Quântica sem filosofia

Jhordan Silveira de Borba

19 de junho de 2025

sbjhordan@gmail.com

Sumário

1 A função de onda **4**
1.1 Equação de Schrödinger 4
1.2 Momentum 14
1.3 A relação da incerteza 23

2 Equação de Schrödinger independente do tempo **31**
2.1 Estados estacionários 31
2.2 Poço quadrado infinito 43
2.3 Oscilador harmônico 75
2.3.1 Método algébrico 78
2.3.2 Método analítico 99
2.4 Partícula livre 99
2.5 Potencial função de delta 99
2.6 Poço quadrado finito 99

3 Formalismo **99**

4 3 dimensões **100**

5 Particulas identicas **100**

6 Simetria e conservação **100**

Não há um consenso geral sobre quais são os princípios fundamentais da mecânica quântica, sobre como ela deve ser ensinada ou mesmo sobre o que ela realmente "significa". Todo físico competente sabe "fazer" mecânica quântica, mas as histórias que contamos a nós mesmos sobre o que estamos fazendo são tão variadas quanto os contos de Scheherazade — e quase tão implausíveis quanto eles... Contudo, há um consenso de que não é possível discutir de forma inteligente o significado da mecânica quântica sem antes ter uma noção clara do que ela realmente faz. (Introduction to Quantum Mechanics - 3ª Edição, David J. Griffiths)

Prefácio

Tenho tentado iniciar um projeto envolvendo física — mais especificamente, mecânica quântica — há bastante tempo. Recentemente, tive uma ideia que acredito poder estender a toda a física, mas pretendo começar pela quântica, pois tenho uma certa urgência em revisá-la. A verdade é que toda divisão entre áreas da ciência é, em grande medida, artificial. Eu mesmo costumo criticar essas divisões, e por isso reconheço que este projeto é, de certa forma, hipócrita: nele, acabarei por aprofundar essa separação.

Entendo a física como a ciência que se dedica a descrever como as grandezas físicas — aquelas que podem ser medidas — evoluem no tempo. A forma como essas grandezas são interpretadas é, em muitos aspectos, uma discussão distinta, frequentemente de natureza mais filosófica[1].

Neste projeto — que começa pela quântica — proponho remover, tanto quanto possível, toda discussão interpretativa. Um físico competente, é claro, não pode se esquivar dessas questões, e por isso estou ciente de que o material que proponho será, intencionalmente, insuficiente nesse aspecto. Minha proposta é que o leitor compreenda aquilo que é mais indiscutível na física: a descrição matemática da teoria. A partir desse domínio, o leitor poderá, então, se engajar com as interpretações de maneira mais sólida e consciente.

Escrevo este material também com base na convicção de que, do ponto de vista da física, a principal dificuldade enfrentada pelos estudantes encontra-se justamente na formulação matemática das teorias. Assim, começando

[1] Ainda assim, acredito que uma boa interpretação favorece o progresso da ciência, enquanto uma interpretação inadequada pode representar um obstáculo.

pela mecânica quântica, meu objetivo é produzir um conteúdo enxuto, que funcione como apoio para estudantes interessados.

Para alcançar esse objetivo, basear-me-ei em duas decisões. A primeira é que revisarei a quântica com base no livro Introduction to Quantum Mechanics (3ª edição, David J. Griffiths). Além de revisar a matemática apresentada na obra — tanto na exposição teórica quanto nos exemplos — resolverei todos os exercícios marcados com uma estrela, pois são considerados essenciais pelo autor. Assim, este projeto pode ser visto como uma extensão do conteúdo apresentado nesse livro.

A segunda decisão é enfatizar um ponto muitas vezes negligenciado: na física, por convenção, existem apenas sete grandezas fundamentais. Isso significa que todas as demais grandezas físicas e constantes podem ser expressas em função dessas sete. Portanto, evitarei discutir "o que é" uma força, ou "o que é" uma função de onda, e me limitarei a suas descrições matemáticas. Incluirei apenas uma breve explicação conceitual sobre quais são essas grandezas fundamentais.

- **Comprimento** (metro, m): Mede a extensão espacial de um objeto ou a distância entre dois pontos. É uma das bases para descrever posições, trajetórias e dimensões no espaço.

- **Massa** (quilograma, kg): Quantifica a quantidade de matéria de um corpo. Também está relacionada à inércia (resistência à mudança de movimento) e à gravidade (força com que corpos se atraem).

- **Tempo** (segundo, s): Mede a duração entre eventos. Fundamental para descrever a evolução dinâmica dos sistemas físicos.

- **Corrente elétrica** (ampère, A): Mede o fluxo de carga elétrica por unidade de tempo. Essencial para descrever fenômenos eletromagnéticos.

- **Temperatura termodinâmica** (kelvin, K): Relaciona-se com o grau de agitação das partículas em um sistema. Define o sentido do fluxo de calor e é central na termodinâmica.

- **Quantidade de substância** (mol, mol): Mede o número de entidades elementares (átomos, moléculas, íons, etc.). Um mol contém exatamente $6,022 \times 10^{23}$ entidades (número de Avogadro).

- **Intensidade luminosa** (candela, cd): Mede a quantidade de luz emitida por uma fonte em uma direção específica. Está associada à percepção visual da luz pelo olho humano.

Uma questão à qual gostaria de chamar a atenção do leitor, antes de finalizar, é para refletir sobre o que realmente medimos diretamente — como o tempo e a distância — e o que depende de modelos físicos, matemáticos ou outras definições, que englobam as demais grandezas. Por exemplo, não podemos medir diretamente o "peso" ou, de forma mais geral, a "força": calculamos essas grandezas a partir de outras medições diretas. Trata-se de um debate interessante, que deixarei em aberto por enquanto. Por ora, basta definir que partirei sempre das grandezas fundamentais.

1 A função de onda

1.1 Equação de Schrödinger

A equação de Schrödinger desempenha um papel análogo na mecânica quântica ao da segunda lei de Newton na mecânica clássica:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi \tag{1}$$

Onde $\hbar$ é a constante de Planck dividida por 2π. Ou seja, se temos uma partícula de massa m se movendo ao longo do eixo x e queremos obter informações sobre a partícula em qualquer instante t, a partir de uma condição inicial adequada (tipicamente $\Psi(x,0)$), a equação 1 determina a função de onda $\Psi(x,t)$ para todo tempo futuro, de forma análoga a como a segunda lei de Newton determina a posição $x(t)$ para todo instante futuro.

A partir da função de onda, a interpretação estatística de Born nos fornece a probabilidade de encontrar a partícula entre os pontos a e b no instante t:

$$P = \int_a^b |\Psi(x,t)|^2 \, dx \tag{2}$$

Como $|\Psi(x,t)|^2$ representa uma densidade de probabilidade no espaço, ela deve ter unidade de m^{-1} em uma dimensão. Consequentemente, a função de onda $\Psi(\boldsymbol{x},t)$ tem unidade de $m^{-1/2}$. De forma mais geral, em n dimensões, a função de onda tem unidade de $m^{-n/2}$. Como a partícula deve estar em algum lugar, então:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 \, dx = 1 \tag{3}$$

Retornando à equação de Schrödinger: se Ψ é uma solução, então $A\Psi$ também será uma solução para qualquer constante A. Podemos escolher o valor de A de modo que a condição de normalização seja satisfeita. Se a solução da equação de Schrödinger diverge (isto é, tende ao infinito) ou é nula em todo o espaço, ela não é normalizável e, portanto, não representa um estado físico conhecido e deve ser descartada. Vale destacar que, uma vez normalizada, a função de onda Ψ permanecerá normalizada ao longo do tempo. Isso reflete a conservação da probabilidade na mecânica quântica.

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x,t)|^2 \, dx \tag{4}$$

Aqui, fizemos a troca de derivada total por derivada parcial dentro da integral porque a integral resulta em uma função que depende apenas do tempo t, enquanto o integrando $|\Psi(x,t)|^2$ depende tanto de x quanto de t.

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = \frac{\partial}{\partial t}\left(\sqrt{\Psi^*\Psi}\right)^2 = \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) = \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\Psi \tag{5}$$

A equação de Schrödinger é:

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar}V\Psi \tag{6}$$

E tomando o complexo conjugado, assumindo V real:

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} = -\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar}V\Psi^* \tag{7}$$

Então:

$$\frac{\partial}{\partial t}|\Psi|^2 = \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\Psi \tag{8}$$
$$= \Psi^*\left(\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar}V\Psi\right) + \left(-\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2} + \frac{i}{\hbar}V\Psi^*\right)\Psi \tag{9}$$
$$= \Psi^*\frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{i\hbar}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\Psi \tag{10}$$
$$= \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\Psi\right) \tag{11}$$

Então:

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi(x,t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(x,t)|^2 dx \tag{12}$$
$$= \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\Psi\right)dx \tag{13}$$
$$= \frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\Psi\right)dx \tag{14}$$

Olhando o primeiro termo, vamos aplicar integral por partes (prova):

$$\int_a^b f(x)\,g'(x)\,dx = f(x)\,g(x)|_a^b - \int_a^b g(x)\,f'(x)\,dx \tag{15}$$

Onde também temos que $u = f(x)$ e $dv = f'(x)\,dx$. Então sendo $f = \Psi^*$ e $g = \Psi'$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi(x,t)^*\,\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}dx = \Psi^*\Psi'|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi'\Psi^{*\prime}dx \tag{16}$$

De modo análogo temos pra segunda integral $f = \Psi$ e $g = \Psi^{*\prime}$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}dx = \Psi\Psi^{*\prime}|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^{*\prime}\Psi' dx \tag{17}$$

Então:

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\Psi\left(x,t\right)\right|^{2}dx=\frac{i\hbar}{2m}\int_{-\infty}^{+\infty}\left(\Psi^{*}\frac{\partial^{2}\Psi}{\partial x^{2}}-\frac{\partial^{2}\Psi^{*}}{\partial x^{2}}\Psi\right)dx \tag{18}$$

$$=\frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^{*}\Psi'\big|_{-\infty}^{+\infty}-\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi'\Psi^{*\prime}dx-\Psi\Psi^{*\prime}\big|_{-\infty}^{+\infty}+\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^{*\prime}\Psi'dx\right] \tag{19}$$

$$=\frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi^{*}\Psi'\big|_{-\infty}^{+\infty}-\Psi\Psi^{*\prime}\big|_{-\infty}^{+\infty}\right] \tag{20}$$

$$=\frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^{*}\Psi'-\Psi\Psi^{*\prime}\right)\big|_{-\infty}^{+\infty} \tag{21}$$

Para que um resultado seja fisicamente válido, a função de onda e suas derivadas devem tender a zero no infinito.[2], então:

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{+\infty}\left|\Psi\left(x,t\right)\right|^{2}dx=0 \tag{22}$$

Ou seja, como o valor da integral é constante ao longo do tempo, se a função de onda estiver normalizada no instante $t=0$, ela permanecerá normalizada para todos os instantes seguintes.

Exemplo: Considere a função de onda

$$\Psi\left(x,t\right)=Ae^{-\lambda|x|}e^{-i\omega t} \tag{23}$$

Onde A, λ e ω são constantes reais e positivas. Vamos calcular:
a) Normalização de Ψ.
b) Determinar os valores esperados de x e x^2.
c) Encontrar o desvio padrão de x e calcular a probabilidade da partícula ser encontrada fora do intervalo entre $\langle x\rangle-\sigma$ e $\langle x\rangle+\sigma$.

Sendo x um número real então:

[2]Existem construções matemáticas de funções de onda que podem ser normalizadas, mesmo sem tender exatamente a zero no infinito. Contudo, segundo Griffiths, tais funções não aparecem na física, pois uma função de onda física deve refletir a probabilidade de encontrar uma partícula em alguma região finita do espaço. Funções que não decaem no infinito não correspondem a estados físicos observáveis.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left|\Psi\left(x,t\right)\right|^2 dx = 1 \tag{24}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi\Psi^* dx = \tag{25}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(Ae^{-\lambda|x|}e^{-i\omega t}\right)\left(Ae^{-\lambda|x|}e^{i\omega t}\right) dx = \tag{26}$$

$$A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\lambda 2|x|} dx = \tag{27}$$

$$A^2 \left(\int_{-\infty}^{0} e^{-\lambda 2(-x)} dx + \int_{0}^{+\infty} e^{-\lambda 2x} dx\right) = \tag{28}$$

$$A^2 \left(\frac{1}{2\lambda}\int_{-\infty}^{0} e^{u} du + \frac{1}{-2\lambda}\int_{0}^{+\infty} e^{v} dv\right) = \tag{29}$$

Chamo atenção para a 5ª linha onde dividimos a integral para respeitar o módulo, usando a propriedade de aditividade da integral[3]. Onde no primeiro caso temos $u = 2\lambda x$ e no segundo caso $v = -2\lambda x$

$$A^2 \left(\frac{1}{2\lambda}\, e^{2\lambda x}\Big|_{-\infty}^{0} + \frac{1}{-2\lambda}\, e^{-2\lambda x}\Big|_{0}^{+\infty}\right) = 1 \tag{30}$$

$$A^2 \left(\frac{\left(e^0 - \frac{1}{e^\infty}\right)}{2\lambda} + \frac{\left(\frac{1}{e^\infty} - e^0\right)}{-2\lambda}\right) = \tag{31}$$

$$A^2 \left(\frac{1}{2\lambda} + \frac{1}{2\lambda}\right) = \tag{32}$$

$$\frac{A^2}{\lambda} = \tag{33}$$

$$A = \sqrt{\lambda} \tag{34}$$

O valor esperado para x é então:

[3] $\int_a^c f\left(x\right) dx = \int_a^b f\left(x\right) dx + \int_b^c f\left(x\right) dx$ onde $a \leq b \leq c$ (prova).

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x\left|\Psi(x,t)\right|^2 dx = A^2\left(\int_{-\infty}^{0} xe^{2\lambda x}dx + \int_{0}^{+\infty} xe^{-2\lambda x}dx\right) \tag{35}$$

$$= \lambda\left(\int_{-\infty}^{0} \frac{1}{2\lambda}\frac{u}{2\lambda}e^{u}du + \int_{0}^{+\infty} \frac{1}{2\lambda}\frac{u}{2\lambda}e^{-u}du\right) \tag{36}$$

$$= \frac{1}{4\lambda}\left(\int_{-\infty}^{0} ue^{u}du + \int_{0}^{+\infty} ue^{-u}du\right) \tag{37}$$

Onde usamos novamente que $u = 2\lambda x$. Poderíamos usar apenas o fato de que o integrando ser ímpar e termos limites simétricos[4]. Mas queremos resolver por completo. Sendo $f(u) = u$ e $g(u) = e^u$

$$\int_a^b f(u)\,g'(u)\,du = f(u)\,g(u)|_a^b - \int_a^b g(u)\,f'(u)\,du \tag{38}$$

$$\int_{-\infty}^{0} ue^{u}du = ue^{u}|_{-\infty}^{0} - \int_{-\infty}^{9} e^{u}du \tag{39}$$

$$= \lim_{u\to-\infty}(ue^{u}) - \int_{-\infty}^{9} e^{u}du \tag{40}$$

$$= \lim_{u\to\infty}\left(-\frac{u}{e^{u}}\right) - \left(e^{0} - \frac{1}{e^{\infty}}\right) \tag{41}$$

$$= \lim_{u\to\infty}\left(-\frac{u}{e^{u}}\right) - 1 \tag{42}$$

Como temos uma indeterminação do tipo $-\infty/\infty$ podemos aplicar a regra de L'hopital[5]:

[4]Funções pares são funções que $f(-x) = f(x)$,temos então $\int_{-a}^{a} f(x)\,dx = 2\int_0^a f(x)\,dx$. Funções ímpares são funções que $f(-x) = -f(x)$, temos então $\int_{-a}^{a} f(x)\,dx = 0$ (prova e prova).

[5]$\lim_{x\to a}\frac{f(x)}{g(x)} = \lim_{x\to a}\frac{f'(x)}{g'(x)}$,quando temos uma indeterminação do tipo $0/0$ ou $\pm\infty/\pm\infty$ (prova).

$$\int_{-\infty}^{0} ue^{u}du = \lim_{u\to\infty}\left(-\frac{du/dt}{de^{u}/dt}\right) - 1 \tag{43}$$
$$= \lim_{u\to\infty}\left(-\frac{du/dt}{de^{u}/dt}\right) - 1 \tag{44}$$
$$= \lim_{u\to\infty}\left(-\frac{1}{e^{u}}\right) - 1 \tag{45}$$
$$= -1 \tag{46}$$

E equivalente:

$$\int_{0}^{+\infty} ue^{-u}du = -ue^{-u}\Big|_{0}^{+\infty} + \int_{0}^{+\infty} e^{-u}du \tag{47}$$
$$= -\lim_{u\to\infty}\left(ue^{-u}\right) - \left(\frac{1}{e^{\infty}} - 1\right) \tag{48}$$
$$= -\lim_{u\to\infty}\left(\frac{u}{e^{u}}\right) + 1 \tag{49}$$
$$= 1 \tag{50}$$

Este é o mesmo limite que calculamos anteriormente aplicando a L'hopital e temos $\lim_{u\to\infty}(u/e^{u}) = 0$. Então retomando a equação 37 temos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x\left|\Psi(x,t)\right|^{2}dx = \frac{1}{4\lambda}\left(\int_{-\infty}^{0} ue^{u}du + \int_{0}^{+\infty} ue^{-u}du\right) \tag{51}$$
$$= \frac{1}{4\lambda}(-1+1) \tag{52}$$
$$= 0 \tag{53}$$

Temos algo análogo para o valor de esperado de x^2 onde vamos usar a mesma substituição $u = 2\lambda x$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \left|\Psi(x,t)\right|^2 dx = A^2 \left(\int_{-\infty}^{0} x^2 e^{2\lambda x} dx + \int_{0}^{+\infty} x^2 e^{-2\lambda x} dx \right) \tag{54}$$

$$= \lambda \left(\int_{-\infty}^{0} \frac{1}{2\lambda} \left(\frac{u}{2\lambda}\right)^2 e^{u} du + \int_{0}^{+\infty} \frac{1}{2\lambda} \left(\frac{u}{2\lambda}\right)^2 e^{-u} du \right) \tag{55}$$

$$= \frac{1}{8\lambda^2} \left(\int_{-\infty}^{0} u^2 e^{u} du + \int_{0}^{+\infty} u^2 e^{-u} du \right) \tag{56}$$

Aplicando novamente a integração por partes mas sendo agora $f(u) = u^2$e $g(u) = e^u$ para a primeira integral:

$$\int_a^b f(x) g'(x) dx = f(x) g(x)\big|_a^b - \int_a^b g(x) f'(x) dx \tag{57}$$

$$\int_{-\infty}^{0} u^2 e^u du = u^2 e^u\big|_{-\infty}^{0} - 2\int_{-\infty}^{0} u e^u du \tag{58}$$

$$= \lim_{u\to\infty} \frac{u^2}{e^u} - 2\int_{-\infty}^{0} u e^u du e^u \tag{59}$$

O resultado desta integral já foi encontrado na equação 46 e é -1. O limite podemos usar duas vezes l'hopital, de forma que obtemos apenas:

$$\int_{-\infty}^{0} u^2 e^u du = 2 \tag{60}$$

Para a segunda integral temos:

$$\int_a^b f(x) g'(x) dx = f(x) g(x)\big|_a^b - \int_a^b g(x) f'(x) dx \tag{61}$$

$$\int_{0}^{+\infty} u^2 e^{-u} du = -\, u^2 e^{-u}\big|_{0}^{\infty} + 2\int_{0}^{+\infty} u e^{-u} du \tag{62}$$

$$= -\lim_{u\to\infty} \frac{u^2}{e^u} + 2\int_{-\infty}^{0} u e^{-u} du \tag{63}$$

De forma análoga podemos aplicar duas vezes l'hopital para resolver o limite e o resultado dessa integral foi obtido em 46 e vale 1. Temos então:

$$\int_0^{+\infty} u^2 e^{-u} du = 2 \tag{64}$$

Agora combinando os resultados 60 e 64 em 56:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \left|\Psi\left(x,t\right)\right|^2 dx = \frac{1}{8\lambda^2}\left(\int_{-\infty}^{0} u^2 e^{u} du + \int_0^{+\infty} u^2 e^{-u} du\right) \tag{65}$$

$$= \frac{1}{8\lambda^2}\left(2+2\right) \tag{66}$$

$$= \frac{1}{2\lambda^2} \tag{67}$$

O desvio padrão de x é dado então por:

$$\sigma = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} \tag{68}$$

Como $\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \left|\Psi\left(x,t\right)\right|^2 = 0$ e $\langle x^2\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 \left|\Psi\left(x,t\right)\right|^2 = 1/2\lambda^2$ então:

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{2\lambda^2} - 0} = \frac{1}{\sqrt{2}\lambda} \tag{69}$$

E por fim a probabilidade de não estar no intervalo entre $-\sigma$ e $+\sigma$ é dado por:

$$\int_{-\infty}^{--\sigma} \left|\Psi\right|^2 dx + \int_{+\sigma}^{+\infty} \left|\Psi\right|^2 dx = -\int_{-\sigma}^{--\infty} \left|\Psi\left(x,t\right)\right|^2 dx + \int_{+\sigma}^{+\infty} \Psi\left(x,t\right)^2 dx \tag{70}$$

$$= \int_{+\sigma}^{+\infty} \Psi\left(-u,t\right)^2 du + \int_{+\sigma}^{+\infty} \Psi\left(x,t\right)^2 dx \tag{71}$$

Onde usamos a propriedade sobre inverter os limites da integral[6], e fizemos a substituição $u = -x$, de forma que temos $du/dx = -1$ ou $du = -dx$ e os novos limites são

$$\lim_{x\to -v} u = \lim_{x\to -v} -x = v \tag{72}$$

[6] $\int_a^b f\left(x\right) dx = -\int_b^a f\left(x\right) dx$ (prova).

No limite inferior $v = \sigma$ e no limite superior $v = -\infty$. No nosso caso como $\Psi(x,t)$ é uma função par, isto é $\Psi(-x,t) = \Psi(x,t)$, pois x sempre aparece em módulo $|x|$ então:

$$\int_{-\infty}^{--\sigma} |\Psi|^2 \, dx + \int_{+\sigma}^{+\infty} |\Psi|^2 \, dx = \int_{+\sigma}^{+\infty} \Psi(u,t)^2 \, du + \int_{+\sigma}^{+\infty} \Psi(x,t)^2 \, dx \quad (73)$$

$$= 2\int_{+\sigma}^{+\infty} \Psi(x,t)^2 \, dx \quad (74)$$

Onde temos o segundo resultado pois x e v são apenas símbolo para uma variável, que nos dois casos são a mesma variável na função Ψ, e temos consequentemente a mesma integral. Resolvendo então, essa é a mesma integral indeterminada resolvida no começo do exemplo, com a vantagem de que $0 < \sigma < \infty$, ou seja, os valores dentro dos limites da integral são sempre positivos de forma que dentro dessa faixa de valores podemos escrever que $|x| = x$.

$$\int_{-\infty}^{--\sigma} |\Psi|^2 \, dx + \int_{+\sigma}^{+\infty} |\Psi|^2 \, dx = 2\int_{+\sigma}^{+\infty} \Psi(x,t)^2 \, dx \quad (75)$$

$$= 2A^2 \int_{+\sigma}^{+\infty} e^{-\lambda 2|x|} dx \quad (76)$$

$$= 2\lambda \int_{+\sigma}^{+\infty} e^{-\lambda 2x} dx \quad (77)$$

$$= \frac{2\lambda}{-2\lambda}\left[\frac{1}{e^{\lambda 2x}}\right]_{+\sigma}^{+\infty} \quad (78)$$

$$= -\left[\frac{1}{e^{\infty}} - \frac{1}{e^{\lambda 2\sigma}}\right]_{+\sigma}^{+\infty} \quad (79)$$

$$= \exp\left[-\lambda 2\sigma\right] \quad (80)$$

$$= \exp\left[-\frac{2\lambda}{\sqrt{2}\lambda}\right] \quad (81)$$

Onde usamos o fato de que calculamos já A e σ. Temos então que a probabilidade é $\mathrm{e}^{-\sqrt{2}}$ou 0.2431, ou ainda $24,31\%$.

