S}}^2$ e $\hat{S}_z$ é dada pela matriz

$$S_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

O valor médio das medidas de $\hat{S}_x$ no instante t, $\left\langle \hat{S}_x \right\rangle_t = \langle \chi(t)| \hat{S}_x |\chi(t)\rangle$, é simplesmente

$$\begin{aligned} \left\langle \hat{S}_x \right\rangle_t &= \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 3e^{i\frac{\omega t}{2}} & -4ie^{-i\frac{\omega t}{2}} \end{pmatrix} \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 3e^{-i\frac{\omega t}{2}} \\ 4ie^{i\frac{\omega t}{2}} \end{pmatrix} \\ &= -\frac{12\hbar}{25}\sin\omega t. \end{aligned}$$

Exercício 3: Considere que um elétron, no instante $t = 0$, esteja num estado descrito pela função de onda

$$\Phi(\vec{r}) = \frac{1}{2}\Psi_{211}(\vec{r}) + \frac{1}{2}\Psi_{311}(\vec{r}) + \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_{321}(\vec{r})$$

com $\Psi_{nlm}(\vec{r})$ sendo as autofunções correspondentes aos auto-estados simultâneas de $\hat{H}$, $\overrightarrow{\hat{L}}^2$ e $\hat{L}_z$ com autovalores respectivamente iguais a $\frac{E_1}{n^2}$, $\hbar^2 l(l+1)$, $\hbar m$.

a) Note que o estado $\Phi(\vec{r})$ é a combinação linear de três autofunções de $\vec{L}^2$: $\Psi_{211}(\vec{r})$, $\Psi_{311}(\vec{r})$ associados com o autovalor $2\hbar^2$ e $\Psi_{321}(\vec{r})$ associado ao autovalor $6\hbar^2$. Assim numa medida do módulo ao quadrado do momento angular orbital podemos encontrar ou $2\hbar^2$ ou $6\hbar^2$.

Se denotarmos por $|\Phi\rangle$ o vetor de estado associado a função de onda $\Phi(\vec{r})$ e $|\psi_{nlm}\rangle$ o vetor de estado associado a autofunção $\Psi_{nlm}(\vec{r})$ as probabilidades de obtermos os valores $2\hbar^2$ e $6\hbar^2$, em medidas de $\vec{L}^2$, são dados respectivamente por

$$\wp\left(2\hbar^2\right) = \sum_{n=2}^{\infty}\sum_{m=-1}^{1} |\langle\psi_{n1m}|\Phi\rangle|^2 = \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 = \frac{1}{2} \tag{12}$$

e

$$\wp\left(6\hbar^2\right)=\sum_{n=3}^{\infty}\sum_{m=-2}^{2}\left|\langle\psi_{n2m}|\Phi\rangle\right|^2=\left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2=\frac{1}{2} \tag{13}$$

ou seja, são equiprováveis. Note que a ação de $\vec{L}^2$ sobre o vetor de estado $|\Phi\rangle$é dada por

$$\vec{L}^2\left|\Phi\right\rangle=\hbar^2\left|\psi_{211}\right\rangle+\hbar^2\left|\psi_{311}\right\rangle+\frac{6\hbar^2}{\sqrt{2}}\left|\psi_{321}\right\rangle$$

de modo que o valor médio $\left\langle\vec{L}^2\right\rangle_{\Phi}$ é simplesmente

$$\left\langle\vec{L}^2\right\rangle_{\Phi}=\left\langle\Phi\right|\vec{L}^2\left|\Phi\right\rangle=4\hbar^2. \tag{14}$$

b) Todos os estados com $n=2$ possuem energia igual a $\frac{E_1}{4}$. Dessa forma a probabilidade de numa medida da energia obtermos o valor $\frac{E_1}{4}$ é

$$\wp\left(\frac{E_1}{4}\right)=\left|\langle\psi_{200}|\Phi\rangle\right|^2+\sum_{m=-1}^{1}\left|\langle\psi_{21m}|\Phi\rangle\right|^2=\left(\frac{1}{2}\right)^2=\frac{1}{4}. \tag{15}$$

Pelo princípio do colapso da função de onda, no instante logo após a medida da energia o vetor de estado do elétron será $|\psi_{211}\rangle$.

c) O vetor de estado do elétron no instante $t>0$ é

$$\left|\Phi\left(t\right)\right\rangle=\frac{1}{2}e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{E_1}{4}t}\left|\psi_{211}\right\rangle+\frac{1}{2}e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{E_1}{9}t}\left|\psi_{311}\right\rangle+\frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{E_1}{9}t}\left|\psi_{321}\right\rangle. \tag{16}$$

d) Observe que $\left|\Phi\left(t\right)\right\rangle$ é um autovetor de L_z com autovalor $\hbar$, ou seja,

$$L_z\left|\Phi\left(t\right)\right\rangle=\hbar\left|\Phi\left(t\right)\right\rangle.$$

Logo o valor médio $\langle L_z\rangle_t$ no instante t é simplesmente

$$\langle L_z\rangle_t=\left\langle\Phi\left(t\right)\right|\hat{L}_z\left|\Phi\left(t\right)\right\rangle=\hbar. \tag{17}$$