1.2 Momentum

O valor esperado $\langle x \rangle$ é a média das medidas feitas em uma coleção de sistemas idênticos, e não a média de medidas repetidas em um mesmo sistema. Porém, agora $\langle x \rangle$ varia com o tempo, e podemos querer saber quão rápido ele se move, de modo análogo ao que fazemos na mecânica clássica, onde a partir de $\ddot{x}$ investigamos outras propriedades do sistema. Temos então:

$$\frac{d\left\langle x\right\rangle}{dt} = \int x \frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi\left(x,t\right)\right|^2 \tag{82}$$

Onde estamos derivando apenas em relação ao que depende explicitamente do tempo, e aqui há algo que talvez nos pareça estranho. Diferentemente da mecânica clássica, em que temos $x(t)$, nesta abordagem matemática da mecânica quântica, x não depende do tempo; não é uma função de posição. Ele é apenas um rótulo para as diferentes posições que uma partícula pode ocupar. Portanto, não há uma evolução temporal de x. Os rótulos x para $\Psi(x,0)$ não evoluem para os rótulos de $\Psi(x,1)$, assim como as diferentes posições x para $\Psi(x,0)$ são independentes entre si. Ou seja, para $x = 1$, sempre teremos $x = 1$; não existe uma função $x(t)$ que evolua tal que $x(0) = 0$ e $x(1) = 1$.

O que ocorre é que $\Psi(0,0)$, $\Psi(1,0)$, $\Psi(0,1)$ e $\Psi(1,1)$ são todos valores distintos da função $\Psi(x,t)$. É a função de onda que evolui no tempo, e nela podemos obter diferentes probabilidades de medir a partícula tanto em $x = 0$ quanto em $x = 1$, e tanto em $t = 0$ quanto em $t = 1$. Então usando o resultado 11:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi\right|^2 = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\Psi\right) \tag{83}$$

Temos:

$$\frac{d\left\langle x\right\rangle}{dt} = \int x \frac{\partial}{\partial t}\left|\Psi\left(x,t\right)\right|^2 \tag{84}$$

$$= \frac{i\hbar}{2m}\int x\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\Psi\right)dx \tag{85}$$

Onde usando a regra do produto:

$$\frac{d}{dx}(fg) = f\frac{dg}{dx} + \frac{df}{dx}g \tag{86}$$

Então:

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right) \tag{87}$$

$$= \left[\frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Psi^*\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right] - \left[\frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}\Psi + \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right] \tag{88}$$

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Psi^*\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2}\Psi \tag{89}$$

Então podemos reescrever a integral como:

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{i\hbar}{2m}\int x\left[\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\right]dx \tag{90}$$

Por conveniência não estamos escrevendo os limites da integral $\int_{-\infty}^{+\infty} \to \int$ e nem as dependências da função de onda $\Psi(x,t) = \Psi$. Usando integral por partes então em cada uma das integrais escolhendo $f(x) = x$ e $g'(x) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right)$, para a primeira integral, temos:

$$\int_a^b f(x)\, g'(x)\, dx = f(x)\, g(x)\big|_a^b - \int_a^b g(x)\, f'(x)\, dx \tag{91}$$

$$\int x\left(\Psi^*\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}\right) = \left[x\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right)\right]_{-\infty}^{+\infty} - \int\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi\right)dx \tag{92}$$

Uma demonstração mais robusta matematicamente pode ser necessária futuramente, mas exigimos que $\Psi(x)$ (e suas derivadas) vá a zero quando $x \to \infty$ mais rápido do que o próprio x vai para infinito — ou seja, mais rápido do que $1/|x| \to 0$ quando $x \to \infty$. Essa é uma exigência relacionada também às condições de normalização da função de onda. Apesar de não termos discutido o quão rápido a função de onda deve tender a zero no infinito, já havíamos mencionado essa exigência para que a função de onda consiga descrever um estado fisicamente possível. Aqui, estamos apenas assumindo que isso ocorre mais rápido do que $1/|x|$. Além disso, em sistemas típicos, a derivada de Ψ se comporta de forma semelhante. É importante notar que aqui assumimos várias coisas sobre a função de onda para que esse resultado seja válido, de forma sucinta:

- Ψ e suas derivadas vão a zero quando $x \to \infty$ mais rápido que $1/|x|$.

Podemos dizer que essas exigências são para funções de onda normalizadas no sentido mais tradicional. É possível a existência de sistemas quânticos cuja função de onda não seja normalizável no sentido que estamos discutindo aqui, e que podem ser tratados por outras abordagens. Contudo, essas são exceções e exigem um conhecimento mais avançado. Neste momento, devemos nos ater aos casos que obedecem a essas condições, por serem tanto mais comuns quanto mais simples de trabalhar.

Mas uma vez que o termo entre parênteses vai então mais rápido a 0 quando $x \to \infty$, o primeiro termo é 0 e ficamos com:

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{2m}\int\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\Psi\right)dx \tag{93}$$

Ainda vale comentar que Griffiths define que os estados fisicamente possíveis correspondem a soluções quadrado-integráveis da equação de Schrödinger [7].Estendendo essa discussão, considerando que o comportamento de $|f(x)|^2$ pode ser aproximado por $|x|^{-p}$ no infinito, temos então:

[7] $\int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2\, dx < \infty$(definição)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{|x|^p} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{|x|^p} + = \int_{-\infty}^{0} \frac{dx}{(-x)^p} + \int_{0}^{+\infty} \frac{dx}{x^p} \tag{94}$$

$$= -\int_{+\infty}^{0} \frac{du}{u^p} + \int_{0}^{+\infty} \frac{dx}{x^p} \tag{95}$$

$$= \int_{0}^{+\infty} \frac{du}{u^p} + \int_{0}^{+\infty} \frac{dx}{x^p} \tag{96}$$

$$= 2\int_{0}^{+\infty} \frac{dx}{x^p} \tag{97}$$

$$= -\int_{0}^{+\infty} x^{-p} dx \tag{98}$$

$$= \left. \frac{x^{-p+1}}{p-1} \right|_{0}^{+\infty} \tag{99}$$

$$= (p-1) \lim_{x\to\infty} \frac{1}{x^{p-1}} - 0 \tag{100}$$

$$= (p-1) \lim_{x\to\infty} \frac{1}{x^{p-1}} \tag{101}$$

Para que a integral não diverja, precisamos que$p - 1 \geq 0$, ou seja, $p \geq 1$,logo, o menor valor que p pode assumir para a integral convergir é $p = 1$. Como consideramos que o comportamento assintótico é $|f(x)|^2 \sim \frac{1}{|x|^p}$, temos $|f(x)| \sim \frac{1}{\sqrt{|x|^p}}$ como Griffiths menciona[8]. Pois:

$$|f(x)|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{x^p}} \right|^2 = \frac{1}{|x^p|} \tag{102}$$

Como p deve ser maior que 1 para a normalização da função de onda, o valor mínimo que $f(x)$ pode assumir para garantir isso é $f(x) \sim \frac{1}{\sqrt{|x|}}$. Além disso, podemos notar que, conforme aumentamos p, a função $f(x)$ deve decair cada vez mais rápido para zero quando $x \to \infty$. É nesse sentido que se diz que, evidentemente, $\Psi(x,t)$ deve ir a zero mais rápido do que $\frac{1}{\sqrt{|x|}}$ quando $|x| \to \infty$.

Mas este caso, apesar de ser uma aproximação útil e cobrir a maioria dos casos fisicamente válidos, como foi discutido, não cobre necessariamente

[8]Mais especificamente, se p for real, temos $|x^p|$=$|x|^p$, logo $|f(x)| \sim \frac{1}{|\sqrt{x^p}|}$.

todos. É possível que uma função de onda fisicamente válida possua outra aproximação assintótica ou mesmo não seja quadrado-integrável. Neste último caso, é necessário usar alguma generalização da condição de normalização. Para a função de onda ser válida fisicamente, é necessário principalmente que ela seja uma solução da equação de Schrödinger e que possua uma interpretação probabilística (que pode ser feita através de uma generalização da normalização), além, evidentemente, de obedecer às condições impostas pelo problema físico.

Por enquanto, trabalharemos com os casos em que essas condições a respeito da normalização da função de onda são válidas, isto é, que a função seja quadrado-integrável e, consequentemente, apresente uma normalização do tipo $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2\, dx = 1$, além de possuir um comportamento assintótico no infinito similar a $\frac{1}{|x|^p}$, com $p \geq \frac{1}{2}$[9].

Faremos isso da mesma forma que é assumido por Griffiths, pois assim podemos trabalhar com os casos mais gerais e deixar as exceções para um estudo mais especializado no futuro. Retomando, então, a discussão do limite fazendo uso dessas condições, ou seja, considerando que o comportamento assintótico da função de onda no infinito é similar a $\frac{1}{\sqrt{x}}$, temos:

$$\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \sim \frac{1}{\sqrt{x}} \left(-\frac{1}{2x^{\frac{3}{2}}} \right) = -\frac{1}{2x^2} \tag{103}$$

E consequentemente

$$\lim_{x\to\infty} x \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) \sim \lim_{x\to\infty} \left(-\frac{x}{2x^2} \right) = \lim_{x\to\infty} \left(-\frac{1}{2x} \right) = 0 \tag{104}$$

Então ficamos com:

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{2m} \int \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \Psi \right) dx \tag{105}$$

[9]Vale destacar que, neste último cálculo do limite, precisamos apenas que o produto entre a função de onda e sua derivada decaia mais rapidamente que $\frac{1}{x}$ quando $x \to \infty$. Com a imposição adotada de que a função de onda decaia no infinito, no mínimo, como $\frac{1}{\sqrt{x}}$, garantimos essa condição. Por outro lado, se a função de onda decaísse, por exemplo, como $e^{-|x|}$, isso significaria que ela decai ainda mais rapidamente, e também teríamos o mesmo resultado no limite. No entanto, precisaríamos calcular para verificar se, com esse comportamento assintótico, a função de onda é quadrado-integrável.

Usando novamente a integral por substituição, para a segunda integral fazendo $f = \Psi$ e $g = \Psi^*$

$$\int_a^b f\frac{dg}{dx}dx = [fg]_a^b - \int_a^b \frac{df}{dx}gdx \tag{106}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\Psi dx = [\Psi\Psi^*]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} \tag{107}$$

$$= -\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} \tag{108}$$

Onde usamos o fato de que a função de onda vai a 0 no infinito . Temos então:

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = -\frac{i\hbar}{2m}\int\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}\right)dx = -\frac{i\hbar}{m}\int \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}dx \tag{109}$$

Vamos postular[10]: O valor esperado da velocidade é igual a derivada no tempo do valor esperado da posição:

$$\langle v\rangle = \frac{d\langle x\rangle}{dt} \tag{110}$$

Temos então o momento:

$$\langle p\rangle = m\frac{d\langle x\rangle}{dt} = -i\hbar\int \Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial x}dx \tag{111}$$

Podemos reescrever as expressões como:

$$\langle x\rangle = \int \Psi^*\left[x\right]\Psi dx \tag{112}$$

$$\langle p\rangle = \int \Psi^*\left[-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)\right]\Psi dx \tag{113}$$

[10]Postulado é uma afirmação fundamental aceita como verdadeira sem necessidade de demonstração, que serve de base para o desenvolvimento de um sistema lógico ou teórico.

Dizemos que o operador [11] x "representa" a posição e o operador $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ "representa" o momento. Para calcular os valores esperados, fazemos um "sanduíche", colocando o operador entre Ψ^* e Ψ. Todas as variáveis dinâmicas clássicas podem ser expressas em termos de posição e momento. Por exemplo, a energia cinética é dada por:

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{m} \tag{114}$$

O momento angular é dado por:

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times m\boldsymbol{v} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p} \tag{115}$$

Então, para calcular o valor esperado de qualquer quantidade $Q(x,p)$, substituímos p por $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ e inserimos o operador resultante entre o conjugadoΨ^* e a própria função de onda Ψ. De forma geral:

$$\langle Q\left(x,p\right)\rangle = \int \Psi^* \left[Q\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\right]\Psi dx \tag{116}$$

Griffiths promete fundamentar essa equação em uma base teórica sólida futuramente, mas por enquanto podemos considerá-la um axioma[12] . Por exemplo, o valor esperado para a energia cinética pode ser escrito como:

$$\langle T\rangle = -\frac{\hbar^2}{m}\int \Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}dx \tag{117}$$

Exemplo: Calcular $d\left\langle p\right\rangle/dt$ Queremos obter:

$$\frac{d\left\langle p\right\rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle \tag{118}$$

Vamos retomar a definição de $\langle p\rangle$

[11] Um operador é uma entidade matemática que atua sobre o espaço de estados físicos de um sistema, isto é, o conjunto de todos os estados possíveis que o sistema pode assumir. Quando aplicado a um estado físico, o operador gera outro estado físico ou uma informação associada a esse estado, dependendo do tipo de operador.

[12] Basicamente, é o mesmo que um postulado. A diferença entre axioma e postulado é mais uma questão de contexto: usa-se mais "axioma" em matemática e lógica, enquanto "postulado" é mais comum em outras ciências. Além disso, axioma costuma ser visto como algo mais universal, enquanto postulado está relacionado a uma ciência ou teoria específica.

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\left(-i\hbar\int \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}dx\right) \tag{119}$$

$$= -i\hbar\frac{d}{dt}\left(\int \Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}dx\right) \tag{120}$$

$$= -\left[\int\left(i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\frac{\partial\Psi}{\partial x} + i\hbar\Psi^*\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right)\right)dx\right] \tag{121}$$

$$= \left[\int\left(\left(-i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right)\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi^*\frac{\partial}{\partial x}\left(i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)\right)dx\right] \tag{122}$$

Onde usamos a simetria das segundas derivadas[13] e usando agora a equação de Schrödinger (e o complexo conjugado dela)

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi \tag{123}$$

Temos:

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -\left[\int\left(i\hbar\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\frac{\partial\Psi}{\partial x} + i\hbar\Psi^*\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right)\right)dx\right] \tag{124}$$

$$= \int\left(\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2} + V\Psi^*\right)\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi^*\frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi\right)\right)dx \tag{125}$$

$$= \int\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\Psi}{\partial x} + V\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \frac{\hbar^2}{2m}\Psi^*\frac{\partial^3\Psi}{\partial x^3} - \Psi^*\frac{\partial}{\partial x}(V\Psi)\right)dx \tag{126}$$

$$= \int\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \Psi^*\frac{\partial^3\Psi}{\partial x^3}\right) + \left(V\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi^*\frac{\partial}{\partial x}(V\Psi)\right)\right]dx \tag{127}$$

$$= \int\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(-\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \Psi^*\frac{\partial^3\Psi}{\partial x^3}\right) + \left(V\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\Psi - \Psi^*V\frac{\partial}{\partial x}\Psi\right)\right]dx \tag{128}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\int\left(-\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \Psi^*\frac{\partial^3\Psi}{\partial x^3}\right)dx - \int\Psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\Psi dx \tag{129}$$

[13] $\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial f}{\partial y}\right) = \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial f}{\partial x}\right)$(prova).

Na primeira integral precisamos integrar por partes. Pegando a segunda integral fazendo $f = \Psi^*$ e $g = \partial^2\Psi/\partial x^2$ então:

$$\int_a^b f\frac{dg}{dx}dx = [fg]_a^b - \int_a^b \frac{df}{dx}gdx \tag{130}$$

$$\int \Psi^*\frac{\partial^3\Psi}{\partial x^3}dx = \left[\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right]_{-\infty}^{+\infty} - \int \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}dx \tag{131}$$

$$= -\int \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}dx \tag{132}$$

Então:

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{\hbar^2}{2m}\int\left(-\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}\right)dx - \int\Psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\Psi dx \tag{133}$$

Vamos aplicar a integral por partes novamente no segundo termo da primeira integral sendo agora $f = \partial\Psi^*/\partial x$ e $g = \partial\Psi/\partial x$

$$\int_a^b f\frac{dg}{dx}dx = [fg]_a^b - \int_a^b \frac{df}{dx}gdx \tag{134}$$

$$\int_a^b \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\frac{\partial\Psi^2}{\partial x^2}dx = \left[\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right]_a^b - \int_a^b \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\Psi}{\partial x}dx \tag{135}$$

$$= -\int_a^b \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\Psi}{\partial x}dx \tag{136}$$

Onde como no caso anterior, usamos a condição de que Ψ e suas derivadas vão a zero no infinito. Temos então:

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{\hbar^2}{2m}\int\left(-\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\frac{\partial\Psi}{\partial x}dx\right)dx - \int\Psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\Psi dx \tag{137}$$

$$= -\int\Psi^*\frac{\partial V}{\partial x}\Psi dxdx \tag{138}$$

E pela equação 116, então:

$$\langle Q(x,p)\rangle = \int \Psi^* \left[Q\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\right]\Psi dx \tag{139}$$

$$\left\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle = \int \Psi^* \left[-\frac{\partial V}{\partial x}\right]\Psi dx \tag{140}$$

Logo:

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle \tag{141}$$

Como queríamos demonstrar.

1.3 A relação da incerteza

Se pegarmos uma corda, temos duas situações extremas:

- Se a oscilamos periodicamente, temos claramente um comprimento de onda, mas não podemos determinar onde ela está localizada.
- Se enviamos apenas um pulso, podemos localizar o pulso, mas não podemos falar em comprimento de onda.

Casos intermediários apresentam uma situação de troca entre uma condição e outra. Isso se aplica a qualquer fenômeno ondulatório, inclusive à função de onda da mecânica quântica. Embora exista um teorema que pode ser demonstrado rigorosamente por meio da análise de Fourier, vamos nos concentrar aqui no argumento qualitativo. A fórmula de de Broglie[14] relaciona o momento da partícula à função de onda:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} \tag{142}$$

Temos, portanto, uma relação entre o momento e o comprimento de onda. Como essas grandezas são inversamente proporcionais, pode surgir a tendência de pensar que suas dispersões[15] também sejam inversamente proporcionais — mas isso é falso. A aproximação de primeira ordem para a propagação do erro de uma função $y = f(x)$, com uma única variável, é dada por(prova):

[14] Muitos autores tomam a fórmula de de Broglie como um axioma, a partir do qual deduzem a associação do momento com o operador $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$.

[15] Outro nome que a literatura usa para o desvio padrão σ_xé a dispersão, assim como se usa valor esperado para a média $\langle x\rangle$.

$$\sigma_y \approx \left|\frac{df}{dx}\right| \sigma_x \tag{143}$$

Ou seja:

$$\sigma_p \approx \left|-\frac{h}{\lambda^2}\right| \sigma_\lambda = \frac{h}{\lambda^2}\sigma_\lambda \tag{144}$$

Ou ainda:

$$\frac{\sigma_p}{p} \approx \frac{\sigma_\lambda}{\lambda} \tag{145}$$

Essa aproximação é suficiente para notarmos que chegamos a uma relação que expressa que a dispersão relativa de pé igual à dispersão relativa de λ. Assim, para um valor fixo de λ (e, consequentemente, um valor fixo de \($p = h/\lambda$), um aumento na dispersão σ_λ implica um aumento proporcional na dispersão σ_p, mesmo que os valores de p e λ sejam inversamente proporcionais. Quantitativamente o resultado que queremos é:

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{146}$$

Observação: A dispersão aqui se refere aos resultados obtidos em medições realizadas sobre sistemas identicamente preparados. Mesmo com a mesma preparação, os resultados não são necessariamente idênticos, mas se distribuem em torno de um valor médio.

Exemplo: Uma partícula de massa m com a seguinte função de onda

$$\Psi(x,t) = A \exp\left[-a\left(\frac{mx^2}{\hbar} + it\right)\right] \tag{147}$$

Onde A e a são constantes reais positivas.

a) Queremos encontrar A

b) Encontrar qual função de energia potencial, $V(x)$ esta é uma solução para equação de Schrodinger

c) Calcular os valores esperados x, x^2, p e p^2

d) Encontrar σ_x e σ_p e avaliar se o produto entre ambos é consistente com o princípio da incerteza

Vamos começar calculando A, Primeiro:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t) \tag{148}$$

$$= \left(A \exp\left[-a\left(\frac{mx^2}{\hbar} + it\right)\right]\right)\left(A \exp\left[-a\left(\frac{mx^2}{\hbar} + it\right)\right]\right) \tag{149}$$

$$= A^2 \exp\left[-\frac{2am}{\hbar}x^2\right] \tag{150}$$

Vamos substituir $u = \sqrt{\frac{2am}{\hbar}}x$ e $du = \sqrt{\frac{2am}{\hbar}}dx$ Integrando então:

$$\int |\Psi(x,t)|^2\,dx = \int A^2 \exp\left[-\frac{2amx^2}{\hbar}\right]dx \tag{151}$$

$$1 = A^2\sqrt{\frac{\hbar}{2am}}\int e^{-u^2}du \tag{152}$$

Essa é uma integral gaussiana de resultado bastante conhecido, mas vamos resolver uma vez (solução) pelo menos. Definimos então uma integral:

$$G = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2}dx \tag{153}$$

Então:

$$G^2 = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2}dx\right)^2 = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2}dx\right)\left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2}dx\right) \tag{154}$$

Ou como x é a variável de integração em cada uma das integrais, ou seja, apenas um rótulo, podemos substituir $x \to y$ na segunda, e ficamos então com:

$$G^2 = \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2}dx\right)\left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ay^2}dx\right) = \left(\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a\left(x^2+y^2\right)}dxdy\right) \tag{155}$$

Agora podemos fazer uma mudança no sistema de coordenadas, obviamente, mudando também o elemento de área. Usando o sistema de coordenadas polares (definição):

$$x = r\cos\theta \tag{156}$$
$$y = r\sin\theta \tag{157}$$
$$da = rdrd\theta \tag{158}$$

Para cobrir todo o espaço, nossos limites são $0 \leq r < \infty$ e $0 \leq \theta < 2\pi$.Substituindo:

$$G^2 = \left(\int_0^{2\pi}\int_0^{\infty} e^{-ar^2} rdrd\theta\right) \tag{159}$$
$$= \left(\int_0^{2\pi} d\theta\right)\left(\int_0^{\infty} e^{-ar^2} rdr\right) \tag{160}$$
$$= 2\pi\left(\int_0^{\infty} e^{-ar^2} rdr\right) \tag{161}$$

Substituindo $u = -ar^2$ então $\frac{du}{dr} = -a2r \rightarrow -\frac{du}{a} = 2rdr$ e os limites de integração agora são $u = -a0^2 = 0$ e $u = -ar\infty^2 = -\infty$

$$G^2 = \pi\left(\int_0^{-\infty} e^{-ar^2} 2rdr\right) \tag{162}$$
$$= -\frac{\pi}{a}\left(\int_0^{-\infty} e^u du\right) \tag{163}$$
$$= -\frac{\pi}{a}\left[e^u\right]_0^{-\infty} \tag{164}$$
$$= -\frac{\pi}{a}\left[\frac{1}{e^u} - e^0\right]_0^{-\infty} \tag{165}$$
$$= \frac{\pi}{a} \tag{166}$$

Logo se $G^2 = \pi/a$ então $G = \sqrt{\pi/a}$ e:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = G = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \tag{167}$$

Com isso podemos retomar e resolver nossa integral:

$$1 = A^2\sqrt{\frac{\hbar}{2am}}\int e^{-u^2}du \tag{168}$$

$$1 = A^2\sqrt{\frac{\hbar}{2am}}\sqrt{\pi} \tag{169}$$

$$\sqrt{\frac{2am}{\hbar\pi}} = A^2 \tag{170}$$

Ou então:

$$A = \left(\frac{2am}{\hbar\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \tag{171}$$

Agora queremos saber para qual potencial de energia $V(x)$ essa é uma solução pra equação de Schrödinger. Partindo da equação de Schrödinger:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi \tag{172}$$

E derivando a função de onda:

$$\Psi = A\exp\left[-a\left(\frac{mx^2}{\hbar} + it\right)\right] \tag{173}$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = A\exp\left[-\frac{amx^2}{\hbar}\right](-ai)\exp[-ait] = -ai\Psi \tag{174}$$

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x} = A\left[\left(-\frac{2amx}{\hbar}\right)\right]\exp\left[-\frac{amx^2}{\hbar}\right]\exp[-ait] = -\frac{2amx}{\hbar}\Psi \tag{175}$$

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x}\left(-\frac{2amx}{\hbar}\Psi\right) = -\frac{2am}{\hbar}\Psi + \left(\frac{2amx}{\hbar}\right)^2\Psi \tag{176}$$

Então:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi \tag{177}$$

$$V\Psi = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \tag{178}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m}\left[-\frac{2am}{\hbar}\Psi + \left(\frac{2amx}{\hbar}\right)^2\Psi\right] + i\hbar\left[-ai\Psi\right] \tag{179}$$

$$= -a\hbar\Psi + 2m\left(ax\right)^2\Psi + \hbar a\Psi \tag{180}$$

$$= \left[-a\hbar + 2m\left(ax\right)^2 + \hbar a\right]\Psi \tag{181}$$

$$\left[V\right]\Psi = \left[2m\left(ax\right)^2\right]\Psi \tag{182}$$

Então:

$$V = 2ma^2x^2 \tag{183}$$

Agora queremos calcular diversos valores esperados, vamos relembrar que já calculamos $\left|\Psi\left(x,t\right)\right|^2 = A^2\exp\left[-\frac{2am}{\hbar}x^2\right]$. Começando com $\langle x\rangle$:

$$\langle x\rangle = \int xA^2\exp\left[-\frac{2am}{\hbar}x^2\right]dx \tag{184}$$

Nesse caso, como o integrando é impar, isso é, se $G\left(x\right) = xA^2\exp\left[-\frac{2am}{\hbar}x^2\right]$, então

$$G\left(-x\right) = -G\left(x\right) \tag{185}$$

$$\left(-x\right)A^2\exp\left[-\frac{2am}{\hbar}\left(-x\right)^2\right] = -\left(xA^2\exp\left[-\frac{2am}{\hbar}x^2\right]\right) \tag{186}$$

$$-xA^2\exp\left[-\frac{2am}{\hbar}x^2\right] = -xA^2\exp\left[-\frac{2am}{\hbar}x^2\right] \tag{187}$$

Então simplesmente a integral é zero e temos $\langle x\rangle = 0$. Consequentemente se lembrarmos que $\langle p\rangle = m\frac{d\langle x\rangle}{dt}$, então $\langle p\rangle = 0$. Agora vamos calcular $\langle x^2\rangle$:

$$\left\langle x^2\right\rangle = A^2\int x^2\exp\left[-\frac{2am}{\hbar}x^2\right]dx \tag{188}$$

Escrevendo $\alpha = \frac{2am}{\hbar}$ então queremos resolver a integral:

$$I = \int x^2 e^{-\alpha x^2} dx \tag{189}$$

Fazendo integral por partes sendo $f = x$ e $g' = xe^{-\alpha x^2}$ precisamos resolver essa

$$g = \int xe^{-\alpha x^2} dx \tag{190}$$

Substituindo $u = -\alpha x^2$ então $-\frac{du}{2\alpha} = -xdx$

$$g = -\frac{1}{2\alpha} \int e^u du = -\frac{e^u}{2\alpha} = -\frac{e^{-\alpha x^2}}{2\alpha} \tag{191}$$

Evidentemente temos $f' = 1$ Então:

$$\int_a^b f \frac{dg}{dx} dx = [fg]_a^b - \int_a^b \frac{df}{dx} g dx \tag{192}$$

$$\int x \left(xe^{-\alpha x^2} \right) dx = \left[-\frac{xe^{-\alpha x^2}}{2\alpha} \right]_{-\infty}^{+\infty} + \frac{1}{2\alpha} \int e^{-\alpha x^2} dx \tag{193}$$

O primeiro termo vai a zero pois e^{-x^2}vai a zero ao infinito mais rapidamente que $\frac{1}{|x|}$ e a segunda integral é a gaussiana que a pouco vimos o resultado, então, lembrando que $\alpha = \frac{2am}{\hbar}$:

$$\int x \left(xe^{-\alpha x^2} \right) dx = \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(\frac{\hbar}{2am} \right)^{\frac{3}{2}} \tag{194}$$

E sendo $A = \left(\frac{2am}{\hbar \pi} \right)^{\frac{1}{4}}$ então:

$$\left\langle x^2 \right\rangle = A^2 \int x^2 \exp\left[-\frac{2am}{\hbar} x^2 \right] dx = \left(\frac{2am}{\hbar \pi} \right)^{\frac{2}{4}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(\frac{\hbar}{2am} \right)^{\frac{3}{2}} \tag{195}$$

Ou apenas:

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \frac{\hbar}{4am} \tag{196}$$

E por fim para calcular $\langle p^2 \rangle$ precisamos do operador p dado por $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$:

$$\left\langle p^2 \right\rangle = \int \Psi^* \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2 \Psi dx \tag{197}$$

Já calculamos anteriormente:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{2am}{\hbar}\Psi + \left(\frac{2amx}{\hbar}\right)^2 \Psi \tag{198}$$

Então:

$$\left\langle p^2 \right\rangle = \int \Psi^* \left(-i\hbar\right)^2 \left[-\frac{2am}{\hbar}\Psi + \left(\frac{2amx}{\hbar}\right)^2 \Psi\right] \Psi dx \tag{199}$$

$$= \int \Psi^* \left(-\hbar^2\right) \left[-\frac{2am}{\hbar}\Psi + \left(\frac{2amx}{\hbar}\right)^2 \Psi\right] \Psi dx \tag{200}$$

$$= \left(-\hbar^2\right) \left(-\frac{2am}{\hbar}\int \Psi^*\Psi dx + \left(\frac{2am}{\hbar}\right)^2 \int x^2\Psi^2\Psi dx\right) \tag{201}$$

$$= \hbar 2am \int \Psi^*\Psi dx - (2am)^2 \int x^2\Psi^2\Psi dx \tag{202}$$

Pela normalização sabemos que a primeira integral vale 1 e a segunda $\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{4am}$. Então:

$$\left\langle p^2 \right\rangle = 2\hbar am - (2am)^2 \frac{\hbar}{4am} \tag{203}$$

$$= 2\hbar am - \hbar am \tag{204}$$

Então $\langle p^2 \rangle = \hbar am$. Agora queremos a dispersão da posição e do momento, usando os valores médios calculados anteriormente:

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \qquad \sigma_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \tag{205}$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{4am} - 0} \qquad = \sqrt{\hbar am - 0} \tag{206}$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{4am}} \qquad = \sqrt{\hbar am} \tag{207}$$

Então:

$$\sigma_x \sigma_p = \sqrt{\frac{\hbar}{4am}} \sqrt{\hbar am} = \frac{\hbar}{2} \tag{208}$$

Este resultado é consistente com a relação de incerteza:

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{209}$$

2 Equação de Schrödinger independente do tempo

2.1 Estados estacionários

Vamos resolver a equação de Schrödinger para obter a função de onda para diferentes potenciais. Neste capítulo (a não ser que seja dito o contrário), assumiremos que $V = V(x)$ é real e independente do tempo. Dessa forma, podemos usar o método de separação de variáveis para resolver a equação e procurar soluções do tipo:

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \varphi(t) \tag{210}$$

Substituindo na equação de Schrödinger nós temos:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \tag{211}$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi\varphi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\psi\varphi) + V(\psi\varphi) \tag{212}$$

$$i\hbar\psi \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2 \varphi}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi\varphi \tag{213}$$

Dividindo então por $\psi\varphi$:

$$\frac{i\hbar\psi}{\psi\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2 \varphi}{\psi\varphi 2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{V\psi\varphi}{\psi\varphi} \tag{214}$$

$$\frac{i\hbar}{\varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{\psi 2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V \tag{215}$$

Então, um lado da equação depende apenas do tempo e o outro apenas da posição. A única forma de isso ser válido é se ambos forem iguais a uma constante, pois se temos $f(x) = f(y)$, isso significa que podemos variar x livremente enquanto y permanece fixo; portanto, $f(y)$ deve ser constante. A única forma de a igualdade ser válida para qualquer valor de x e y é se ambos forem iguais a uma constante, ou seja, $f(x) = f(y) = c$. Vamos identificar essa constante, por enquanto, como E. Temos então duas equações:

$$i\hbar\frac{1}{\varphi}\frac{\partial\varphi}{\partial t} = E \tag{216}$$

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\varphi \tag{217}$$

E

$$-\frac{\hbar^2}{\psi 2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V = E \tag{218}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi = E\psi \tag{219}$$

A equação 217 não depende do potencial:[16]

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar}\varphi \tag{220}$$

$$\int\frac{d\varphi}{\varphi} = -\frac{iE}{\hbar}\int dt \tag{221}$$

$$\log(\varphi) + C_0 = -\frac{iE}{\hbar}t - \frac{iE}{\hbar}C_1 \tag{222}$$

Onde por exemplo C_1é uma constante qualquer, então pode absorver os valores constantes $\frac{iE}{\hbar}C_1 \to C_1$ sem perca de generalidade. A mesma coisa $C_0 + C_1$. Então:

[16]Vale lembrar que usamos $\frac{\partial\Psi}{\partial t}$ pois $\Psi(x,t)$ depende de posição e tempo, mas $\varphi(t)$ depende apenas do tempo. Portanto, escrevemos $\frac{\partial\varphi}{\partial t}$ apenas por 'herança'. Poderíamos (e talvez deveríamos) denotar por $\frac{d\varphi}{dt}$.

$$\log(\varphi) = -\frac{iE}{\hbar}t + C \tag{223}$$

$$\exp[\log(\varphi)] = \exp\left[-\frac{iE}{\hbar}t + C\right] \tag{224}$$

$$\varphi = \exp\left[-\frac{iE}{\hbar}t\right] e^C \tag{225}$$

Da mesma forma e^C é uma constante qualquer de forma que podemos reescrever $e^C \to C$. Então:

$$\varphi = C\exp\left[-\frac{iE}{\hbar}t\right] \tag{226}$$

A segunda equação é a equação de Schrödinger independente do tempo e depende do potencial especificado. Então no resto do capítulo nos dedicaremos investigar uma variedade potenciais simples. Soluções dessa forma nos interessam por três motivos:

Em primeiro lugar, são estados estacionários. Escrevendo a solução como:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\, Ce^{-iEt/\hbar} \tag{227}$$

Fazendo $\psi(x)$ absorver C no fator de normalização a ser descoberto, ficamos apenas com:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\, e^{-iEt/\hbar} \tag{228}$$

Consequentemente a probabilidade de densidade é constante no tempo:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*\Psi = \left(\psi^*(x)\, e^{iEt/\hbar}\right)\left(\psi(x)\, e^{-iEt/\hbar}\right) = \psi^*\psi = |\psi(x)|^2 \tag{229}$$

Resultado análogo para os valores esperados:

$$\langle Q(x,p)\rangle = \int \Psi^*\left[Q\left(x, -i\hbar\frac{d}{dx}\right)\right]\Psi dx \tag{230}$$

$$= \int \psi^*(x)\, e^{iEt/\hbar}\left[Q\left(x, -i\hbar\frac{d}{dx}\right)\right]\psi(x)\, e^{-iEt/\hbar}dx \tag{231}$$

$$= \int \psi^*(x)\left[Q\left(x, -i\hbar\frac{d}{dx}\right)\right]\psi(x)\, dx \tag{232}$$

Consequentemente então o valor esperado é constante no tempo. Além disso, como $\langle x\rangle = \int x\,|\psi|^2\,dx$ é uma integral definida na posição, e que depende só da posição, constante no tempo, consequentemente $\langle p\rangle = md\,\langle x\rangle\,/dt = 0$.

Em segundo lugar os estados são estados de energia total definida. Na mecânica clássica, a energia total é a soma da energia cinética mais a potencial, e é chamado de hamiltoniano[17]:

$$H\,(x,p) = \frac{p^2}{2m} + V\,(x) \tag{233}$$

Fazendo então a substituição $p \to i\hbar\,(\partial/\partial x)$ temos:

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\,(x) \tag{234}$$

Então a equação de Schrödinger independente do tempo pode escrita como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi = E\psi \tag{235}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V\right)\psi = E\psi \tag{236}$$

$$\widehat{H}\psi = E\psi \tag{237}$$

Além disso temos que se aplicarmos $\widehat{H}$ novamente:

$$\widehat{H}^2\psi = \widehat{H}\left(\widehat{H}\psi\right) = \widehat{H}\,(E\psi) = E\left(\widehat{H}\psi\right) = E^2\psi \tag{238}$$

Então temos pro valor esperado:

$$\langle H\rangle = \int \psi^*\widehat{H}\psi dx = \int \psi^* E\psi dx = E\int \psi^*\psi dx = E\int |\psi|^2\,dx = E\int |\Psi|^2\,dx = E \tag{239}$$

Uma vez que como já vimos $|\Psi|^2 = |\psi|^2$, ou seja, a normalização de Ψ está contida em ψ. Também temos de forma análoga:

[17] Acredito ter estudado isso no livro “Mecânica Analítica” do Nivaldo A. Lemos.

$$\left\langle H^2 \right\rangle = \int \psi^* \widehat{H}^2 \psi dx = E^2 \int \psi^* \psi dx = E^2 \int \left| \Psi \right|^2 dx = E^2 \tag{240}$$

E a variância é dada por:

$$\sigma_H^2 = \left\langle H^2 \right\rangle - \left\langle H^2 \right\rangle = E^2 - E^2 = 0 \tag{241}$$

Ou seja, temos zero dispersão. O que nos garante que temos certeza do valor que será retornado, sempre que medimos a energia total, iremos obter E.

E o terceiro motivo, matemático, é que a solução geral é uma combinação linear

E o terceiro motivo, matemático, é que a solução geral é uma combinação linear[18] de soluções separáveis, como veremos. Se denotamos o conjunto de soluções separáveis como $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n$ ou apenas $\{\psi_n\}$, cada uma delas está associada a uma constante $E_1, E_2, \ldots, E_n$ ou $\{E_n\}$, de forma que temos uma função de onda pra cada energia permitida:

$$\Psi_1 (x, t) = \psi_1 (x) e^{-iE_1 t/\hbar} \tag{242}$$

$$\Psi_2 (x, t) = \psi_2 (x) e^{-iE_2 t/\hbar} \tag{243}$$

$$\vdots \tag{244}$$

$$\Psi_n (x, t) = \psi_n (x) e^{-iE_n t/\hbar} \tag{245}$$

Então temos uma solução geral dada por:

$$\Psi (x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n (x) e^{-iE_n t/\hbar} \tag{246}$$

Ou ainda:

$$\Psi (x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n (x, t) \tag{247}$$

[18]Uma combinação linear é uma expressão construída a partir de um conjunto de funções, multiplicando cada uma por uma constante e somando os resultados. Por exemplo, uma combinação linear de $f_1(x)$ e $f_2(x)$ é dada por: $f(x) = c_1 f_1(x) + c_2 f_2(x)$.

O que faremos no restante do capítulo é encontrar c_ne ψ_n para diferentes situações (e vale ressaltar que as condições iniciais nem sequer precisam ser contínuas). e no próximo capítulo reescrever este resultado de uma forma mais elegante.

Exemplo: Supondo uma partícula que nos é dado o estado inicial

$$\Psi\left(x,0\right)=c_1\psi_1\left(x\right)+c_2\psi_2\left(x\right) \tag{248}$$

Assumindo que as funções e as constantes são reais, queremos saber qual é a função de onda de $\Psi\left(x,t\right)$ nos tempos seguintes, encontrar a densidade de probabilidade e descrever seu movimento.

Isso é bastante direto, pois é apenas:

$$\begin{aligned}\Psi\left(x,t\right)&=\sum_{n=1}^{\infty}c_n\psi_n\left(x\right)e^{-iE_nt/\hbar} &(249)\\ &=\sum_{n=1}^{2}c_n\psi_n\left(x\right)e^{-iE_nt/\hbar} &(250)\end{aligned}$$

Já que para $n>2$ temos $c_n\psi_n=0$. Ou então:

$$\Psi\left(x,t\right)=c_1\psi_1\left(x\right)e^{-iE_1t/\hbar}+c_2\psi_2\left(x\right)e^{-iE_2t/\hbar} \tag{251}$$

A densidade de probabilidade é então:

$$\begin{aligned}\left|\Psi\left(x,t\right)\right|^2&=\left(c_1\psi_1e^{iE_1t/\hbar}+c_2\psi_2e^{E_2t/\hbar}\right)\left(c_1\psi_1e^{-iE_1t/\hbar}+c_2\psi_2e^{-iE_2t/\hbar}\right) &(252)\\ &=c_1^2\psi_1^2+c_2^2\psi_2^2+2c_1c_2\psi_1\psi_2\exp\left[iE_1t/\hbar-iE_2t/\hbar\right] &(253)\\ &=c_1^2\psi_1^2+c_2^2\psi_2^2+c_1c_2\psi_1\psi_2\exp\left[\left(E_1-E_2\right)t/\hbar\right]+c_1c_2\psi_1\psi_2\exp\left[\left(E_2-E_1\right)t/\hbar\right] &(254)\\ &=c_1^2\psi_1^2+c_2^2\psi_2^2+c_1c_2\psi_1\psi_2\left(\exp\left[\left(E_1-E_2\right)t/\hbar\right]+\exp\left[\left(E_2-E_1\right)t/\hbar\right]\right) &(255)\end{aligned}$$

Sendo a fórmula de Euler:

$$e^{i\theta} = \cos\theta + i\sin\theta \tag{256}$$

$$e^{(E_1-E_2)t/\hbar} + e^{(E_2-E_1)t/\hbar} = \cos\left[\frac{(E_1-E_2)\,t}{\hbar}\right] + i\sin\left[\frac{(E_1-E_2)\,t}{\hbar}\right]\dots \tag{257}$$

$$\dots + \cos\left[\frac{(E_2-E_1)\,t}{\hbar}\right] + i\sin\left[\frac{(E_2-E_1)\,t}{\hbar}\right] \tag{258}$$

$$= \cos\left[\frac{(E_1-E_2)\,t}{\hbar}\right] + i\sin\left[\frac{(E_1-E_2)\,t}{\hbar}\right]\dots \tag{259}$$

$$\dots + \cos\left[-\frac{(E_1-E_2)\,t}{\hbar}\right] + i\sin\left[-\frac{(E_1-E_2)\,t}{\hbar}\right] \tag{260}$$

$$= \cos\left[\frac{(E_1-E_2)\,t}{\hbar}\right] + i\sin\left[\frac{(E_1-E_2)\,t}{\hbar}\right]\dots \tag{261}$$

$$\dots + \cos\left[\frac{(E_1-E_2)\,t}{\hbar}\right] - i\sin\left[-\frac{(E_1-E_2)\,t}{\hbar}\right] \tag{262}$$

$$= 2\cos\left[\frac{(E_1-E_2)\,t}{\hbar}\right] \tag{263}$$

Então:

$$\left|\Psi(x,t)\right|^2 = c_1^2\psi_1^2 + c_2^2\psi_2^2 + 2c_1c_2\psi_1\psi_2\cos\left[\frac{(E_1-E_2)\,t}{\hbar}\right] \tag{264}$$

Ou seja, devido ao termo oscilatório, podemos dizer que ela não está em um estado estacionário, mas oscila entre os dois estados. Claro que isto não diz respeito à trajetória no sentido clássico, mas à probabilidade de encontrarmos a partícula em diferentes regiões do espaço. O significado físico do conjunto $\{c_n\}$, isto é, o que ele representa fisicamente, é que $|c_n|^2$ é a probabilidade de que a medida da energia retorne o valor E_n. A explicação disso fica para o próximo capítulo. Ainda vale comentar que existe uma tendência errada de dizer que você vai medir a partícula no estado ψ_n, mas essa é uma linguagem incorreta. O que obtemos quando fazemos uma medida é um observável, um número; obtemos E_n, e não uma função.

–

Ou seja, uma medida da energia sempre vai retornar um dos valores possíveis, e $|c_n|^2$ é a probabilidade de obtermos o valor E_n em particular. De forma que é óbvio que:

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1 \tag{265}$$

Dessa forma também podemos escrever que:

$$\langle H \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_n |c_n|^2 \tag{266}$$

Uma vez que, como vimos, o valor médio de j, se a probabilidade de obtermos j é escrita por $P(j)$, é dada por $\langle j \rangle = \sum_j jP(j)$. Vale lembrar que, anteriormente, vimos que uma solução separável $\psi_n(x)$ sempre retorna E_n se medirmos a energia. Porém, o que temos agora é que $\Psi(x,t)$ é uma é uma superposição de várias soluções separáveis, onde temos a probabilidade dada por $|c_n|^2$ de medirmos uma energia E_n associada à solução separável $\psi_n(x)$.

Também vale destacar que tudo isso é independente do tempo, desde as probabilidades de obter determinada energia até, consequentemente, os valores esperados de $\widehat{H}$. Essas são manifestações da conservação de energia.

Exemplo: Prove os seguintes teoremas: a) Para uma solução normalizável, então E deve ser real.

b) A função de onda independente do tempo $\psi(x)$ sempre pode ser considerado real. Ou seja, sempre podemos expressar $\psi(x)$ como uma combinação linear de soluções reais.

c) $V(x)$ é uma função par então ψ pode ser uma função par ou ímpar.

Vamos escrever $E = E_0 + i\Gamma$, onde E_0 e Γ são reais, conforme sugerido. Logo:

$$\Psi(x,t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar} = \psi(x) e^{-i(E_0+i\Gamma)t/\hbar} = \psi(x) e^{-iE_0t/\hbar} e^{\Gamma t/\hbar} \tag{267}$$

Então:

$$|\Psi(x,t)|^2 = e^{2\Gamma t/\hbar} |\psi(x)|^2 \tag{268}$$

Mas então:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{2\Gamma t/\hbar} |\psi(x)|^2 \, dx = e^{2\Gamma t/\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \, dx = e^{2\Gamma t/\hbar} \tag{269}$$

Porém se é normalizável, precisamos que $\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 \, dx = 1$. Colocado dessa forma, isso é válido para $t = 0$, mas a única forma então garantirmos que a função de onda permanece normalizada todo o tempo é se $\Gamma = 0$. Logo E precisa ser real.

O segundo teorema que queremos provar, é que $\psi(x)$ sempre pode ser considerado real. Vamos partir da equação de Schrödinger inependente do tempo. Se ψ_1 e ψ_2 são soluções, qualquer combinação linear $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ também é uma solução.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = E\psi \tag{270}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) + V(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = \tag{271}$$

$$c_1\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_1 + V\psi_1\right] + c_2\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi_2 + V\psi_2\right] = \tag{272}$$

$$c_1E\psi_1 + c_2E\psi_2 = \tag{273}$$

$$E(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = \tag{274}$$

$$E\psi = \tag{275}$$

Então só precisamos mostrar que uma função de onda qualquer ψ , mesmo que seja complexa, pode ser escrita como uma soma de funções reais ψ_1 e ψ_2 multiplicando por constantes c_1 e c_2. Primeiro queremos escrever então

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 = \mathrm{Re}(\psi) + i\mathrm{Im}(\psi) \tag{276}$$

Então se $c_1 = 1$, $c_2 = i$ e ψ_1 e ψ_2 são a parte real e imaginária de ψ, então esta também é uma solução válida pra equação de Schoedinger e podemos escrever ψ como uma combinação linear de funções reais ψ_1 e ψ_2. Temos:

$$\psi = \mathrm{Re}(\psi) + i\mathrm{Im}(\psi) \tag{277}$$

$$\psi^* = \mathrm{Re}(\psi) - i\mathrm{Im}(\psi) \tag{278}$$

Se somamos então:

$$\psi + \psi^* = [\mathrm{Re}\,(\psi) + i\mathrm{Im}\,(\psi)] + [\mathrm{Re}\,(\psi) - i\mathrm{Im}\,(\psi)] \tag{279}$$
$$\psi + \psi^* = 2\mathrm{Re}\,(\psi) \tag{280}$$
$$\frac{\psi + \psi^*}{2} = \mathrm{Re}\,(\psi) \tag{281}$$

E subtraindo:

$$\psi - \psi^* = [\mathrm{Re}\,(\psi) + i\mathrm{Im}\,(\psi)] - [\mathrm{Re}\,(\psi) - i\mathrm{Im}\,(\psi)] \tag{282}$$
$$\psi - \psi^* = 2\mathrm{Im}\,(\psi) \tag{283}$$
$$\frac{\psi - \psi^*}{2} = 2\mathrm{Im}\,(\psi) \tag{284}$$

Então:

$$\psi = \mathrm{Re}\,(\psi) + i\mathrm{Im}\,(\psi) \tag{285}$$
$$= \frac{1}{2}\,(\psi + \psi^*) + \frac{i}{2}\,(\psi - \psi^*) \tag{286}$$

De certa forma, agora só queremos garantir que ψ^* também seja uma solução. Mas se:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = E\psi \tag{287}$$

Logo se tomamos o complexo conjugado, sendo Ve E reais: [19]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} + V\psi^* = E\psi^* \tag{288}$$

Então, se escrevemos $\psi_1 = \psi + \psi^*$, como ψ e ψ^* são soluções, então ψ_1 também é. Essa é uma função real que representa a parte real de ψ. Da

[19]Já provamos que E deve ser real, $V\,(x)$ deve ser real para garantir que $\widehat{H}$ seja hermitiano, pelo menos quando estamos nessa discussão onde ψ e V dependem apenas da posição e temos uma separação de variáveis de modo que E é a constante de separação.

Em uma representação matricial, a matriz é hermitiana se ela é igual à sua transposta conjugada. Por hora, estamos assumindo implicitamente que o Hamiltoniano é hermitiano para garantir que seus autovalores E sejam reais.

mesma forma, $\psi_2 = \psi - \psi^*$ também é uma função real que representa a parte imaginária de ψ e também é solução. Por consequência, $\psi = \frac{1}{2}\psi_1 + \frac{i}{2}\psi_2$ necessariamente também é uma solução, onde escrevemos a função complexa ψ como uma combinação linear das funções reais ψ_1 e ψ_2.

E o terceiro teorema diz que se $V(x)$ é uma função par $(V(-x) = V(x))$ então ψ pode ser uma função par $\psi(-x) = \psi(x)$ ou ímpar $\psi(-x) = -\psi(x)$. Vamos começar construindo uma função par de $\psi(x)$, isto é, que elimina a parte ímpar:

$$\psi_+(x) \equiv \psi(x) + \psi(-x) \tag{289}$$

Podemos pensar por exemplo se

$$f(x) = x + x^2 \tag{290}$$

Então:

$$\begin{align} f_+(x) &= f(x) + f(-x) \tag{291} \\ &= \left(x + x^2\right) + \left(-x + (-x)^2\right) \tag{292} \\ &= x + x^2 - x + x^2 \tag{293} \\ &= 2x^2 \tag{294} \end{align}$$

Ou seja, eliminamos a parte ímpar da função e ficamos com a parte par duplicada, mas a função resultante é simétrica. De forma análoga, podemos remover a parte par com:

$$\psi_+(x) \equiv \psi(x) - \psi(-x) \tag{295}$$

Usando o mesmo exemplo:

$$f_+(x) = f(x) - f(-x) = \left(x + x^2\right) - \left(-x + x^2\right) = 2x \tag{296}$$

Então podemos escrever a função de onda como uma combinação linear de funções pares e ímpares

$$\psi = \frac{1}{2}\left(\psi_+(x) + \psi_-(x)\right) \tag{297}$$

Ou:

$$\psi = \frac{1}{2}\left(\psi_+ (x) + \psi_- (x)\right) \tag{298}$$

Nós já vimos que uma combinação linear das soluções também é uma solução. Agora só nos resta ver que $\psi(-x)$ também é solução. temos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(-x)}{\partial x^2} + V(-x)\psi(-x) = E\psi(-x) \tag{299}$$

Se é par, temos simplesmente:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \tag{300}$$

E se é ímpar:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} - V(x)\psi(x) = -E\psi(x) \tag{301}$$

Basta multiplicarmos por (-1) para retomar a equação original[20].

Exemplo: Mostre que E deve exceder o valor mínimo de $V(x)$ pra qualquer solução normalizável da equação de Schrödinger independente do tempo e qual é o análogo clássico desta declaração? Partindo da equação de Schrödinger independente do tempo, temos:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = (V(x) - E)\,\psi(x)$$

Isso implica que o sinal da segunda derivada de ψ deve ser o mesmo do sinal de $(V(x) - E)\,\psi(x)$. Para analisar, precisamos lembrar o significado das derivadas:

- A primeira derivada indica se uma função $f(t)$ está aumentando ($f' > 0$) ou diminuindo ($f' < 0$), ou se está em um ponto crítico ($f' = 0$).
- A segunda derivada indica se a primeira derivada está aumentando ($f'' > 0$) ou diminuindo ($f'' < 0$).

Uma boa analogia é a de um carro:

[20] Honestamente eu não entendi exatamente o que o enunciado pediu, mas espero estar respondido.

- $x(t)$ indica a posição do carro em relação a um ponto de referência (origem).

- A primeira derivada $x'(t) = v(t)$ é a velocidade, indicando se o carro se move para a direita ($v > 0$) ou para a esquerda ($v < 0$).

- A segunda derivada $x''(t) = a(t)$ é a aceleração.

Se $E < V_{\text{min}}$, então $V(x) - E > 0$ para todo x, e a equação indica que o sinal da segunda derivada da função de onda $\psi(x)$ é o mesmo da função $\psi(x)$ em si. Na analogia, se o carro está em uma posição positiva (à direita da origem), a aceleração será sempre positiva, isto é se $\psi(x)$ é positivo e sua segunda derivada é positiva, isso implica que $\psi(x)$ tende a crescer sem limites, indo para o infinito quando $x \to \infty$.

Analogamente, um carro em uma posição positiva com velocidade positiva e aceleração positiva jamais retornaria à origem, ele aceleraria cada vez mais para longe, o que não é permitido para uma função de onda normalizável, pois ela deve tender a zero no infinito. Se a velocidade for negativa, a aceleração positiva vai forçar uma mudança no sinal da velocidade levando ao mesmo caso anterior onde o carro termina por ir para o infinito. Se antes do sinal da velocidade se inverter, o carro passar pela origem, então agora a aceleração negativa combinado com a velocidade negativa moverá o carro para o infinito pelo sentido negativo.

Portanto, se $E < V_{\text{min}}$, não existem soluções normalizáveis para a equação de Schrödinger, pois a função de onda diverge em algum limite. A analogia clássica deste resultado é que a energia total de uma partícula nunca pode ser menor do que sua energia potencial mínima.

2.2 Poço quadrado infinito

Nosso potencial agora é:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{outro caso} \end{cases} \tag{302}$$

A partícula é livre entre dois extremos onde uma força infinita previne que ela escape. Fora do poço temos $\psi(x) = 0$, e dentro temos $V = 0$. Então a equação de Schrödinger é apenas:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V\psi=E\psi \tag{303}$$
$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-\frac{2mE}{\hbar^2}\psi \tag{304}$$
$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}=-k^2\psi \tag{305}$$

Essa é uma equação de um oscilador harmônico simples com uma solução geral do tipo:

$$\psi\left(x\right)=A\sin\left(kx\right)+B\cos k\left(x\right) \tag{306}$$

Pois:

$$\frac{d\psi\left(x\right)}{dx}=kA\cos\left(kx\right)-kB\sin k\left(x\right) \tag{307}$$
$$\frac{d^2\psi\left(x\right)}{dx}=-k^2A\sin\left(kx\right)-k^2B\cos k\left(x\right) \tag{308}$$

Ou então:

$$\frac{d^2\psi\left(x\right)}{dx}=-k^2\left(A\sin\left(kx\right)+B\cos k\left(x\right)\right)=-k^2\psi\left(x\right) \tag{309}$$

Queremos agora achar A e B através das condições de contorno. Temos que:

$$\psi\left(0\right)=\psi\left(a\right)=0 \tag{310}$$

Tipicamente $\psi(x)$ é contínuo (ainda que $\Psi\left(x,t\right)$ não precise ser), então a continuidade exige que:

$$\psi\left(0\right)=A\sin\left(0\right)+B\cos k\left(0\right) \tag{311}$$
$$0=B \tag{312}$$

Então temos:

$$\psi\left(x\right)=A\sin\left(kx\right) \tag{313}$$

A outra condição de contorno é:

$$\psi(a) = A\sin(ka) = 0 \tag{314}$$

Como $A = 0$ seria uma solução trivial, não é interessante, assim como $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = 0$ não é interessante também pelo mesmo motivo. Então precisamos que ka seja um múltiplo de π, ou seja:

$$ka = n\pi \rightarrow k_n = \frac{n\pi}{a} \tag{315}$$

Onde usamos k_n pra indicar que na verdade há diferentes valores possíveis de k para cada $n = 1, 2, 3, \ldots$ Então: os valores permitidos de E_n podem ser:

$$k_n = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} \tag{316}$$

$$k_n^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2} \tag{317}$$

$$\frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = E_n \tag{318}$$

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m} \tag{319}$$

Mas ainda não obtemos A. Para obter A normalizamos então:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dx = \int_0^a (A\sin(kx))^* (A\sin(kx))\, dx \tag{320}$$

$$= |A|^2 \int_0^a \sin^2(kx)\, dx \tag{321}$$

Vamos usar a identidade trigonométrica $2\sin^2(x) = 1 - \cos(2x)$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dx = \frac{|A|^2}{2} \int_0^a (1 - \cos(2kx))\, dx \tag{322}$$

$$= \frac{|A|^2}{2} \left[\int_0^a dx - \int_0^a \cos(2kx)\, dx\right] \tag{323}$$

e substitui $u = 2kx$ (Os novos limites são 0 e $2ka$), e $\frac{du}{dx} = 2k$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dx = \frac{|A|^2}{2} \left[a - \frac{1}{2k} \int_0^{2ka} \cos(u)\, du \right] \tag{324}$$

$$= \frac{|A|^2}{2} \left[a - \frac{1}{2k} \left[\sin(u) \right]_0^{2ka} \right] \tag{325}$$

$$= \frac{|A|^2}{2} \left[a - \frac{1}{2k} \left[\sin(2ka) - \sin(0) \right] \right] \tag{326}$$

$$= \frac{|A|^2}{2} \left[a - \frac{\sin(2ka)}{2k} \right] \tag{327}$$

Substituindo $k = \frac{n\pi}{a}$ então o argumento do seno é:

$$2ka = n\frac{2\pi a}{a} = n2\pi \tag{328}$$

Como independente do n temos sempre o mesmo ângulo $n2\pi \to 2\pi$ e $\sin(2\pi) = 0$ então:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dx = \frac{a\, |A|^2}{2} = 1 \tag{329}$$

Então $|A|^2 = 2/a$. Só temos a magnitude de A, mas o mais fácil é pegar a raiz positiva real, a fase de A não importa, como já vimos), temos então $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$, logo as soluções no interior do poço são:

$$\psi_n(x) = A \sin(k_n x) \tag{330}$$

$$= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x \right) \tag{331}$$

O conjunto de soluções tem algumas propriedades interessantes. Em primeiro lugar, elas são alternativamente par e ímpar em respeito ao centro. Se o centro é em $\frac{a}{2}$ e .deslocarmos o centro pra origem:

$$\psi_n\left(x - \frac{a}{2} \right) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} \left[x - \frac{a}{2} \right] \right) \tag{332}$$

$$= \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x - \frac{n\pi}{2} \right) \tag{333}$$

Usando a propriedade trigonométrica $\sin(a-b) = \sin a \cos b - \cos a \sin b$

$$\psi_n\left(x - \frac{a}{2}\right) = \sqrt{\frac{2}{a}}\left[\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) - \cos\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)\right] \tag{334}$$

$$= \tag{335}$$

Sempre que n for par, temos $\sin(n\pi/2) = 0$ e resta apenas o primeiro termo. Sempre que n for ímpar temos $\cos(n\pi/2) = 0$ e resta apenas o segundo termo. Ou seja, sempre que n for par, temos apenas uma função seno e temos uma solução ímpar então em relação ao centro. Quando n for ímpar, temos então apenas uma função cosseno e temos uma função par em relação ao centro.

Em segundo lugar, também temos que pra cada vez que aumentamos o estado de energia, temos mais um nó, ou seja um ponto onde a função de onda atravessa o eixo. Para $n = 1$ a função de onda apenas chega em zero nos extremos. Para $n = 2$ ela cruza uma vez o eixo, etc... A terceira característica é que as soluções são mutuamente ortogonais. No sentido:

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x)\, dx = 0 \tag{336}$$

para $m \neq n$. Interessante notar que evidentemente se $m = n$ então temos apenas

$$\int \psi(x)^* \psi(x)\, dx = \int |\psi(x)|^2\, dx = 1 \tag{337}$$

Ou seja:

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x)\, dx = \delta_{mn} \tag{338}$$

de forma geral, ou seja, são ortonormais. Onde δ_{mn} é a delta de Kronecker:

$$\delta_{mn} = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 1, & m = n \end{cases} \tag{339}$$

Exemplo: Prove a ortogonalidade da função de onda $\psi_n(x)$. Podemos provar a ortogonalidade:

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x)\, dx = \int \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right)\right)^* \left(\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\right) dx \quad (340)$$

$$= \frac{2}{a}\int \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \quad (341)$$

Vamos usar outra propriedade trigonométrica agora:

$$\cos(a \pm b) = \cos a \cos b \mp \sin a \sin b \quad (342)$$

Então:

$$\cos(a-b) - \cos(a+b) = (\cos a \cos b + \sin a \sin b) - (\cos a \cos b - \sin a \sin b) \quad (343)$$

$$= 2 \sin a \sin b \quad (344)$$

Então:

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x)\, dx = \frac{1}{a}\int \left[\cos\left(\frac{m\pi}{a}x - \frac{n\pi}{a}x\right) - \cos\left(\frac{m\pi}{a}x + \frac{n\pi}{a}x\right)\right] dx \quad (345)$$

$$= \frac{1}{a}\int \left[\cos\left((m-n)\frac{\pi x}{a}\right) - \cos\left((m+n)\frac{\pi x}{a}\right)\right] dx \quad (346)$$

Substituindo $u = \frac{\alpha_\pm \pi x}{a}$ onde $\alpha_- = m - n$ para a primeira integral e $\alpha_+ = m + n$ para a segunda, então lembrando que estamos integrando entre 0 e a, então agora os novos limites são 0 e $\alpha_\pm \pi \frac{a}{a} = \alpha_\pm \pi$, além de que $\frac{du}{dx} = \frac{\alpha_\pm \pi}{a}$ ou seja $\frac{a}{\alpha_\pm \pi} du = dx$

$$\int_0^a \cos\left(\frac{\alpha_\pm \pi x}{a}\right) dx = \frac{a}{\alpha_\pm \pi}\int_0^{\alpha_\pm \pi} \cos(u)\, du \quad (347)$$

$$= \frac{a}{\alpha_\pm \pi}\left[\sin(u)\right]_0^{\alpha_\pm \pi} \quad (348)$$

$$= \frac{a}{\alpha_\pm \pi}\left[\sin(\alpha_\pm \pi) - \sin(0)\right] \quad (349)$$

$$= \frac{a \sin(\alpha_\pm \pi)}{\alpha_\pm \pi} \quad (350)$$

Então:

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x)\, dx = \frac{1}{a}\int \left[\cos\left((m-n)\frac{\pi x}{a}\right) - \cos\left((m+n)\frac{\pi x}{a}\right)\right] dx \tag{351}$$

$$= \frac{1}{a}\left(\frac{a\sin(\alpha_-\pi)}{\alpha_-\pi} - \frac{a\sin(\alpha_+\pi)}{\alpha_+\pi}\right) \tag{352}$$

$$= \frac{1}{\pi}\left(\frac{\sin((m-n)\pi)}{(m-n)} - \frac{\sin((m+n)\pi)}{(m+n)}\right) \tag{353}$$

Como m e n são inteiros e diferentes, então $m \pm n = l$ vai ser inteiro. E qualquer inteiro que seja $\sin(l\pi)$ para qualquer valor de l inteiro, então $\sin(l\pi) = 0$. De forma que:

$$\int \psi_m(x)^* \psi_n(x)\, dx = 0 \tag{354}$$

E a quarta e última característica que queremos destacar é que o conjunto de soluções é dito também completo no sentido de que qualquer outra função $f(x)$ pode ser expressa como uma combinação linear da seguinte forma:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \tag{355}$$

Não vamos provar aqui, mas esta é basicamente a série de Fourier para $f(x)$, e o fato de qualquer função poder ser expandido dessa forma é chamado de teorema de Dirichlet. Os coeficientes c_n podem ser avaliados para uma dada função $f(x)$ por um método chamado truque de Fourier. Multiplicando ambos os lados por ψ^* e integrando :

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n \tag{356}$$

$$\int \psi_m^* f(x)\, dx = \int \psi_m^* \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n dx \tag{357}$$

$$\int \psi_m^* f(x)\, dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \left(\int \psi_m^* \psi_n dx \right) \tag{358}$$

$$\int \psi_m^* f(x)\, dx = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \delta_{mn} \tag{359}$$

$$\int \psi_m^* f(x)\, dx = c_m \tag{360}$$

Ou como são apenas rótulos sem significados , podemos mudar os termos $m \to n$ e obter na forma mais conhecida:

$$\int \psi_n^* f(x)\, dx = c_n \tag{361}$$

Essas propriedades não se restringem ao problema do poço quadrado infinito.

- A primeira é verdade sempre que o potencial for uma função simétrica.
- A segunda é verdade independente do formato do potencial.
- Ortogonalidade é uma propriedade geral para qualquer potencial que estamos trabalhando onde o hamiltoniano é hermitiano.
- Completeza , segundo Griffiths vale “para todos potenciais que provavelmente vamos encontrar”, apesar da sua prova ser chata e trabalhosa, por isso ele supõe que a maioria dos físicos assume isso e torce pelo melhor. Uma vez que o Griffhits não se propôs a demonstrar isso, e é uma questão mais matemática que física, vamos seguir o mesmo procedimento por hora e confiar nos matemáticos.

Uma solução então da equação de Schrödinger pode ser dada por:

$$\Psi_n(t) = \psi_n(x)\varphi_n(t) \tag{362}$$
$$= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)e^{-iE_nt/\hbar} \tag{363}$$
$$= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\exp\left[-\frac{in^2\pi^2h^2t}{2ma^2\hbar}\right] \tag{364}$$
$$= \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\exp\left[-\frac{in^2\pi^2ht}{2ma^2}\right] \tag{365}$$

E a solução mais geral é então:

$$\Psi(x.t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\Psi_n(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\psi_n(x)\varphi_n(t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\exp\left[-\frac{in^2\pi^2ht}{2ma^2}\right] \tag{366}$$

Resta então apenas demonstrar que sempre podemos expressar a condição inicial $\Psi(x,0)$ utilizando uma escolha apropriada de coeficientes c_n. Então a completude dos ψ (que é confirmado pelo teorema de Dirichlet) é que me garante que podemos fazer isso e a ortonormalidade nos permite usar o truque de Fourier para determinar os coeficiente da seguinte forma:

$$c_n = \int \psi_n^* f(x)\,dx = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\Psi(x,0)\,dx \tag{367}$$

Poderíamos facilmente reescrever tudo de forma que c_n absorva $\sqrt{2/a}$, escrevendo por exemplo $a_n = \sqrt{2/a}c_n$e consequentemente também $\psi' = \sqrt{a/2}\psi$, mas é apenas uma manipulação matemática.

Exemplo: Uma partícula no potencial quadrado infinito possui a seguinte função de onda inicial

$$\Psi(x,0) = Ax(a-x) \tag{368}$$

Queremos achar a $\Psi(x,t)$.

Precisamos começar achando a constante de normalização

$$\int_0^a |\Psi(x,0)|^2 \, dx = \int_0^a A^2 x^2 (a-x)^2 \, dx \tag{369}$$

$$1 = A^2 \int x^2 \left(a^2 - 2ax + x^2\right) dx \tag{370}$$

$$= A^2 \left(a^2 \int_0^a x^2 dx - 2a \int_0^a x^3 dx + \int_0^a x^4 dx \right) \tag{371}$$

$$= A^2 \left(a^2 \frac{x^3}{3} - 2a \frac{x^4}{4} + \frac{x^5}{5} \right)_0^a \tag{372}$$

$$= A^2 \left(a^2 \frac{a^3}{3} - 2a \frac{5a^4}{4 \cdot 5} + \frac{4a^5}{4 \cdot 5} \right) \tag{373}$$

$$= A^2 a^5 \left(\frac{1}{3} + \frac{4-10}{20} \right) \tag{374}$$

$$= A^2 a^5 \left(\frac{20}{3 \cdot 20} - \frac{3 \cdot 6}{20 \cdot 3} \right) \tag{375}$$

$$1 = A^2 a^5 \frac{2}{60} \tag{376}$$

Então:

$$A^2 = \frac{60}{2a^5} \rightarrow A = \sqrt{\frac{30}{a^5}} \tag{377}$$

E então o coeficiente da equação é dado por:

$$
\begin{aligned}
c_n &= \int \psi_n^* f(x)\,dx && (378)\\
&= \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \Psi(x,0)\,dx && (379)\\
&= \sqrt{\frac{30}{a^5}} \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) x(a-x)\,dx && (380)\\
&= \sqrt{\frac{60}{a^6}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \left(xa - x^2\right) dx && (381)\\
&= \sqrt{\frac{60}{a^6}} \left(a\int_0^a x\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx - \int_0^a x^2 \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx\right) && (382)\\
&= \sqrt{\frac{60}{a^6}} \left(a\int_0^{n\pi} u\left(\frac{a}{n\pi}\right)\sin(u)\left(\frac{a}{n\pi}\right) du - \int_0^{n\pi} u^2\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \sin(u)\left(\frac{a}{n\pi}\right) du\right) && (383)\\
&= \frac{\sqrt{60}}{a^3}\left(\frac{a^3}{n^2\pi^2}\int_0^{n\pi} u\sin(u)\,du - \frac{a^3}{n^3\pi^3}\int_0^{n\pi} u^2\sin(u)\,du\right) && (384)\\
&= \frac{\sqrt{60}}{n^2\pi^2}\left(\int_0^{n\pi} u\sin(u)\,du - \frac{1}{n\pi}\int_0^{n\pi} u^2\sin(u)\,du\right) && (385)
\end{aligned}
$$

Primeiro fizemos a substituição $\frac{n\pi}{a}x = u$ então $dx = \frac{a}{n\pi}du$ e $x^2 = u^2(a/n\pi)^2$, onde os limites também foram de 0 a $u = a(n\pi/a) = n\pi$. Vamos aplicar o método da integral por partes onde $f(u) = u^2$ e $g'(x) = \sin(u)$

$$
\begin{aligned}
\int_a^b f(x)\,g'(x)\,dx &= f(x)\,g(x)\big|_a^b - \int_a^b g(x)\,f'(x)\,dx && (386)\\
\int_0^{n\pi} u^2 \sin(u)\,du &= -u^2\cos(u)\big|_0^{n\pi} + 2\int_0^{n\pi} \cos(u)\,u du && (387)\\
&= -n^2\pi^2\cos(n\pi) + 2\int_0^{n\pi} u\cos(u)\,du && (388)
\end{aligned}
$$

Precisamos aplicar novamente na segunda integral agora $f(u) = u$

$$\int_a^b f(x)\,g'(x)\,dx = f(x)\,g(x)\big|_a^b - \int_a^b g(x)\,f'(x)\,dx \tag{389}$$

$$\int_0^{n\pi} \cos(u)\,u du = u\sin(u)\big|_0^{n\pi} - \int_0^{n\pi} \sin(u)\,du \tag{390}$$

$$= [\cos(u)]_0^{n\pi} \tag{391}$$

$$= [\cos(n\pi) - \cos(0)] \tag{392}$$

$$= \cos(n\pi) - 1 \tag{393}$$

Então a segunda integral é:

$$\int_0^{n\pi} u^2 \sin(u)\,du = -\,n^2\pi^2\cos(n\pi) + 2\left(\cos(n\pi) - 1\right) \tag{394}$$

$$= -n^2\pi^2\cos(n\pi) + 2\cos(n\pi) - 2 \tag{395}$$

$$= \left(-n^2\pi^2 + 2\right)\cos(n\pi) - 2 \tag{396}$$

E a primeira integral é dada por, onde $f(x) = u$:

$$\int_a^b f(x)\,g'(x)\,dx = f(x)\,g(x)\big|_a^b - \int_a^b g(x)\,f'(x)\,dx \tag{397}$$

$$\int_0^{n\pi} \sin(u)\,u du = -u\cos(u)\big|_0^{n\pi} + \int_0^{n\pi} \cos(u)\,du \tag{398}$$

$$= -n\pi\cos(n\pi) + [\sin(u)]_0^{n\pi} \tag{399}$$

$$= -n\pi\cos(n\pi) \tag{400}$$

Então o coeficiente pode ser dado por:

$$
\begin{aligned}
c_n &= \frac{\sqrt{60}}{n^2\pi^2}\left(\int_0^{n\pi} u\sin(u)\,du - \frac{1}{n\pi}\int_0^{n\pi} u^2\sin(u)\,du\right) && (401)\\
&= \frac{\sqrt{60}}{n^2\pi^2}\left(-n\pi\cos(n\pi) - \frac{1}{n\pi}\left[\left(-n^2\pi^2+2\right)\cos(n\pi)-2\right]\right) && (402)\\
&= \frac{\sqrt{60}}{n^2\pi^2}\left(-n\pi\cos(n\pi) + \frac{(n^2\pi^2-2)}{n\pi}\cos(n\pi) + \frac{2}{n\pi}\right) && (403)\\
&= \frac{\sqrt{60}}{n^2\pi^2}\left(\frac{(-n^2\pi^2+n^2\pi^2-2)}{n\pi}\cos(n\pi) + \frac{2}{n\pi}\right) && (404)\\
&= \frac{\sqrt{60}}{n^2\pi^2}\left(\frac{-2}{n\pi}\cos(n\pi) + \frac{2}{n\pi}\right) && (405)\\
&= \frac{2\sqrt{60}}{n^3\pi^3}\left(1-\cos(n\pi)\right) && (406)\\
&= \frac{2\sqrt{60}}{n^3\pi^3}\left(1-(-1)^n\right) && (407)
\end{aligned}
$$

Então se n é ímpar temos $\cos(n\pi) = -1$, se n é par temos $\cos(n\pi) = 1$ temos escrever então $\cos(n\pi) = (-1)^n$. Mas então:

$$
c_n = \begin{cases} 0 & \text{,se } n \text{ par} \\ \frac{4\sqrt{60}}{n^3\pi^3} & \text{,se } n \text{ ímpar} \end{cases} \tag{408}
$$

Então a solução é:

$$
\begin{aligned}
\Psi(x.t) &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x,t) && (409)\\
&= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\exp\left[-\frac{in^2\pi^2ht}{2ma^2}\right] && (410)\\
&= \sum_{n=1,3,5}^{\infty} \frac{4\sqrt{60}}{n^3\pi^3}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\exp\left[-\frac{in^2\pi^2ht}{2ma^2}\right] && (411)\\
&= \frac{4}{\pi^3}\sqrt{\frac{120}{a}}\sum_{n=1,3,5}^{\infty} \frac{1}{n^3}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\exp\left[-\frac{in^2\pi^2ht}{2ma^2}\right] && (412)
\end{aligned}
$$

Ou se $120 = 4 \cdot 30 = 2^2 \cdot 30$ então $\sqrt{120} = \sqrt{2^2 \cdot 30} = \sqrt{2^2}\sqrt{30} = 2\sqrt{30}$. De forma que podemos reescrever $4\sqrt{120} = 8\sqrt{30}$ e $8 = 2^3$. Assim obtemos a solução do livro:

$$\Psi\left(x,t\right) = \sqrt{\frac{30}{a}}\left(\frac{2}{\pi}\right)^3 \sum_{n=1,3,5}^{\infty} \frac{1}{n^3} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \exp\left[-\frac{in^2\pi^2 ht}{2ma^2}\right] \tag{413}$$

Exemplo: Mostre que $\sum_{n=1}^{\infty} \left|c_n\right|^2 = 1$ é satisfeito no exemplo anterior. Se medir a energia de uma partícula neste estado, qual é o resultado mais provável? Qual é o valor esperado de energia? Recebemos a sugestão de utilizar as seguintes séries:

$$\frac{1}{1^6} + \frac{1}{3^6} + \frac{1}{5^6} + \cdots = \frac{\pi^6}{960} \qquad \frac{1}{1^4} + \frac{1}{3^4} + \frac{1}{5^4} + \cdots = \frac{\pi^4}{96} \tag{414}$$

Queremos demonstrar que $\sum_{n=1}^{\infty} \left|c_n\right|^2 = 1$ é satisfeito no exemplo anterior. Então:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left|c_n\right|^2 = \sum_{n=1,3,5...}^{\infty} \left(\frac{4\sqrt{60}}{n^3\pi^3}\right)^2 = \left(\frac{4\sqrt{60}}{\pi^3}\right)^2 \sum_{n=1,3,5...}^{\infty} \frac{1}{n^6} = \frac{16 \cdot 60}{\pi^6} \sum_{n=1,3,5...}^{\infty} \frac{1}{n^6} = \frac{960}{\pi^6} \sum_{n=1,3,5...}^{\infty} \frac{1}{n^6} \tag{415}$$

Então usando a série que nos foi fornecida:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \left|c_n\right|^2 = \frac{960}{\pi^6}\left(\frac{\pi^6}{960}\right) = 1 \tag{416}$$

E o valor esperado da anergia , sendo $E_n = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m}$

$$\langle H \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_n \left|c_n\right|^2 = \sum_{n=1,3,5...}^{\infty} \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{4\sqrt{60}}{n^3\pi^3}\right)^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\frac{960}{\pi^6} \sum_{n=1,3,5...}^{\infty} \frac{n^2}{n^6} \tag{417}$$

Usando a série que nos foi fornecida:

$$\langle H \rangle = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{10}{\pi^2} \right) \left(\frac{96}{\pi^4} \right) \left(\frac{\pi^4}{96} \right) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{10}{\pi^2} \right) \tag{418}$$

Isso é muito próximo da energia para $n = 1$ que é $E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m}$, ou seja:

$$\langle H \rangle = \frac{10}{\pi^2} E_1 = 1,01 E_1 \tag{419}$$

Isso também pode ser visto fazendo:

$$|c_1|^2 = \left(\frac{4\sqrt{60}}{\pi^3} \right)^2 = \frac{960}{\pi^6} = 0.998 \tag{420}$$

Ou seja, isso indica que o primeiro termo 'domina' nosso somatório de soluções, já que todos os outros termos farão a diferença para garantir a normalização. Digamos que c_n nos diz a "quantidade" de $\psi_n$em Ψ, podemos esperar que 99.8das medições de energia nos retornarão E_1.

Podemos verificar a normalização do somatório de $|c_n|^2$ diretamente, seguindo a orientação do livro vamos fazer a prova pra $t = 0$, mas é facilmente generalizável para qualquer t arbitrário.

$$1 = \int |\Psi(x, 0)|^2 \, dx \tag{421}$$

$$= \int \Psi^*(x, 0) \, \Psi(x, 0) \, dx \tag{422}$$

$$= \int \left(\sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n \right)^* \left(\sum_{m=1}^{\infty} c_m \psi_m \right) dx \tag{423}$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} \int c_n^* \psi_n^* c_m \psi_m dx \tag{424}$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} c_n^* c_m \int \psi_n^* \psi_m dx \tag{425}$$

$$= \sum_{n,m=1}^{\infty} c_n^* c_m \delta_{nm} \tag{426}$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} c_n^* c_n \tag{427}$$

Então:

$$\sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 = 1 \tag{428}$$

De modo análogo podemos checar o valor esperado de energia, utilizando equação de Schrödinger independente do tempo $\widehat{H}\psi_n = E_n\psi_n$ então:

$$\langle H \rangle = \int \Psi \widehat{H} \Psi dx \tag{429}$$

$$= \int \left(\sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n \right)^* \widehat{H} \left(\sum_{m=1}^{\infty} c_m \psi_m \right) dx \tag{430}$$

$$= \sum_{n,m=1}^{\infty} c_n^* c_m \int \psi_n^* \left(\widehat{H} \psi_m \right) dx \tag{431}$$

$$= \sum_{n,m=1}^{\infty} c_n^* c_m \int \psi_n^* \left(E_m \psi_m \right) dx \tag{432}$$

$$= \sum_{n,m=1}^{\infty} c_n^* c_m E_m \int \psi_n^* \psi_m dx \tag{433}$$

$$= \sum_{n,m=1}^{\infty} c_n^* c_m E_m \delta_{nm} \tag{434}$$

Então:

$$\langle H \rangle = \sum_{n}^{\infty} |c_n|^2 E_n \tag{435}$$

Exemplo: Calcule $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$,$\langle p \rangle$, $\langle p \rangle^2$, σ_x e σ_p para o enésimo estado estacionário para o poço quadrado infinito. Então verifique se o princípio da incerteza é satisfeito e aponte qual é o estado que chega mais perto do limite. Primeiro vamos recuperar a solução já conhecida no interior do poço que é 331:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x \right) \tag{436}$$

Então:

$$\langle x\rangle = \int_0^a x\left|\psi_n\right|^2 dx = \frac{2}{a}\int_0^a x\sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx = \frac{2}{a}\int_0^a \left(\frac{a}{n\pi}\right)u\sin^2\left(u\right)\left(\frac{a}{n\pi}\right)du = \frac{2a}{n^2\pi^2}\int_0^{n\pi} u\sin^2 u \tag{437}$$

Onde substituímos $u = \frac{n\pi}{a}x$ então $x = \frac{a}{n\pi}u$ e $dx = \frac{a}{n\pi}du$, além de que os limites vão de $x = 0 \rightarrow u = 0$ até $x = a \rightarrow u = n\pi$. Utilizando então integração por partes sendo $f\left(u\right) = u$, e sendo que já calculamos a integral de $\sin^2\left(x\right)$ utilizando a propriedade trigonométrica $2\sin^2\left(x\right) = 1 - \cos\left(2x\right)$ em 321 sendo $\int \sin^2 xdx = x/2 - \sin\left(2x\right)/4 + C$ então:

$$\int_a^b f\left(x\right)g'\left(x\right)dx = f\left(x\right)g\left(x\right)\Big|_a^b - \int_a^b g\left(x\right)f'\left(x\right)dx \tag{438}$$

$$\int_0^{n\pi} u\sin^2 udu = u\left(\frac{u}{2} - \frac{\sin\left(2u\right)}{4}\right)\Bigg|_0^{n\pi} - \int_0^{n\pi}\left(\frac{u}{2} - \frac{\sin\left(2u\right)}{4}\right)du \tag{439}$$

$$= \left(\frac{n^2\pi^2}{2} - \frac{n\pi\sin\left(2n\pi\right)}{4}\right) - \frac{1}{2}\int_0^{n\pi} udu + \frac{1}{4}\int_0^{n\pi}\sin\left(2u\right)du \tag{440}$$

$$= \frac{n^2\pi^2}{2} - \frac{1}{4}\left[u^2\right]_0^{n\pi} + \frac{1}{4}\int_0^{2n\pi}\sin\left(v\right)dv \tag{441}$$

$$= \frac{2n^2\pi^2}{4} - \frac{n^2\pi^2}{4} - \frac{1}{4}\left[\cos v\right]_0^{2n\pi} \tag{442}$$

$$= \frac{n^2\pi^2}{4} - \frac{1}{4}\left[\cos 2\pi - \cos 0\right] \tag{443}$$

$$= \frac{n^2\pi^2}{4} - \frac{1}{4}\left(1 - 1\right) \tag{444}$$

$$= \frac{n^2\pi^2}{4} \tag{445}$$

Onde na integral foi substituído $v = 2u$ então $\frac{dv}{2} = du$ e consequentemente os limites são 0 e $2n\pi$. Substituindo então:

$$\langle x\rangle = \frac{2a}{n^2\pi^2}\int_0^{n\pi} u\sin^2 udu = \frac{2a}{n^2\pi^2}\left(\frac{n^2\pi^2}{4}\right) = \frac{a}{2} \tag{446}$$

Agora para $\langle x^2 \rangle$:

$$\left\langle x^2 \right\rangle = \int_0^a x^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = \frac{2}{a}\int_0^a \left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 u \sin^2(u) \left(\frac{a}{n\pi}\right) du = \frac{2a^2}{n^3\pi^3}\int_0^{n\pi} u^2 \sin^2 u du \tag{447}$$

Onde fizemos a mesma substituição $u = \frac{n\pi}{a}x$. Fazendo separação de variáveis novamente sendo $f(u) = u^2$:

$$\int_a^b f(x) g'(x) dx = f(x) g(x)\big|_a^b - \int_a^b g(x) f'(x) dx \tag{448}$$

$$\int_0^{n\pi} u^2 \sin^2 u du = u^2 \left(\frac{u}{2} - \frac{\sin(2u)}{4}\right)\Bigg|_0^{n\pi} - \int_0^{n\pi} 2u \left(\frac{u}{2} - \frac{\sin(2u)}{4}\right) du \tag{449}$$

$$= \frac{n^3\pi^3}{2} - \frac{n^2\pi^2 \sin(2n\pi)}{4} - \int_0^{n\pi} u^2 du + \frac{1}{2}\int_0^{n\pi} u \sin(2u) du \tag{450}$$

$$= \frac{n^3\pi^3}{2} - \left[\frac{u^3}{3}\right]_0^{n\pi} + \frac{1}{2}\int_0^{2n\pi} \frac{v}{2} \sin(v) \frac{dv}{2} \tag{451}$$

$$= \frac{3n^3\pi^3}{6} - \frac{2n^3\pi^3}{6} + \frac{1}{8}\int_0^{2n\pi} v \sin(v) dv \tag{452}$$

$$= \frac{n^3\pi^3}{6} + \frac{1}{8}\int_0^{2n\pi} v \sin(v) dv \tag{453}$$

Onde fizemos $v = 2u$ e $du = dv/2$, alterando também os limites pra 0 e $2n\pi$, mas já calculamos a segunda integral $\int_0^a u \sin(u) du = -a\cos(a)$ em 400, então:

$$\int_0^{n\pi} u^2 \sin^2 u du = \frac{n^3\pi^3}{6} + \frac{1}{8}(-2n\pi \cos(2n\pi)) \tag{454}$$

$$= \frac{n^3\pi^3}{6} - \frac{n\pi}{4} \tag{455}$$

Então:

$$\left\langle x^2\right\rangle = \frac{2a^2}{n^3\pi^3}\int_0^{n\pi} u^2\sin^2 u du = \frac{2a^2}{n^3\pi^3}\left(\frac{n^3\pi^3}{6}-\frac{n\pi}{4}\right) = a^2\left(\frac{1}{3}-\frac{1}{2n^2\pi^2}\right) \tag{456}$$

A forma mais fácil de calcularmos $\langle p\rangle$ é utilizando:

$$\langle p\rangle = m\frac{d\langle x\rangle}{dt} = m\frac{d}{dt}\left(\frac{a}{2}\right) = 0 \tag{457}$$

E por fim então:

$$\left\langle p^2\right\rangle = \int \psi_n^*\left(\frac{\hbar}{i}\frac{d}{dx}\right)^2\psi_n dx = -\hbar^2\int \psi_n^*\frac{d^2\psi_n}{dx^2}dx \tag{458}$$

E sendo a equação de Schrödinger neste caso dado pela combinação das equações 305 e 315:

$$\frac{\partial^2\psi_n}{\partial x^2} = -k_n^2\psi_n = -\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2\psi_n \tag{459}$$

Então:

$$\left\langle p^2\right\rangle = -\hbar^2\int \psi_n^*\frac{d^2\psi_n}{dx^2}dx = -\hbar^2\int \psi_n^*\left(-\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2\right)\psi_n dx = \left(\frac{\hbar n\pi}{a}\right)^2\int \psi_n^*\psi_n dx = \left(\frac{\hbar n\pi}{a}\right)^2 \tag{460}$$

Então o desvio padrão da posição é dado por:

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} \tag{461}$$

$$= \sqrt{a^2\left(\frac{1}{3}-\frac{1}{2n^2\pi^2}\right)-\left(\frac{a}{2}\right)^2} \tag{462}$$

$$= a\sqrt{\frac{4}{12}-\frac{2}{4n^2\pi^2}-\frac{3}{12}} \tag{463}$$

$$= a\sqrt{\frac{1}{4\cdot 3}-\frac{2}{4n^2\pi^2}} \tag{464}$$

Ou seja:

$$\sigma_x = \frac{a}{2}\sqrt{\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\pi^2}} \tag{465}$$

De modo análogo temos para σ_p:

$$\sigma_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \sqrt{\left(\frac{\hbar n\pi}{a}\right)^2 - (0)^2} = \sqrt{\left(\frac{\hbar n\pi}{a}\right)^2} = \frac{\hbar n\pi}{a} \tag{466}$$

A relação de incerteza é então:

$$\sigma_x\sigma_p = \frac{a}{2}\sqrt{\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\pi^2}}\frac{\hbar n\pi}{a} = \frac{\hbar n\pi}{2}\sqrt{\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\pi^2}} = \frac{\hbar}{2}\sqrt{(n\pi)^2\left(\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\pi^2}\right)} \tag{467}$$

Então:

$$\sigma_x\sigma_p = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{n^2\pi^2}{3} - 2} \tag{468}$$

E podemos ver que quanto maior n maior será o produto dos desvios. Como a relação de incerteza é um limite inferior, então o valor mais próximo do limite é para $n = 1$. Neste caso temos:

$$\sigma_x\sigma_p = \frac{\hbar}{2}\sqrt{\frac{\pi^2}{3} - 2} \tag{469}$$

E como temos $\sqrt{\frac{\pi^2}{3} - 2} = 1.13$ então $\sigma_x\sigma_p = 1.14\frac{\hbar}{2}$, um resultado que obviamente respeita a relação de incerteza dada por $\sigma_x\sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$.

Exemplo: Uma partícula em um poço quadrado infinito tem a seguinte função de onda inicial:

$$\psi(x, 0) = A\left[\psi_1(x) + \psi_2(x)\right] \tag{470}$$

a) Normalize $\psi(x, 0)$.

b) Encontre $\psi(x, t)$ e $|\psi(x, t)|^2$. Expresse o último como uma função senoidal no tempo e para simplificar use $\omega \equiv \pi^2 h/2ma^2$.

c) Calcule $\langle x\rangle$. Verifique se oscila no tempo. Qual é a frequência angular da oscilação? Qual é a amplitude de oscilação?

d) Calcular $\langle p\rangle$.

e) Se você medir a energia dessa partícula, quais valores você espera obter e com qual probabilidade? Encontre o valor esperado de H e como ele se compara a E_1 e E_2.

Pela notação podemos assumir que $\psi_n(x)$ são as soluções estacionárias de $\Psi(x,t)$. Primeiro queremos normalizar $\Psi(x,0)$. Então:

$$|\Psi|^2 = (A[\psi_1(x)+\psi_2(x)])^*(A[\psi_1(x)+\psi_2(x)]) \tag{471}$$
$$= A^*[\psi_1^*+\psi_2^*]A[\psi_1+\psi_2] \tag{472}$$
$$= A^*A(\psi_1^*\psi_1+\psi_1^*\psi_2+\psi_2^*\psi_1+\psi_2^*\psi_2) \tag{473}$$
$$= |A|^2\left(|\psi_1|^2+|\psi|_2^2+\psi_1^*\psi_2+\psi_2^*\psi_1\right) \tag{474}$$

Integrando então, pela condição de normalização:

$$1 = \int|\Psi|^2dx = |A|^2\left(\int|\psi_1|^2dx+\int|\psi|_2^2dx+\int\psi_1^*\psi_2dx+\int\psi_2^*\psi_1dx\right) = |A|^2(1+1) = 2|A|^2 \tag{475}$$

Então:

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}} \tag{476}$$

Queremos agora calcular $\Psi(x,t)$. Uma vez que

$$\Psi(x,0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\psi_n(x) \tag{477}$$

temos claramente $c_1 = c_2 = 1/\sqrt{2}$ e $c_n = 0$ para $n > 2$. E como vimos que:

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\Psi_n(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\psi_n(x)e^{-iE_nt/\hbar} \tag{478}$$

Uma vez que c_n são constantes, assim como $\psi_n(x)$ são as soluções espaciais constante no tempo, então não pode haver nenhum ψ_n para $n > 2$, então a função de onda deve ter a seguinte forma:

$$\Psi(x,t) = c_1\psi_1(x)\,e^{-iE_1t/\hbar} + c_2\psi_2(x)\,e^{-iE_2t/\hbar} \tag{479}$$

Usando os valores de c_1 calculados e a definição de frequência angular dada pelo enunciado $\omega \equiv \pi^2\hbar/2ma^2$, uma vez que já vimos que:

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} = \omega\hbar n^2 \tag{480}$$

Então:

$$\begin{aligned}
\Psi(x,t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1(x)\,e^{-i\omega\hbar 1^2 t/\hbar} + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_2(x)\,e^{-i\omega\hbar 2^2 t/\hbar} && (481)\\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_1(x)\,e^{-i\omega t} + \psi_2(x)\,e^{-i4\omega t}\right) && (482)\\
&= \frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{2}}\left(\psi_1(x) + \psi_2(x)\,e^{-i3\omega t}\right) && (483)
\end{aligned}$$

Também já calculamos que $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$então:

$$\begin{aligned}
\Psi(x,t) &= \frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)e^{-i3\omega t}\right) && (484)\\
&= \frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{a}}\left(\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)e^{-i3\omega t}\right) && (485)
\end{aligned}$$

Então:

$$\begin{aligned}
|\Psi|^2 &= \left[\frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{a}}\left(\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)e^{-i3\omega t}\right)\right]^*\left[\frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{a}}\left(\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)e^{-i3\omega t}\right)\right] && (486)\\
&= \frac{e^{+i\omega t}}{\sqrt{a}}\left(\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)e^{+i3\omega t}\right)\frac{e^{-i\omega t}}{\sqrt{a}}\left(\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)e^{-i3\omega t}\right) && (487)\\
&= \frac{1}{a}\left(\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\left(e^{-i3\omega t} + e^{+i3\omega t}\right) + \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right) && (488)
\end{aligned}$$

E sendo $\cos(x) = \frac{e^{ix}+e^{ix}}{2}$:

$$|\Psi|^2 = \frac{1}{a}\left(\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) + 2\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cos(3\omega t) + \sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\right) \tag{489}$$

Queremos então computar $\langle x\rangle$:

$$\langle x\rangle = \int x\,|\Psi|^2\,dx \tag{490}$$
$$= \frac{1}{a}\left(\int x\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)dx + \int 2\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)\cos(3\omega t)\,dx + \int x\sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx\right) \tag{491}$$
$$= \frac{1}{a}\left(\int x\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)dx + 2\cos(3\omega t)\int x\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx + \int x\sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx\right) \tag{492}$$

Onde lembramos que a integral é na posição, logo $\cos(3\omega t)$ pode ser retirado para fora do integrando. Vamos calcular uma integral por vez. Primeiro vamos substituir $u = \frac{\pi x}{a}$ e então os limites $x = 0 \to u = 0$ e $x = a \to u = \pi$:

$$\int_0^{\pi} u\left(\frac{a}{\pi}\right)\sin^2(u)\left(\frac{a}{\pi}\right)dx = \frac{a^2}{\pi^2}\int_0^{\pi} u\sin^2(u)\,dx = \frac{a^2}{\pi^2}\frac{\pi^2}{4} = \left(\frac{a}{2}\right)^2 \tag{493}$$

Essa é uma integral que já tínhamos calculado 445. A terceira integral fazemos algo análogo substituindo $u = \frac{2\pi x}{a}$, então os limites ficam entre 0 e 2π:

$$\int_0^{2\pi} u\left(\frac{a}{2\pi}\right)\sin^2(u)\left(\frac{a}{2\pi}\right)du = \frac{a^2}{4\pi^2}\int_0^{2\pi} u\sin^2(u)\,du = \frac{a^2}{4\pi^2}\frac{(2\pi)^2}{4} = \left(\frac{a}{2}\right)^2 \tag{494}$$

Onde obtemos a mesma integral e o mesmo resultado. Agora para a integral do meio, vamos utilizar a seguinte propriedade trigonométrica:

$$\cos(A \pm B) = \cos A\cos B \mp \sin A\sin B \tag{495}$$

Então:

$$\cos(A+B) - \cos(A-B) = (\cos A\cos B - \sin A\sin B) - (\cos A\cos B + \sin A\sin B) \tag{496}$$

$$\cos(A+B) - \cos(A-B) = -2\sin A\sin B \tag{497}$$

$$(\cos(A-B) - \cos(A+B))\frac{1}{2} = \sin A\sin B \tag{498}$$

$$\left(\cos\left(\frac{\pi x}{a} - \frac{2\pi x}{a}\right) - \cos\left(\frac{\pi x}{a} + \frac{2\pi x}{a}\right)\right)\frac{1}{2} = \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \tag{499}$$

$$\left(\cos\left(-\frac{\pi x}{a}\right) - \cos\left(\frac{4\pi x}{a}\right)\right)\frac{1}{2} = \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \tag{500}$$

$$\left(\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right) - \cos\left(\frac{3\pi x}{a}\right)\right)\frac{1}{2} = \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \tag{501}$$

Então a segunda integral se torna:

$$\int x\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx = \frac{1}{2}\left(\int x\cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)dx - \int x\cos\left(\frac{3\pi x}{a}\right)dx\right) \tag{502}$$

$$2\int x\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)d = \int_0^{\pi} u\left(\frac{a}{\pi}\right)\cos(u)\left(\frac{a}{\pi}\right)dx - \int_0^{3\pi} u\left(\frac{a}{3\pi}\right)\cos(u)\left(\frac{a}{3\pi}\right)du \tag{503}$$

$$= \frac{a^2}{\pi^2}\int_0^{\pi} u\cos(u)\,dx - \frac{a^2}{3^2\pi^2}\int_0^{3\pi} u\cos(u)\,du \tag{504}$$

Onde fizemos a substituição $u = \frac{\pi x}{a}$ (com limites entre 0e π) e $u = \frac{4\pi x}{a}$ (com limites entre 0 e 4π). A solução dessa integral já vimos em 391:

$$2\int x\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx = \frac{a^2}{\pi^2}\int_0^{\pi} u\cos(u)\,dx - \frac{a^2}{3^2\pi^2}\int_0^{3\pi} u\cos(u)\,du \tag{505}$$

$$= \frac{a^2}{\pi^2}\left(\cos(\pi)-1\right) - \frac{a^2}{3^2\pi^2}\left(\cos(3\pi)-1\right) \tag{506}$$

$$= \frac{a^2}{\pi^2}\left(-1-1\right) - \frac{a^2}{3^2\pi^2}\left(-1-1\right) \tag{507}$$

$$= -2\left[\frac{9a^2}{9\pi^2} - \frac{a^2}{9\pi^2}\right] \tag{508}$$

$$= -2\frac{8a^2}{9\pi^2} \tag{509}$$

$$= -\frac{16a^2}{9\pi^2} \tag{510}$$

Então:

$$\langle x\rangle = \frac{1}{a}\left(\int x\sin^2\left(\frac{\pi x}{a}\right)dx + \cos(3\omega t)\left[2\int x\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx\right] + \int x\sin^2\left(\frac{2\pi x}{a}\right)dx\right) \tag{511}$$

$$= \frac{1}{a}\left(\left(\frac{a}{2}\right)^2 + \cos(3\omega t)\left(-\frac{16a^2}{9\pi^2}\right) + \left(\frac{a}{2}\right)^2\right) \tag{512}$$

$$= \frac{a^2}{a}\left(\frac{1}{4} - \cos(3\omega t)\frac{16}{9\pi^2} + \frac{1}{4}\right) \tag{513}$$

$$= a\left(\frac{2}{4} - \cos(3\omega t)\frac{16}{9\pi^2}\right) \tag{514}$$

$$= a\left(\frac{1}{2} - \frac{2}{2}\cos(3\omega t)\frac{16}{9\pi^2}\right) \tag{515}$$

$$= \frac{a}{2}\left(1 - \frac{32}{9\pi^2}\cos(3\omega t)\right) \tag{516}$$

Sobre a amplitude podemos notar que como calculamos anteriormente, a posição da partícula oscila em torno de $\frac{a}{2}$, o centro da caixa. Evidentemente a amplitude deve ser menor que $\frac{a}{2}$. E ela é $\frac{32}{9\pi^2}\frac{a}{2} = 0.36\frac{a}{2} < \frac{a}{2}$. Agora a frequência angular é $3\omega = \frac{3\pi^2\hbar}{2ma^2}$. E $\langle p\rangle$ é dado por:

$$\langle p\rangle = m\frac{d\langle x\rangle}{dt} = m\frac{d}{dt}\left(\frac{a}{2}\left[1-\frac{32}{9\pi^2}\cos\left(3\omega t\right)\right]\right) = ma\frac{3\cdot 16}{9\pi^2}\omega\sin\left(3\omega t\right) = ma\frac{16}{3\pi^2}\omega\sin\left(3\omega t\right) \tag{517}$$

E como$\omega = \frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}$ então:

$$\langle p\rangle = ma\frac{16}{3\pi^2}\frac{\pi^2\hbar}{2ma^2}\sin\left(3\omega t\right) = \frac{8\hbar}{3a}\sin\left(3\omega t\right) \tag{518}$$

Relembrando nossa função de onda:

$$\Psi\left(x,t\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_1\left(x\right)e^{-i\omega\hbar 1^2 t/\hbar} + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_2\left(x\right)e^{-i\omega\hbar 2^2 t/\hbar} = \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_1\left(x,t\right) + \frac{1}{\sqrt{2}}\Psi_2\left(x,t\right) \tag{519}$$

Evidentemente podemos obter então E_1e E_2, e as probabilidades de obtermos cada um dos valores é dado por $|c_1|^2 = |c_2|^2 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\right)^2 = \frac{1}{2}$.Agora para calcular $\langle H\rangle$ temos:

$$\langle H\rangle = \sum |c_n|^2 E_n = \frac{E_1}{2} + \frac{E_2}{2} = \frac{1}{2}\left(\frac{1\pi^2\hbar^2}{2ma^2} + \frac{4\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\right) = \frac{5\pi^2\hbar^2}{4ma^2} \tag{520}$$

Onde usamos fato de que $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$. Isto é a média dos valores E_1e E_2.

Exemplo: Uma partícula em um poço quadrado infinito tem a seguinte função de onda inicial:

$$\Psi\left(x,0\right) = \begin{cases} Ax & 0\leq x\leq a/2 \\ A\left(a-x\right) & a/2\leq x\leq a \end{cases} \tag{521}$$

a) Determine a constante A.

b) Encontre $\Psi\left(x,t\right)$

c) Encontre a probabilidade de que a medição de energia retorne o valor E_1.

d) Qual o valor esperado de energia usando $\langle H\rangle = \sum_{n=1}^{\infty}|c_n|^2 E_n$.

Vamos começar novamente determinando a constante A.

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi|^2 \, dx \tag{522}$$
$$= \int_0^{a/2} A^2 x^2 dx + \int_{a/2}^{a} A^2 (a-x)^2 \, dx \tag{523}$$
$$= A^2 \left[\frac{x^3}{3} \right]_0^{a/2} - A^2 \int_{a/2}^{0} u^2 du \tag{524}$$
$$= A^2 \frac{a^3}{2^3 3} - A^2 \left[\frac{u^3}{3} \right]_{a/2}^{0} \tag{525}$$
$$= A^2 \frac{a^3}{2^3 3} + A^2 \frac{a^3}{2^3 3}{}_{a/2}^{0} \tag{526}$$
$$= A^2 \frac{a^3}{12} \tag{527}$$

Onde fizemos a substituição $u = a - x$ então os limites vão de $x = a/2 \rightarrow u = a/2$ até $x = a \rightarrow u = 0$. além de que $du = -dx$. Então sendo $12 = 2^2 \cdot 3$, temos:

$$A = \sqrt{\frac{2^2 3}{a^3}} = 2\sqrt{\frac{3}{a^3}} \tag{528}$$

Queremos agora encontrar $\Psi(x,t) = \sum c_n \Psi_n(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$. Portanto como já calculamos que a solução no interior do posso é 331, ou seja $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right)$, então precisamos calcular c_n, lembrando que também já calculamos $E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ em 319. Então como vimos367:

$$c_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \int_0^a \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) \Psi(x,0) \, dx \tag{529}$$
$$= \sqrt{\frac{2}{a}} \left(\int_0^{a/2} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) Ax dx + \int_{a/2}^{a} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) A(a-x) \, dx \right) \tag{530}$$
$$= \sqrt{\frac{2}{a}} \left(A \int_0^{a/2} x \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) dx + Aa \int_{a/2}^{a} \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) dx - A \int_{a/2}^{a} x \sin\left(\frac{n\pi}{a} x\right) dx \right) \tag{531}$$

Temos três integrais pra resolver. Primeiro vamos substituir $u = \frac{n\pi}{a}x$:

$$I_1 = \int_0^{n\pi/2} u \left(\frac{a}{n\pi}\right) \sin(u) \left(\frac{a}{n\pi}\right) du = \left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \int_0^{n\pi/2} u \sin(u)\, du \tag{532}$$

Isso é parecido com o que já calculamos em 400, o limite aqui é $\frac{n\pi}{2}$ e não $n\pi$ e isso faz diferença. Então vamos retomar algumas linhas antes de substituirmos os limites:

$$\int_a^b \sin(u)\, u du = \sin(u) - u\cos(u)|_a^b \tag{533}$$

Com esse resultado temos:

$$I_1 = \left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 [\sin(u) - u\cos(u)]|_0^{n\pi/2} = \frac{a^2}{n^2\pi^2}\left[\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) - \frac{n\pi}{2}\cos\left(\frac{n\pi}{2}\right)\right] \tag{534}$$

Repetindo a substituição, com a diferença que agora os limites serão entre $x = \frac{a}{2} \to u = \frac{n\pi}{2}$ e $x = a \to u = n\pi$, ficamos então com a terceira integral::

$$\begin{aligned}
I_3 &= \left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \int_{n\pi/2}^{n\pi} u \sin(u)\, du & (535)\\
&= \left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \left[-n\pi\cos(n\pi) + \frac{n\pi}{2}\cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) + \sin(n\pi) - \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)\right] & (536)\\
&= \left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \left[-n\pi\cos(n\pi) + \frac{n\pi}{2}\cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) - \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)\right] & (537)\\
&= \frac{a^2}{n\pi}\left[\frac{\cos(n\pi/2)}{2} - \cos(n\pi) - \frac{\sin(n\pi/2)}{n\pi}\right] & (538)
\end{aligned}$$

A segunda integral é, com a mesma substituição $u = \frac{n\pi}{a}x$:

$$I_2 = \int_{n\pi/2}^{n\pi} \sin(u)\left(\frac{a}{n\pi}\right) du = \frac{a}{n\pi}\int_{n\pi/2}^{n\pi} \sin(u)\, dx = -\frac{a}{n\pi}[\cos u]_{n\pi/2}^{n\pi} = \frac{a}{n\pi}\left[\cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) - \cos n\pi\right] \tag{539}$$

Então:

$$c_n = A\sqrt{\frac{2}{a}}\left(\int_0^{a/2} x\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx + a\int_{a/2}^{a}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx - \int_{a/2}^{a} x\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)dx\right) \tag{540}$$

$$= A\sqrt{\frac{2}{a}}\left(\frac{a^2}{n^2\pi^2}\left[\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) - \frac{n\pi}{2}\cos\left(\frac{n\pi}{2}\right)\right] + a\frac{a}{n\pi}\left[\cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) - \cos n\pi\right]\dots \tag{541}$$

$$\dots - \frac{a^2}{n\pi}\left[\frac{\cos(n\pi/2)}{2} - \cos(n\pi) - \frac{\sin(n\pi/2)}{n\pi}\right]\right) \tag{542}$$

$$= A\sqrt{\frac{2}{a}}\frac{a^2}{n^2\pi^2}\left(\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) - \frac{n\pi}{2}\cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) + n\pi\cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) - n\pi\cos n\pi\dots \tag{543}$$

$$\dots - \frac{n\pi}{2}\cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) + n\pi\cos(n\pi) + \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right)\right) \tag{544}$$

$$= A\frac{\sqrt{2a^3}}{n^2\pi^2}2\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) \tag{545}$$

Substituindo o $A = 2\sqrt{\frac{3}{a^3}}$ calculado temos:

$$A\frac{2\sqrt{2a^3}}{n^2\pi^2} = 2\sqrt{\frac{3}{a^3}}\frac{2\sqrt{2a^3}}{n^2\pi^2} = \frac{4\sqrt{6}}{n^2\pi^2} \tag{546}$$

Agora quando n é par temos por exemplo para $n = 0, 2, 4, \dots$:

$$\sin(0) = \sin(n\pi) = \sin(2n\pi) = 0 \tag{547}$$

Então só resta n ímpar. E o sinal se altera, começando em positivo, negativo, positivo, etc, por exemplo para $n = 1, 3, 5$,..

$$\sin\left(\frac{\pi}{2}\right) = 1, \quad \sin\left(\frac{3\pi}{2}\right) = -1, \quad \sin\left(\frac{5\pi}{2}\right) = 1 \tag{548}$$

Então queremos uma transformação do tipo $1 \to 0$, $3 \to 1$, $5 \to 2 \dots n \to p$ para que possamos escrever o resultado em termos de $(-1)^p$. Podemos notar que sempre temos $n = 2p + 1$. Dessa forma com o $2p$ garantimos que quando avançamos em $p = 0, 1, 2, 3, \dots$, então n avança sempre em 2 unidades, ou seja, se partirmos do ímpar estamos sempre no ímpar. Mas como p começa em 0 e n deve começar em 1 para começar em ímpar, então somamos 1. Ou seja:

$$n = 2p + 1 \to p = \frac{n-1}{2} \tag{549}$$

De forma que temos

$$\sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) = (-1)^{\frac{n-1}{2}} \tag{550}$$

Então:

$$c_n = \begin{cases} 0 & , n \text{ par} \\ \frac{4\sqrt{6}}{n^2\pi^2}(-1)^{\frac{n-1}{2}} & n, \text{ ímpar} \end{cases} \tag{551}$$

Como já calculamos que a solução no interior do posso é 331, ou seja $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$, e lembrando que também já calculamos $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$ em 319, então:

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) &= \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar} && (552) \\ &= \sum_{n=1,3,5\ldots}^{\infty} \frac{4\sqrt{6}}{n^2\pi^2}(-1)^{\frac{n-1}{2}}\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\exp\left[-iE_n t/\hbar\right] && (553) \\ &= \frac{4\sqrt{6}}{\pi^2}\sqrt{\frac{2}{a}}\sum_{n=1,3,5\ldots}^{\infty}(-1)^{\frac{n-1}{2}}\frac{1}{n^2}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\exp\left[-iE_n t/\hbar\right] && (554) \\ &= \frac{4}{\pi^2}\sqrt{\frac{12}{a}}\sum_{n=1,3,5\ldots}^{\infty}(-1)^{\frac{n-1}{2}}\frac{1}{n^2}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\exp\left[-iE_n t/\hbar\right] && (555) \end{aligned}$$

Ou como $\sqrt{12} = \sqrt{2^2 3} = 2\sqrt{3}$ então:

$$\Psi(x,t) = \frac{8}{\pi^2}\sqrt{\frac{3}{a}}\sum_{n=1,3,5\ldots}^{\infty}(-1)^{(n-1)/2}\frac{1}{n^2}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\exp\left[-iE_n t/\hbar\right] \tag{556}$$

Para obtermos a probabilidade de que a medida da energia seja E_1, só precisamos calcular $P_1 = |c_1|^2$:

$$
\begin{aligned}
P_1 &= |c_1|^2 && (557)\\
&= \left|\frac{4\sqrt{6}}{1^2\pi^2}(-1)^{\frac{1-1}{2}}\right|^2 && (558)\\
&= \left|\frac{4\sqrt{6}}{\pi^2}\right|^2 && (559)\\
&= 0.9855 && (560)
\end{aligned}
$$

Ou seja $P_1 = 98,55\%$. E agora então calculando o valor esperado usando a equação:

$$
\begin{aligned}
\langle H\rangle &= \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n && (561)\\
&= \sum_{n=1,2,3...}^{\infty} \left|\frac{4\sqrt{6}}{n^2\pi^2}(-1)^{\frac{n-1}{2}}\right|^2 \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} && (562)\\
&= \frac{4\sqrt{6}}{\pi^2}\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\sum_{n=1,3,5...}^{\infty}\left|\frac{(-1)^{\frac{n-1}{2}}}{n^2}\right|^2 n^2 && (563)\\
&= \frac{2\sqrt{6}\hbar^2}{ma^2}\sum_{n=1,3,5...}^{\infty}\frac{(-1)^{n-1}}{n^2} && (564)\\
&= \frac{2\sqrt{6}\hbar^2}{ma^2}\left(\frac{(-1)^0}{1^2}+\frac{(-1)^2}{3^2}+\frac{(-1)^4}{5^2}+\dots\right) && (565)\\
&= \frac{2\sqrt{6}\hbar^2}{ma^2}\left(\frac{1}{1^2}+\frac{1}{3^2}+\frac{1}{5^2}+\dots\right) && (566)
\end{aligned}
$$

Onde usamos o valor c_n já calculado neste caso em particular e o E_n apresentado anteriormente. Além disso como:

$$
\frac{1}{1^2}+\frac{1}{3^2}+\frac{1}{5^2}+\cdots = \sum_{n=1,3,5...}^{\infty}\frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{8} \tag{567}
$$

Então:

$$\langle H\rangle = \frac{2\sqrt{6}\hbar^2}{ma^2}\frac{\pi^2}{8} \tag{568}$$

$$= \frac{\pi^2\sqrt{6}\hbar^2}{8ma^2} \tag{569}$$

Um comentário do livro que acho que vale a pena trazer é que não há restrição sobre o formato da função de onda, ela só precisa ser normalizável. $\Psi(x,0)$ não precisa sequer ser ter uma derivada contínua. O que surge é que se quisermos calcular $\langle H\rangle$neste caso, vamos ter dificuldades técnicas porque precisamos da segunda derivada de $\Psi(x,0)$. Como exercício complementar queremos ver:

$$S = \sum_{n=1,3,5...}^{\infty}\frac{1}{n^k} \tag{570}$$

Começamos com a função Zeta de Riemman dada por:

$$\zeta(k) = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^k} \tag{571}$$

Vamos dividir em pares e ímpares:

$$\zeta(k) = \sum_{n=2,4,6...}^{\infty}\frac{1}{n^k} + \sum_{n=1,3,5...}^{\infty}\frac{1}{n^k} \tag{572}$$

Vamos reescrever os termos pares como $n = 2m$, então:

$$\sum_{n=2,4,6...}^{\infty}\frac{1}{n^k} = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(2m)^k} \tag{573}$$

Pois em ambos os casos:

$$\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{(2m)^k} = \frac{1}{(2\cdot 1)^k} + \frac{1}{(2\cdot 2)^k} + \frac{1}{(2\cdot 3)^k} + \dots \tag{574}$$

$$= \frac{1}{2^k} + \frac{1}{4^k} + \frac{1}{6^k} + \dots \tag{575}$$

$$= \sum_{n=2,4,6...}^{\infty}\frac{1}{n^k} \tag{576}$$

E como:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2m)^k} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2^k m^k} = \frac{1}{2^k} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{m^k} = \frac{\zeta(k)}{2^k} \tag{577}$$

Então:

$$\zeta(k) = \sum_{n=2,4,6...}^{\infty} \frac{1}{n^k} + \sum_{n=1,3,5...}^{\infty} \frac{1}{n^k} \tag{578}$$

$$\zeta(k) = \frac{\zeta(k)}{2^k} + \sum_{n=1,3,5...}^{\infty} \frac{1}{n^k} \tag{579}$$

$$\sum_{n=1,3,5...}^{\infty} \frac{1}{n^k} = \zeta(k) - \frac{\zeta(k)}{2^k} \tag{580}$$

$$= \zeta(k)\left(1 - 2^{-k}\right) \tag{581}$$

Agora para obtermos os diferentes valores dos somatórios para diferentes valores de k, (até aqui já vimos $k = 2, 4$ e $k = 6$) evidentemente precisamos de $\zeta(k)$ para cada um destes valores. A função $\zeta(k)$ tem valores tabelados para diferentes valores específicos de k,por exemplo, para $k = 2$ é conhecido como problema de Basel, vamos considerar por hora ser suficiente saber disto. Se quisermos uma explicação matemática mais profunda, precisamos reconhecer a generalização do método de Euler para obter os valores de $\zeta(k)$:

$$\zeta(2n) = \frac{(-1)^{n-1}(2\pi)^{2n}}{2 \cdot (2n)!} B_{2n} \tag{582}$$

Mas novamente para obter essa solução, agora precisaríamos ver que é número de Bernoulli. Como meu foco não é a matemática, eu vou aceitar nos resultados que os matemáticos forneceram, se não sinto que estamos entrando em uma toca de coelho infinita.

2.3 Oscilador harmônico

A ideia do oscilador harmônico clássico é uma massa m precisa em uma mola com uma constate de força k, então esse movimento seria governado pela lei de Hooke:

$$F = -kx = m\frac{d^2x}{dt^2} \tag{583}$$

Então:

$$kx = -\frac{m}{k}\frac{d^2x}{dt^2} = -\omega\frac{d^2x}{dt^2} \tag{584}$$

A solução então é:

$$x\left(t\right) = A\sin\left(\omega t\right) + B\cos\left(\omega t\right) \tag{585}$$

onde:

$$\omega \equiv \sqrt{\frac{m}{k}} \tag{586}$$

Para uma força conservativa ($\nabla \times F = 0$) associado a um potencia escalar $V\left(x\right)$ a força é dada por $F = -\frac{dV}{dx}$ então:

$$V\left(x\right) = \frac{1}{2}kx^2 \tag{587}$$

Se expandirmos o potencial em uma série de Taylor, lembrando que podemos expandir uma função $f\left(x\right)$ como uma série de Taylor fazendo em torno do ponto a:

$$f\left(x\right) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n\left(x-a\right)^n, \qquad a_n = \frac{f^{(n)}\left(a\right)}{n!} \tag{588}$$

Expandindo então $V\left(x\right)$ em torno de x_0:

$$V\left(x\right) = \frac{V^{(0)}\left(x_0\right)}{0!}\left(x-x_0\right)^0 + \frac{V^{(1)}\left(x_0\right)}{1!}\left(x-x_0\right)^1 + \frac{V^2\left(x_0\right)}{2!}\left(x-x_0\right)^2 + \ldots \tag{589}$$

$$= V\left(x_0\right) + V^{'}\left(x_0\right)\left(x-x_0\right) + \frac{1}{2}V^{''}\left(x_0\right)\left(x-a\right)^2 + \ldots \tag{590}$$

Podemos adicionar uma constante a $V\left(x\right)$ sem alterar a força, uma vez que F é a derivada, então se somarmos $-V\left(x_0\right)$ podemos remover o primeiro termo. Considerando que $V'\left(x_0\right) = 0$ pois x_0 é um mínimo podemos remover o segundo termo. E se considerarmos que $\left(x-x_0\right)$ é pequeno, vamos considerar que podemos desconsiderar pra $n > 2$, então podemos considerar aproximadamente:

$$V(x) \approx \frac{1}{2}V''(x_0)(x - x_0)^2 \tag{591}$$

Essa aproximação descreve um oscilador harmônico simples em torno do ponto x_0. Se oscilarmos em torno de $x_0 = 0$:

$$V(x) \approx \frac{1}{2}V''(0)\,x^2 \tag{592}$$

Podemos calcular a força:

$$F = -\frac{dV}{dx} = -\frac{d}{dx}\left(\frac{1}{2}V''(0)\,x^2\right) = -V''(0)\,x \tag{593}$$

Lembrando que começamos o capítulo discutindo a lei de Hooke $F = -kx$ então a constante efetiva é dada por $k = V''(x_0)$. Dessa forma qualquer movimento oscilatório pode ser aproximado como um oscilador harmônico simples, se a amplitude for pequena. Uma exceção é se $V''(x_0) = 0$, nesse caso temos um ponto de inflexão e a oscilação não pode ser aproximada a um oscilador harmônico simples.

O problema quântico é resolver a equação de Schrödinger pro seguinte potencial:

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \tag{594}$$

Onde podemos lembrar que:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \to k = m\omega^2 \tag{595}$$

A equação de Schrödinger independente do tempo, com a separação de variáveis é então:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + V\psi = E\psi \tag{596}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\psi = E\psi \tag{597}$$

Há duas formas de resolver. Uma mais geral e mais difícil e outra mais específica e mais simples, começaremos pela mais simples.

2.3.1 Método algébrico

Vamos reescrever:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{1}{2}m\omega^2x^2\right)\psi = E\psi \tag{598}$$

$$\frac{1}{2m}\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}+m^2\omega^2x^2\right)\psi = \tag{599}$$

$$\frac{1}{2m}\left[\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)^2+(m\omega x)^2\right]\psi = \tag{600}$$

$$\frac{1}{2m}\left[\widehat{p}^2+(m\omega x)^2\right]\psi \tag{601}$$

Onde $\widehat{p}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ é o operador do momento. Para números temos:

$$u^2+v^2=(iu+v)(-iu+v) \tag{602}$$

Isso só é possível porque u e v comutam, isto é $[u,v]=uv-vu=0$. Isso não é verdade para $\widehat{p}$ e x. Mas isso pode nos motivar pra analisar as quantidades:

$$(-i\widehat{p}+m\omega x)\,,\qquad (+i\widehat{p}+m\omega x) \tag{603}$$

Ou então escrevendo de forma mais sucinta e colocando um fator a frente (que seja justificado posteriormente, apenas para o resultado ficar melhor) e prestando atenção nos sinais:

$$\widehat{a}_\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp i\widehat{p}+m\omega x) \tag{604}$$

Então:

$$\widehat{a}_-\widehat{a}_+ = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(i\widehat{p}+m\omega x)\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-i\widehat{p}+m\omega x) \tag{605}$$

$$= \frac{1}{2\hbar m\omega}\left[\widehat{p}^2+im\omega\widehat{p}x-im\omega x\widehat{p}+(m\omega x)^2\right] \tag{606}$$

$$= \frac{1}{2\hbar m\omega}\left[\widehat{p}^2-im\omega(x\widehat{p}-\widehat{p}x)+(m\omega x)^2\right] \tag{607}$$

Se x e $\widehat{p}$ comutassem teríamos $[x, \widehat{p}] = x\widehat{p} - \widehat{p}x = 0$. Isso seria verdade se fossem por exemplo, grandezas escalares, mas são operadores que não comutam $[x, \widehat{p}] \neq 0$. Então:

$$\widehat{a}_{-}\widehat{a}_{+} = \frac{1}{2\hbar m\omega}\left[\widehat{p}^2 - im\omega\,[x, \widehat{p}] + (m\omega x)^2\right] \tag{608}$$

$$= \frac{1}{2\hbar m\omega}\left[\widehat{p}^2 + (m\omega x)^2\right] - \frac{im\omega}{2\hbar m\omega}[x, \widehat{p}] \tag{609}$$

$$= \frac{1}{2\hbar m\omega}\left[\widehat{p}^2 + (m\omega x)^2\right] - \frac{i}{2\hbar}[x, \widehat{p}] \tag{610}$$

Agora queremos então calcular o comutador de x[21] e $\widehat{p}$. Para isso vamos fazer uso de uma função de "teste" $f(x)$, já que os comutadores atuam sobre uma função. Podemos remover esta função no final se a operação for independente da escolha da função (como veremos que é), ela serve apenas para nos ajudar a não nos perdermos.

$$[x, \widehat{p}]\, f(x) = (x\widehat{p} - \widehat{p}x)\, f(x) \tag{611}$$

$$= \left(-xi\hbar\frac{\partial}{\partial x} + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}x\right) f(x) \tag{612}$$

$$= -xi\hbar\frac{\partial f}{\partial x} + i\hbar\frac{\partial (xf)}{\partial x} \tag{613}$$

$$= i\hbar\left(-x\frac{\partial f}{\partial x} + x\frac{\partial f}{\partial x} + f\frac{\partial x}{\partial x}\right) \tag{614}$$

$$= i\hbar f(x) \tag{615}$$

$$[x, \widehat{p}] = i\hbar \tag{616}$$

Essa fórmula é conhecida como relação de comutação canônica. Segundo o livro, todos os "mistérios" da mecânica quântica podem ser traçados no fato de que posição e momento não comutam.Alguns autores tratam este fato como um axioma da teoria e derivam a partir dele $\widehat{p} = -i\hbar d/dx$. Retomando então:

[21]Estamos usando apenas $x = \widehat{x}$, mas poderíamos usar $\widehat{x}$ para deixar explícito que estamos falando do operador posição.

$$\widehat{a}_{-}\widehat{a}_{+} = \frac{1}{2\hbar m\omega}\left[\widehat{p}^2 + (m\omega x)^2\right] - \frac{i}{2\hbar}\left[x, \widehat{p}\right] \tag{617}$$

$$= \frac{1}{2\hbar m\omega}\left[\widehat{p}^2 + (m\omega x)^2\right] - \frac{i}{2\hbar}\left(i\hbar\right) \tag{618}$$

$$= \frac{1}{\hbar\omega}\left(\frac{1}{2m}\left[\widehat{p}^2 + (m\omega x)^2\right]\right) + \frac{1}{2} \tag{619}$$

Lembrando:

$$\frac{1}{2m}\left[\widehat{p}^2 + (m\omega x)^2\right]\psi = E\psi \tag{620}$$

E como vimos que a equação de Schrödinger independente do tempo pode ser escrito como $\widehat{H}\psi = E\psi$, então:

$$\widehat{H} = \frac{1}{2m}\left[\widehat{p}^2 + (m\omega x)^2\right] \tag{621}$$

Ou seja:

$$\widehat{a}_{-}\widehat{a}_{+} = \frac{\widehat{H}}{\hbar\omega} + \frac{1}{2} \tag{622}$$

Um cálculo análogo nos leva a:

$$\widehat{a}_{+}\widehat{a}_{-} = \frac{\widehat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \tag{623}$$

Então:

$$[\widehat{a}_{-}, \widehat{a}_{+}] = \widehat{a}_{-}\widehat{a}_{+} - \widehat{a}_{+}\widehat{a}_{-} = \left(\frac{\widehat{H}}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}\right) - \left(\frac{\widehat{H}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right) = 1 \tag{624}$$

E o Hamiltoniano pode ser escrito:

$$\widehat{H} = \left(\widehat{a}_{-}\widehat{a}_{+} - \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{625}$$

$$\widehat{H} = \left(\widehat{a}_{+}\widehat{a}_{-} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{626}$$

Então a equação de Schrödinger se torna[22]:

$$\widehat{H}\psi = E\psi \tag{627}$$

$$\hbar\omega\left(\widehat{a}_-\widehat{a}_+ - \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi \tag{628}$$

E:

$$\widehat{H}\psi = E\psi \tag{629}$$

$$\hbar\omega\left(\widehat{a}_+\widehat{a}_- + \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi \tag{630}$$

Então de forma mais sucinta podemos escrever então a equação de Schrödinger para o oscilador harmônico como:

$$\hbar\omega\left(\widehat{a}_\pm\widehat{a}_\mp \pm \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi$$

Então chegamos em uma das primeiras afirmações que precisamos provar: Se a equação de Schrödinger $\widehat{H}\psi = E\psi$ for satisfeita, então:

$$\widehat{H}\left(\widehat{a}_+\psi\right) = \left(E + \hbar\omega\right)\left(\widehat{a}_+\psi\right) \tag{631}$$

Exemplo: Prove que $\widehat{H}\left(\widehat{a}_+\psi\right) = \left(E + \hbar\omega\right)\left(\widehat{a}_+\psi\right)$. Vamos provar usando o resultado prévio:

$$\widehat{H}\left(\widehat{a}_+\psi\right) = \hbar\omega\left(\widehat{a}_+\widehat{a}_- + \frac{1}{2}\right)\left(\widehat{a}_+\psi\right) \tag{632}$$

$$= \hbar\omega\left(\widehat{a}_+\widehat{a}_-\widehat{a}_+ + \frac{\widehat{a}_+}{2}\right)\psi \tag{633}$$

$$= \widehat{a}_+\left[\hbar\omega\left(\widehat{a}_-\widehat{a}_+ + \frac{1}{2}\right)\right]\psi \tag{634}$$

[22]Conforme o livro, também estou cansado de escrever “equação de Schrödinger independente do tempo”, então quando ficar claro pelo contexto, será citado apenas “equação de Schrödinger”.

E sendo:

$$[\widehat{a}_-, \widehat{a}_+] = \widehat{a}_-\widehat{a}_+ - \widehat{a}_+\widehat{a}_- = 1 \rightarrow \quad \widehat{a}_-\widehat{a}_+ = \widehat{a}_+\widehat{a}_- + 1 \tag{635}$$

Então:

$$\widehat{H}\left(\widehat{a}_+\psi\right) = \widehat{a}_+\left[\hbar\omega\left(\widehat{a}_-\widehat{a}_+ + \frac{1}{2}\right)\right]\psi \tag{636}$$

$$= \widehat{a}_+\left[\hbar\omega\left(\widehat{a}_+\widehat{a}_- + 1 + \frac{1}{2}\right)\right]\psi \tag{637}$$

$$= \widehat{a}_+\left[\hbar\omega\left(\widehat{a}_+\widehat{a}_- + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega\right]\psi \tag{638}$$

$$= \widehat{a}_+\left[\widehat{H} + \hbar\omega\right]\psi \tag{639}$$

$$= \widehat{a}_+\left[\widehat{H}\psi + \hbar\omega\psi\right] \tag{640}$$

$$= \widehat{a}_+\left[E\psi + \hbar\omega\psi\right] \tag{641}$$

Então:

$$\widehat{H}\left(\widehat{a}_+\psi\right) = \left(E + \hbar\omega\right)\left(\widehat{a}_+\psi\right) \tag{642}$$

Uma vez que E e $\hbar\omega$ são todas constantes. De forma bastante análoga temos:

$$\widehat{H}\left(\widehat{a}_-\psi\right) = \left(E - \hbar\omega\right)\left(\widehat{a}_-\psi\right) \tag{643}$$

Ou seja:

$$\widehat{H}\left(\widehat{a}_\pm\psi\right) = \left(E \pm \hbar\omega\right)\left(\widehat{a}_\pm\psi\right) \tag{644}$$

Ou seja, podemos gerar novas soluções se podemos encontrar apenas uma solução para começar. $\widehat{a}_\pm$ são chamados de operadores escadas, onde $\widehat{a}_+$ é um operador de incremento e $\widehat{a}_-$ é um operador de decremento. Evidentemente não podemos aplicar o operador de decremento até obtermos uma energia menor que 0, o que não existe. Apesar de que o operador de decremento nos fornece uma nova solução pra equação de Schrödinger, não podemos garantir que ela seja normalizável, seja por ser zero ou porque sua integral quadrado ser finita. Na prática o primeiro caso acontece primeiro, chegamos a uma solução ψ_0 de forma que se aplicarmos o operador de decremento temos:

$$\widehat{a}_{-}\psi_0 = 0 \tag{645}$$

Podemos determinar qual é esta função, usando a definição de $\widehat{a}_{-}$:

$$\widehat{a}_{-} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(i\widehat{p} + m\omega x\right) \tag{646}$$

Então:

$$0 = \widehat{a}_{-}\psi_0 \tag{647}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(i\widehat{p} + m\omega x\right)\psi_0 \tag{648}$$

$$= i\left(-i\hbar\frac{d\psi_0}{dx}\right) + m\omega x\psi_0 \tag{649}$$

$$= i\hbar\frac{d\psi_0}{dx} + m\omega x\psi_0 \tag{650}$$

$$\frac{d\psi_0}{dx} = -\frac{m\omega}{\hbar}x\psi_0 \tag{651}$$

$$\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar}xdx \tag{652}$$

$$\int\frac{d\psi_0}{\psi_0} = -\frac{m\omega}{\hbar}\int xdx \tag{653}$$

$$\ln\psi_0 = -\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2} + c \tag{654}$$

$$\exp\left(\ln\psi_0\right) = \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}\frac{x^2}{2} + c\right) \tag{655}$$

$$\psi_0\left(x\right) = e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}}e^{c} \tag{656}$$

Ou então como $e^c = A$ é um constante qualquer:

$$\psi_0\left(x\right) = Ae^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{657}$$

Podemos determinar a constante normalizando:

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty}\left|\psi_0\right|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\left|Ae^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\right|^2 dx = \left|A\right|^2\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}dx \tag{658}$$

Lembrando que essa é a integral gaussiana$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$:

$$1 = |A|^2 \sqrt{\frac{\pi}{\frac{m\omega}{\hbar}}} = |A|^2 \sqrt{\frac{\hbar\pi}{m\omega}} \tag{659}$$

Então:

$$A = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} \tag{660}$$

Ou seja:

$$\psi_0\left(x\right) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{661}$$

Agora para determinar a energia vamos retomar a equação de Schrödinger:

$$\hbar\omega\left(\widehat{a}_+\widehat{a}_- + \frac{1}{2}\right)\psi_0 = E_0\psi_0 \tag{662}$$

$$\hbar\omega\left(\widehat{a}_+\widehat{a}_-\psi_0 + \frac{1}{2}\psi_0\right) = E_0\psi_0 \tag{663}$$

$$\frac{\hbar\omega}{2}\psi_0 = E_0\psi_0 \tag{664}$$

$$\frac{\hbar\omega}{2} = E_0 \tag{665}$$

Onde usamos o fato de que $\widehat{a}_-\psi_0 = 0$. Então tendo o estado fundamental do oscilador quântico, só precisamos aplicar o operador de incremento de forma repetida para gerar estados excitados, aumentando a energia por $\hbar\omega$. Ou seja o estado $\psi_n\left(x\right)$ é obtido quando aplicamos o operador a_+ por n vezes no estado fundamental $\psi_0\left(x\right)$:

$$\psi_n\left(x\right) = A_n\left(a_+\right)^n\psi_0\left(x\right) \tag{666}$$

E a energia desse estado vai sofrer um incremento de $\hbar\omega$ pra cada n vez que aplicarmos o operador de incremento, partindo da energia fundamental $E_0 = \hbar\omega/2$:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{667}$$

Com esse método podemos construir todos estados estacionários do oscilador harmônico.

Exemplo: Calcule o primeiro estado excitado do oscilador harmônico. Usando a equação 604 e sendo $\widehat{p} = -i\hbar d/dx$:

$$\psi_1(x) = A_1 (a_+)^1 \psi_0(x) \tag{668}$$
$$= A_1 a_+ \psi_0(x) \tag{669}$$
$$= A_1 \left(\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (-i\widehat{p} + m\omega x) \right) \left(\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \right) \tag{670}$$
$$= A_1 \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-i\widehat{p} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} + m\omega x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \right) \tag{671}$$
$$= A_1 \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \left(-i \left[-i\hbar \frac{d}{dx} \right] e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} + m\omega x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \right) \tag{672}$$
$$= A_1 \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar \frac{d}{dx} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} + m\omega x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \right) \tag{673}$$
$$= A_1 \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \frac{e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(-\hbar \frac{d}{dx} \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right) + m\omega x \right) \tag{674}$$
$$= A_1 \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \frac{e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\hbar \frac{m\omega}{2\hbar} 2x + m\omega x \right) \tag{675}$$
$$= A_1 \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \frac{e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}}{\sqrt{2\hbar m\omega}} (m\omega x + m\omega x) \tag{676}$$
$$= A_1 \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \frac{2m\omega x}{\sqrt{2\hbar m\omega}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{677}$$
$$= A_1 \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{678}$$

Agora só precisamos normalizar.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 \, dx = |A_1|^2 \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/2} \left(\frac{2m\omega}{\hbar} \right) \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} dx \tag{679}$$

Para resolver essa integral, vamos seguir esta Solução, onde vamos usar então o seguinte truque:

$$\frac{\partial}{\partial a}e^{-ax^2} = e^{-ax^2}\frac{\partial}{\partial a}\left(-ax^2\right) = -x^2e^{-ax^2} \tag{680}$$

Então:

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2}dx = -\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\partial}{\partial a}e^{-ax^2}dx = -\frac{\partial}{\partial a}\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-ax^2}dx \tag{681}$$

E como sabemos o resultado esta integral Gaussiana:

$$I = -\frac{\partial}{\partial a}\sqrt{\frac{\pi}{a}} = -\sqrt{\pi}\frac{\partial a^{-1/2}}{\partial a} = -\sqrt{\pi}\left(-\frac{1}{2}\right)a^{-3/2} = \sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \tag{682}$$

Então:

$$1 = |A_1|^2\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/2}\left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^3}} \tag{683}$$

$$= |A_1|^2\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3/2}\left(\frac{\hbar}{m\omega}\right)^{3/2} \tag{684}$$

$$= |A_1|^2 \tag{685}$$

Então $A_1 = 1$. A normalização pode ser obtida algebricamente também. Precisamos lembrar que $\widehat{a}_+$ é proporcional a $\psi_{n\pm1}$, ou seja:

$$\widehat{a}_+\psi_n = c_n\psi_{n+1}, \quad \widehat{a}_-\psi_n = d_n\psi_{n-1} \tag{686}$$

Agora queremos obter as constantes de proporcionalidades. Vamos começar provando que para quaisquer funções $f(x)$ e $g(x)$ temos o resultado discutido no próximo exemplo.

Exemplo: Prove que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^*\left(\widehat{a}_\pm g\right)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\left(\widehat{a}_\mp f\right)^* g dx \tag{687}$$

Então lembrando que $\widehat{a}_\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\mp i\widehat{p} + m\omega x\right)$ e $\widehat{p} = -i\hbar d/dx$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^* \left(\widehat{a}_{\pm} g\right) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} f^* \left(\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\mp i\widehat{p} + m\omega x\right)\right) g dx \tag{688}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} f^* \left(\left(\mp i \left[-i\hbar \frac{d}{dx}\right] + m\omega x\right) g\right) dx \tag{689}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} f^* \left(\mp \hbar \frac{d}{dx} + m\omega x\right) g dx \tag{690}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\mp \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} f^* \frac{dg}{dx} dx + m\omega \int_{-\infty}^{+\infty} f^* x g dx\right) \tag{691}$$

Aplicando então integral por partes na primeira integral sendo $f(x) = f^*$

$$\int_a^b f(x)\, g'(x)\, dx = \left[f(x)\, g(x)\right]_a^b - \int_a^b f'(x)\, g(x)\, dx \tag{692}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^* \frac{dg}{dx} dx = \left[f^* g\right]_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{df^*}{dx} g dx \tag{693}$$

Na verdade, $f(x)$e $g(x)$ são qualquer função desde que elas vão para zero em $\pm\infty$, e sendo então que a derivada do conjugado da função é o conjugado da derivada[23] então:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^* \frac{dg}{dx} dx = -\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{df^*}{dx} g dx \tag{694}$$

Então retomando:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^* \left(\widehat{a}_{\pm} g\right) dx = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\mp \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} f^* \frac{dg}{dx} dx + m\omega \int_{-\infty}^{+\infty} f^* x g dx\right) \tag{695}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\pm \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{df^*}{dx} g dx + m\omega \int_{-\infty}^{+\infty} f^* x g dx\right) \tag{696}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(\pm \hbar \frac{d}{dx} + m\omega x\right) f^*\right] g dx \tag{697}$$

[23]Vamos considerar uma função complexa $z(x) = f(x) + ig(x)$, então:
$\frac{dz^*}{dx} = \frac{d}{dx}(f - ig) = \frac{df}{dx} - i\frac{dg}{dx} = \left(\frac{df}{dx} + i\frac{dg}{dx}\right)^* = \left(\frac{d}{dx}\left[f + ig\right]\right)^* = \left(\frac{dz}{dx}\right)^*$

E como:

$$\widehat{a}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\mp i\widehat{p} + m\omega x\right) \tag{698}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\mp i \left(-i\hbar \frac{d}{dx}\right) + m\omega x\right) \tag{699}$$

$$\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\mp \hbar \frac{d}{dx} + m\omega x\right) \tag{700}$$

Evidentemente então $\widehat{a}_{\pm} = \widehat{a}_{\pm}^{*}$. Então:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^{*} \left(\widehat{a}_{\pm} g\right) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}} \left(\pm \hbar \frac{d}{dx} + m\omega x\right) f^{*}\right] gdx \tag{701}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \widehat{a}_{\mp} f^{*} gdx \tag{702}$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} \widehat{a}_{\mp}^{*} f^{*} gdx \tag{703}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\widehat{a}_{\mp} f\right)^{*} gdx \tag{704}$$

Ou seja:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^{*} \left(\widehat{a}_{\pm} g\right) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\widehat{a}_{\mp} f\right)^{*} gdx \tag{705}$$

Veremos melhor depois, mas isso significa na linguagem da álgebra linear que $\widehat{a}_{\mp}$ é o conjugado hermitiano (ou adjunto) de $\widehat{a}_{\pm}$. Então, para uma função de onda qualquer obtida através da aplicação dos operadores escada $\psi_{\pm n} = \widehat{a}_{\pm} \psi_n$:

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \left|\psi_{\pm n}\right|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \left|\widehat{a}_{\pm} \psi_n\right|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\widehat{a}_{\pm} \psi_n\right)^{*} \left(\widehat{a}_{\pm} \psi_n\right) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\widehat{a}_{\mp} \widehat{a}_{\pm} \psi_n\right)^{*} \left(\psi_n\right) \tag{706}$$

Agora somos apresentado aos resultados:

$$\widehat{a}_{+} \widehat{a}_{-} \psi_n = n\psi_n, \qquad \widehat{a}_{-} \widehat{a}_{+} \psi_n = \left(n+1\right) \psi_n \tag{707}$$

Onde é alegado que usamos, $\hbar\omega\left(\widehat{a}_{\pm}\widehat{a}_{\mp} \pm \frac{1}{2}\right)\psi = E\psi$, $\psi_n(x) = A_n(\widehat{a}_+)^n\psi_0(x)$ e $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$. Vamos entender:

$$\hbar\omega\left(\widehat{a}_{\pm}\widehat{a}_{\mp} \pm \frac{1}{2}\right)\psi_n = E_n\psi_n \tag{708}$$

$$\hbar\omega\left(\widehat{a}_{\pm}\widehat{a}_{\mp} \pm \frac{1}{2}\right)\psi_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)\psi_n \tag{709}$$

$$\left(\widehat{a}_{\pm}\widehat{a}_{\mp} \pm \frac{1}{2}\right)\psi_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\psi_n \tag{710}$$

Então:

$$\left(\widehat{a}_+\widehat{a}_- + \frac{1}{2}\right)\psi_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\psi_n \qquad \to \widehat{a}_+\widehat{a}_-\psi_n = n\psi_n \tag{711}$$

$$\left(\widehat{a}_-\widehat{a}_+ - \frac{1}{2}\right)\psi_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\psi_n \qquad \to \widehat{a}_-\widehat{a}_+\psi_n = (n+1)\psi_n \tag{712}$$

Então retomando a integral:

$$I = \begin{cases} \int_{-\infty}^{+\infty}(\widehat{a}_-\widehat{a}_+\psi_n)^*(\psi_n)\,dx & = \int_{-\infty}^{+\infty}([n+1]\psi_n)^*(\psi_n)\,dx \\ \int_{-\infty}^{+\infty}(\widehat{a}_+\widehat{a}_-\psi_n)^*(\psi_n)\,dx & = \int_{-\infty}^{+\infty}(n\psi_n)^*(\psi_n)\,dx \end{cases} \tag{713}$$

Ou então apenas:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_{+n}|^2\,dx = (n+1)\int_{-\infty}^{+\infty}(\psi_n)^*(\psi_n)\,dx \quad = (n+1)\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_n|^2\,dx \tag{714}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_{-n}|^2\,dx = n\int_{-\infty}^{+\infty}(\psi_n)^*(\psi_n)\,dx \quad = n\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_n|^2\,dx \tag{715}$$

Evidentemente, outra forma de vermos isso é usando nossas definições iniciais $\widehat{a}_+\psi_n = c_n\psi_{n+1}$ e $\widehat{a}_-\psi_n = d_n\psi_{n-1}$. Então:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_{+n}|^2dx = \int_{-\infty}^{+\infty}|c_n\psi_{n+1}|^2\,dx = |c_n|^2\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_{n+1}|^2\,dx \tag{716}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_{-n}|^2dx = \int_{-\infty}^{+\infty}|d_n\psi_{n-1}|^2\,dx = |d_n|^2\int_{-\infty}^{+\infty}|\psi_{n-1}|^2\,dx \tag{717}$$

Ou seja:

$$(n+1)\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n|^2 \, dx = |c_n|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_{n+1}|^2 \, dx \tag{718}$$

$$n\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n|^2 dx = |d_n|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_{n+1}|^2 \, dx \tag{719}$$

Mas se todas as funções de onda (ψ_n,ψ_{n+1} e ψ_{n-1}) são normalizadas então todas integrais do seu quadrado devem ser iguais a 1.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_n|^2 \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_{n+1}|^2 \, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_{n-1}|^2 \, dx = 1 \tag{720}$$

Ou seja, escolhendo coeficientes de normalização reais:

$$(n+1) = |c_n|^2 \qquad\qquad n = |d_n|^2 \tag{721}$$

$$\sqrt{n+1} = c_n \qquad\qquad \sqrt{n} = d_n \tag{722}$$

Então, as nossas definições iniciais, temos:

$$\widehat{a}_+\psi_n = c_n\psi_{n+1} \qquad\qquad \widehat{a}_-\psi_n = d_n\psi_{n-1} \tag{723}$$

$$= \sqrt{n+1}\psi_{n+1} \qquad\qquad = \sqrt{n}\psi_{n-1} \tag{724}$$

Podemos ainda ir além, isso ficará claro depois de analisarmos os primeiros valores de n. Mas lembrando que partirmos de ψ_0, então estamos mais interessados em obter uma nova função de onda ψ_{n+1} a partir da aplicação do operador de incremento $\widehat{a}_+$ em uma função de onda de energia mais baixa. Ou seja:

$$\psi_{n+1} = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \left(\widehat{a}_+\psi_n\right) \tag{725}$$

Então partindo de ψ_0:

$$\psi_0 = \psi_0 \tag{726}$$

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{0+1}}\left(\widehat{a}_+\psi_0\right) = \widehat{a}_+\psi_0 \tag{727}$$

$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{1+1}}\left(\widehat{a}_+\psi_1\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\widehat{a}_+\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\widehat{a}_+\left(\widehat{a}_+\psi_0\right) = \frac{1}{\sqrt{2\cdot 1}}\left(\widehat{a}_+\right)^2\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2!}}\left(\widehat{a}_+\right)^2\psi_0 \tag{728}$$

$$\psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2+1}}\left(\widehat{a}_+\psi_2\right) = \frac{1}{\sqrt{3}}\widehat{a}_+\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}\widehat{a}_+\left(\frac{1}{\sqrt{2!}}\left(\widehat{a}_+\right)^2\psi_0\right) = \frac{1}{\sqrt{3!}}\left(\widehat{a}_+\right)^3\psi_0 \tag{729}$$

Então:

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\widehat{a}_+\right)^n\psi_0 \tag{730}$$

Lembrando que $\psi_0\left(x\right) = \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}$ foi calculado, então, de forma mais completa:

$$\psi_n\left(x\right) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}\left(\widehat{a}_+\right)^n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{731}$$

Ou ainda:

$$\psi_n\left(x\right) = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(\frac{m\omega}{\hbar\pi}\right)^{1/4}\left(\frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\right)^n e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{732}$$

Temos novamente um caso em que os estados são ortogonais, ou seja:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_m^*\psi_n dx = \delta_{mn} \tag{733}$$

Primeiro usando $\widehat{a}_+\widehat{a}_-\psi_n = n\psi_n$ então:

$$\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*\left(\widehat{a}_+\widehat{a}_-\right)\psi_n dx = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*\left(\widehat{a}\widehat{a}_-\right)\psi_n dx = \int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^* n\psi_n dx = n\int_{-\infty}^{\infty}\psi_m^*\psi_n dx \tag{734}$$

Mas usando :$\int_{-\infty}^{+\infty} f^*\left(\widehat{a}_\pm g\right)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}\left(\widehat{a}_\mp f\right)^* g dx$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \left(\widehat{a}_+\widehat{a}_-\right) \psi_n dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \left(\widehat{a}_+ \left[\widehat{a}_-\psi_n\right]\right) dx \tag{735}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\widehat{a}_-\psi_m\right)^* \left(\widehat{a}_-\psi_n\right) dx \tag{736}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\widehat{a}_+\widehat{a}_-\psi_m\right)^* \psi_n dx \tag{737}$$

Ou seja:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \left(\widehat{a}_+\widehat{a}_-\right) \psi_n dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(m\psi_m\right)^* \psi_n dx = m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx \tag{738}$$

Evidentemente como 734 e 738 devem ser iguais:

$$n \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx = m \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx \tag{739}$$

$$0 = (m-n) \int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx \tag{740}$$

Então se $m \neq n$ temos $\int_{-\infty}^{\infty} \psi_m^* \psi_n dx = 0$. Dessa forma provamos a ortogonalidade. E se ortonormal então, quando $m = n$,temos apenas:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m^* \psi_n dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \left|\psi_n\right|^2 dx = 1 \tag{741}$$

Que é essencialmente o critério de normalização da função de onda já discutido. A ortonormalidade nos permite usar novamente o truque de Fourier para avaliar os coeficientes c_n e $\left|c_n\right|^2$ sempre será a probabilidade que a medição d energia nos retorne um valor E_n.

Exemplo: Encontre o valor esperado da energia potencial no enésimo estado do oscilador harmônico. A anergia potencial[24] esperada do oscilador harmônico é dado por:

$$\langle V \rangle = \left\langle \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^* \left(\frac{1}{2} m\omega^2 x^2\right) \psi_n dx \tag{742}$$

[24]Lembrando que $F = -\frac{dV}{dx}$ ou ainda $\boldsymbol{F} = -\nabla V$

Ou apenas:

$$\langle V\rangle = \frac{1}{2}m\omega^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^* x^2\psi_n dx \tag{743}$$

Mas agora podemos usar um truque lembrando que na equação 604, temos: $\widehat{a}_\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\mp i\widehat{p} + m\omega x\right)$

Então:

$$\begin{aligned}
\widehat{a}_+ + \widehat{a}_- &= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-i\widehat{p} + m\omega x\right) + \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(+i\widehat{p} + m\omega x\right) && (744)\\
&= \frac{2m\omega}{\sqrt{2\hbar m\omega}}x && (745)\\
&= \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x && (746)
\end{aligned}$$

$$\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\widehat{a}_+ + \widehat{a}_-\right) = x \tag{747}$$

De modo análogo poderíamos calcular que:

$$\widehat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(\widehat{a}_+ - \widehat{a}_-\right) \tag{748}$$

Fazendo então:

$$\begin{aligned}
x^2 &= \left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[\widehat{a}_+ + \widehat{a}_-\right]\right)\left(\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[\widehat{a}_+ + \widehat{a}_-\right]\right) && (749)\\
&= \frac{\hbar}{2m\omega}\left(\widehat{a}_+^2 + \widehat{a}_+\widehat{a}_- + \widehat{a}_+\widehat{a}_- + \widehat{a}_-^2\right) && (750)
\end{aligned}$$

E como:

$$\begin{aligned}
\left(\widehat{a}_+^2 + \widehat{a}_-^2\right)\psi_n &= \widehat{a}_+\widehat{a}_+\psi_n + \widehat{a}_-\widehat{a}_-\psi_n && (751)\\
&= \widehat{a}_+ c_n\psi_{n+1} + \widehat{a}_- d_n\psi_{n-1} && (752)\\
&= c_n\widehat{a}_+\psi_{n+1} + d_n\widehat{a}_-\psi_{n-1} && (753)\\
&= c_n c_{n+1}\psi_{n+2} + d_n d_{n-1}\psi_{n-2} && (754)\\
&= A\psi_{n+2} + B\psi_{n-2} && (755)
\end{aligned}$$

Pela ortogonalidade temos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\left(\widehat{a}_+^2+\widehat{a}_-^2\right)\psi_n dx=\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\left(A\psi_{n+2}+B\psi_{n-2}\right)dx \tag{756}$$

$$=A\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\psi_{n+2}dx+BA\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\psi_{n-2}dx \tag{757}$$

$$=A\delta_{n,n+1}+B\delta_{n,n-2} \tag{758}$$

$$=0 \tag{759}$$

Dessa forma ficamos apenas com:

$$\langle V\rangle=\frac{1}{2}m\omega^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*x^2\psi_n dx \tag{760}$$

$$=\frac{1}{2}m\omega^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\left[\frac{\hbar}{2m\omega}\left(\widehat{a}_+^2+\widehat{a}_+\widehat{a}_-+\widehat{a}_+\widehat{a}_-+\widehat{a}_-^2\right)\right]\psi_n dx \tag{761}$$

$$=\frac{\hbar\omega}{4}\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\left(\widehat{a}_+^2+\widehat{a}_-^2\right)\psi_n dx+\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\left(\widehat{a}_+\widehat{a}_-+\widehat{a}_+\widehat{a}_-\right)\psi_n dx\right] \tag{762}$$

$$=\frac{\hbar\omega}{4}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\left(\widehat{a}_+\widehat{a}_-+\widehat{a}_+\widehat{a}_-\right)\psi_n dx \tag{763}$$

$$=\frac{\hbar\omega}{4}\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\left(\widehat{a}_+\widehat{a}_-\right)\psi_n dx+\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\left(\widehat{a}_+\widehat{a}_-x\right)dx\right] \tag{764}$$

E como em 707 vimos que $\widehat{a}_+\widehat{a}_-\psi_n=n\psi_n$ e $\widehat{a}_-\widehat{a}_+\psi_n=(n+1)\,\psi_n$, então:

$$\langle V\rangle=\frac{\hbar\omega}{4}\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\left(\widehat{a}_+\widehat{a}_-\right)\psi_n dx+\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\left(\widehat{a}_+\widehat{a}_-x\right)dx\right] \tag{765}$$

$$=\frac{\hbar\omega}{4}\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*n\psi_n dx+\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\left(n+1\right)\psi_n dx\right] \tag{766}$$

$$=\frac{\hbar\omega}{4}\left[n\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\psi_n dx+(n+1)\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\psi_n dx\right] \tag{767}$$

$$=\frac{\hbar\omega}{4}\left[(n+n+1)\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\psi_n dx\right] \tag{768}$$

$$=\frac{\hbar\omega}{4}\left(2n+1\right)\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*\psi_n dx \tag{769}$$

E pela normalização da função de onda, ficamos então com:

$$\langle V\rangle = \frac{\hbar\omega}{4}(2n+1) = \frac{\hbar\omega}{2}\left(n+\frac{1}{2}\right) \tag{770}$$

Ou seja, o valor esperado da energia potencial é metade da energia total (a outra metade é energia cinética).

Exemplo: a) Construa $\psi_2(x)$.

b) Verifique a ortogonalidade de ψ_0, ψ_1 e ψ_2 por integração explícita.

Partindo de:

$$\widehat{a}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp i\widehat{p} + m\omega x) \quad \psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)$$

E sendo $\widehat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$, então :

$$\widehat{a}_{+}\psi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(-i\widehat{p} + m\omega x)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \tag{771}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-i\left[-i\hbar\frac{d}{dx}\right] + m\omega x\right)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \tag{772}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(-\hbar\frac{d}{dx}\left(\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)\right) + m\omega x\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)\right) \tag{773}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(-\hbar\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)\left(-\frac{2m\omega x}{2\hbar}\right) + m\omega x\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)\right) \tag{774}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)m\omega x + m\omega x\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)\right) \tag{775}$$

$$= \frac{2m\omega}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)x \tag{776}$$

$$= \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)x \tag{777}$$

Aplicando o operador escada novamente:

$$(\widehat{a}_+)^2\,\psi_0 = \widehat{a}_+\,(\widehat{a}_+\psi_0) \tag{778}$$
$$= \widehat{a}_+\left(\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)x\right) \tag{779}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}\left(-\hbar\frac{d}{dx}+m\omega x\right)\left(\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)x\right) \tag{780}$$
$$= \sqrt{\frac{2m\omega}{2\hbar^2 m\omega}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(-\hbar\frac{d}{dx}\left[e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}x\right]+m\omega x e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}x\right) \tag{781}$$
$$= \frac{1}{\hbar}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(-\hbar\left[e^{-\frac{m\omega}{2\pi\hbar}x^2}\frac{d}{dx}x+x\frac{d}{dx}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\right]+m\omega x^2 e^{-\frac{m\omega}{2\pi\hbar}x^2}\right) \tag{782}$$
$$= \frac{1}{\hbar}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(-\hbar\left[e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}+xe^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\left(-\frac{2xm\omega}{2\hbar}x\right)\right]+m\omega x^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\right) \tag{783}$$
$$= \frac{1}{\hbar}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(-\hbar e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}+e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\left(x^2 m\omega\right)+m\omega x^2 e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\right) \tag{784}$$
$$= \frac{1}{\hbar}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(-\hbar+x^2 m\omega+m\omega x^2\right)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{785}$$
$$= \frac{1}{\hbar}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(2m\omega x^2-\hbar\right)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{786}$$
$$= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{2m\omega}{\hbar}x^2-1\right)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{787}$$

E como vimos que:

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}\,(\widehat{a}_+)^n\,\psi_0 \tag{788}$$
$$\psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2!}}\,(\widehat{a}_+)^2\,\psi_0 \tag{789}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{2m\omega}{\hbar}x^2-1\right)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{790}$$

Também:

$$\psi_1 = \frac{1}{\sqrt{1!}} (\widehat{a}_+)^1 \psi_0 \tag{791}$$

$$= \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) x \tag{792}$$

Então agora queremos verificar a ortogonalidade. Para $f(x) = \psi_0^* \psi_1$:

$$\psi_0^*\psi_1 = \left(\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)\right) \left(\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) x\right) \tag{793}$$

$$f(x) = \left[\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\right] \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 - \frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) x \tag{794}$$

$$= A \exp\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) x \tag{795}$$

Podemos ver que é uma função ímpar:

$$f(-x) = A e^{\left(-\frac{m\omega}{\hbar}(-x)^2\right)} (-x) = -A e^{\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)} x = -f(x) \tag{796}$$

Logo:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0^* \psi_1 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, dx = 0 \tag{797}$$

Vamos ter um resultado análogo para $\psi_2^* \psi_1^*$:

$$\psi_2^*\psi_1 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \left(\frac{2m\omega}{\hbar}x^2 - 1\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\right) \left(\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} x\right) \tag{798}$$

$$f(x) = \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\right] \left(\frac{2m\omega}{\hbar}x^2 - 1\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2 - \frac{m\omega}{2\hbar}x^2} x \tag{799}$$

$$= A \left(\frac{2m\omega}{\hbar}x^2 - 1\right) e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^2} x \tag{800}$$

Temos novamente uma função ímpar:

$$f\left(-x\right)=A\left(\frac{2m\omega}{\hbar}\left(-x\right)^{2}-1\right)e^{-\frac{m\omega}{\hbar}\left(-x\right)^{2}}\left(-x\right)=-A\left(\frac{2m\omega}{\hbar}x^{2}-1\right)e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^{2}}x=-f\left(x\right)$$

Logo novamente:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_{2}^{*}\psi_{1}dx=\int_{-\infty}^{+\infty}f\left(x\right)dx=0 \tag{801}$$

Isso muda para $\psi_2^*\psi_0$, agora teremos uma função par. Então precisamos calcular explícitamente.

$$\begin{aligned}
\psi_{2}^{*}\psi_{0} &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left(\frac{2m\omega}{\hbar}x^{2}-1\right)e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^{2}}\right)\left(\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^{2}}\right) && (802)\\
&= A\left(\frac{2m\omega}{\hbar}x^{2}-1\right)e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^{2}} && (803)\\
&= A\frac{2m\omega}{\hbar}x^{2}e^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^{2}}-Ae^{-\frac{m\omega}{\hbar}x^{2}} && (804)\\
&= Bx^{2}e^{-ax^{2}}-Ae^{-ax^{2}} && (805)
\end{aligned}$$

Integrando temos então:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_{2}^{*}\psi_{0}dx=B\int_{-\infty}^{+\infty}x^{2}e^{-ax^{2}}dx-A\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-ax^{2}}dx \tag{806}$$

Estas duas integrais já foram resolvidas. $\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-ax^2}dx=\sqrt{\frac{\pi}{a}}$ e $\int_{-\infty}^{+\infty}x^2e^{-ax^2}dx=-\sqrt{\frac{\pi}{4a^3}}$, então, e sendo $A=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}$, $B=A\frac{2m\omega}{\hbar}$ e $a=\frac{m\omega}{\hbar}$ então:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_{2}^{*}\psi_{0}dx &= B\int_{-\infty}^{+\infty}x^{2}e^{-\alpha x^{2}}dx-A\int_{-\infty}^{+\infty}e^{-\alpha x^{2}}dx && (807)\\
&= B\left(-\sqrt{\frac{\pi}{4a^{3}}}\right)-A\sqrt{\frac{\pi}{a}} && (808)\\
&= A\frac{2m\omega}{\hbar}\left(-\sqrt{\frac{\pi}{4\left(\frac{m\omega}{\hbar}\right)^{3}}}\right)-\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/2}\sqrt{\frac{\pi}{\frac{m\omega}{\hbar}}} && (809)
\end{aligned}$$

Exemplo: **a) Calcule $\langle x\rangle$, $\langle p\rangle$, $\langle x^2\rangle$ e $\langle p^2\rangle$ para os estados ψ_0 e ψ_1 por integração explícita.**

b) Verifique o princípio da incerteza para estes estados.

c) Calcule $\langle T\rangle$ e $\langle V\rangle$ para estes estado. A soma deles é o esperado?

Exemplo: **Encontre $\langle x\rangle$, $\langle p\rangle$, $\langle x^2\rangle$ e $\langle p^2\rangle$ para o enésimo estado estacionário usando o método dos operadores escada.Cheque se o princípio da incerteza é satisfeito**

2.3.2 Método analítico

2.4 Partícula livre

Exemplo: **Exemplo**

Exemplo: **Problema**

Exemplo Problema

2.5 Potencial função de delta

Exemplo: **problema**

Exemplo: **problema**

Exemplo: **problema**

2.6 Poço quadrado finito

Exemplo: **problema**

Exemplo: **problema**

3 Formalismo

22

4 3 dimensões

25

5 Particulas identicas

4

6 Simetria e conservação

20