UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA – UDESC
CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS – CCT
DEPARTAMENTO DE FÍSICA – DFIS
MECÂNICA QUÂNTICA – I

---

**Aluno(a):** Rodrigo Ribamar Silva do Nascimento

**Professor(a):** Bruno Duarte da Silva Moreira **Capítulo(s) Ref.:** I/II

**Lista de Exercícios:** 001 **Data:** 30/03/2023 **Fase:** LEF102-08U

---

# PRIMEIRA AVALIAÇÃO

**Resumo:**

**Palavras chave:** Equação de Schröedinger; Operadores; Oscilador Harmônico; Potencial Delta.

# Sumário


**Problema 01** . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . **1**
**Problema 02** . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . **1**
**Problema 03** . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . **3**
**Problema 04** . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . **7**
**Problema 05** . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . **7**
**Problema 06** . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . **8**
**Problema 07** . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . **8**
**Problema 08** . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . . **9**

**Problema 1.** Considere a função de onda

$$\Psi(x,t) = A\mathrm{e}^{-\lambda|x|}\mathrm{e}^{-i\omega t} \tag{1}$$

onde $A$, $\lambda$ e $\omega$ são constantes reais positivas

a) Normalize $\Psi$

b) Determine os valores médios $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$

c) Encontre o desvio padrão de $x$. Esboce o gráfico de $|\Psi|^2$ como uma função de $x$, e marque os pontos $(\langle x \rangle + \delta)$ e $(\langle x \rangle - \delta)$ para representar em que sentido de $\sigma$ representa o "espalhamento" da distribuição em $x$. Qual a probabilidade de que a partícula seja encontrada fora deste range?

**Solução 1.** a) Dado que a normalização da função de onda $\Psi(x,t)$ é obtida por

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

de modo que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |A\mathrm{e}^{-\lambda|x|}\mathrm{e}^{-i\omega t}A\mathrm{e}^{-\lambda|x|}\mathrm{e}^{+i\omega t}|dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} A^2\mathrm{e}^{-2\lambda|x|}dx = 1 \tag{3}$$

como a $\psi(x)$ é uma função par, podemos fazer

$$2A^2 \int_{0}^{+\infty} \mathrm{e}^{-2\lambda|x|}dx = 1$$

$$2A^2 \left( -\frac{1}{2\lambda}\mathrm{e}^{-2\lambda x}\Big|_0^{+\infty} \right) = 1$$

$$A^2 = \lambda$$

$$A = \sqrt{\lambda} \tag{4}$$

ou seja

$$\boxed{\Psi(x,t) = \psi(x)\mathrm{e}^{-i\omega t}, \quad \text{com } \psi(x) = \sqrt{\lambda}\mathrm{e}^{-\lambda|x|}}$$

b)

---

**Problema 2.** O Teorema de Ehrenfest

a) Mostre que, para uma função de $x$ qualquer, vale a seguinte relação de comutação:

$$[\hat{p}, f(x)] = -i\hbar \frac{\partial f(x)}{\partial x} \tag{5}$$

b) Utilize o resultado do item (a), o fato que o operador momento comuta com funções apenas do momento e a evolução temporal do valor médio dos operadores

$$\frac{d\langle Q\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left\langle \left[\hat{Q}, \hat{H}\right]\right\rangle \tag{6}$$

e obtenha o Teorema de Ehrenfest

**Solução 2.** a) Façamos o comutador atuar em uma função $\psi(x)$, de modo que

$$\begin{aligned}
[\hat{p}, f(x)]\,\psi(x) &= \hat{p}f(x)\psi(x) - f(x)\hat{p}\psi(x) \\
&= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\left[f(x)\psi(x)\right] + i\hbar f(x)\frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \\
&= (-i\hbar)\left[\frac{\partial f(x)}{\partial x}\psi(x) + f(x)\frac{\partial \psi(x)}{\partial x} - f(x)\frac{\partial \psi(x)}{\partial x}\right] \\
&= -i\hbar \frac{\partial f(x)}{\partial x}\psi(x)
\end{aligned} \tag{7}$$

o que resulta em

$$\boxed{[\hat{p}, f(x)] = -i\hbar \frac{\partial f(x)}{\partial x}} \tag{8}$$

□

b) Dado que

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle Q\rangle}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}\left\langle \left[\hat{Q}, \hat{H}\right]\right\rangle \\
&= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left[\hat{Q}, \hat{H}\right] \psi dx
\end{aligned} \tag{9}$$

ou seja

$$\begin{aligned}
\frac{d\langle Q\rangle}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(\hat{Q}\hat{H} - \hat{H}\hat{Q}\right)\psi dx \\
&= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{Q}\hat{H}\psi dx - \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{H}\hat{Q}\psi dx \\
&= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{Q}\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V\right)\psi dx - \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V\right)\hat{Q}\psi dx \\
&= \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{1}{2m}\left(\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{Q}\hat{p}^2\psi dx - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p}^2\hat{Q}\psi dx\right) + \right. \\
&\qquad \left. + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{Q}V\psi dx - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* V\hat{Q}\psi dx\right] \\
&= \frac{1}{2i\hbar m}\int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi^* \hat{Q}\hat{p}^2\psi - \psi^* \hat{p}^2\hat{Q}\psi\right) dx + \\
&\qquad + \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \left(\psi^* \hat{Q}V\psi - \psi^* V\hat{Q}\psi\right) dx \\
&= \frac{1}{2i\hbar m}\left\langle\left[\hat{Q},\hat{p}^2\right]\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{Q},V\right]\right\rangle
\end{aligned} \tag{10}$$

Agora, desde que $\hat{Q}$ possa ser escrito como $\hat{Q} = \hat{p}$, devemos ter

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{1}{2i\hbar m}\left\langle\left[\hat{p},\hat{p}^2\right]\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\left\langle[\hat{p},V]\right\rangle \tag{11}$$

se o operador $\hat{p}$ comuta com funções do momento então $[\hat{p},\hat{p}^2] = 0$, além do mais se $V = V(x)$, já vimos que

$$[\hat{p},V(x)] = -i\hbar\frac{\partial V(x)}{\partial x} \tag{12}$$

e portanto,

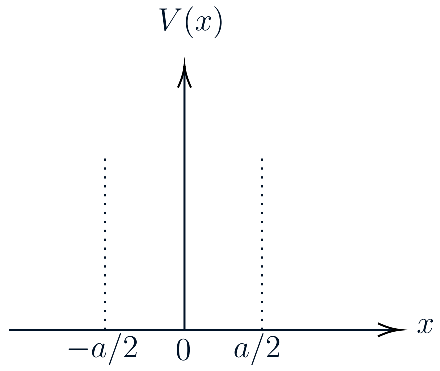
$$\begin{aligned}
\frac{d\langle p\rangle}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}\left\langle[\hat{p},V]\right\rangle \\
\frac{d\langle p\rangle}{dt} &= \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle
\end{aligned} \tag{13}$$

$$\boxed{\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -\left\langle\nabla V\right\rangle} \tag{14}$$

□

**Problema 3.** Em aula resolvemos o problema do poço infinito com centro deslocado da origem. Resolva o poço infinito para o caso onde o centro do poço coincide com a origem, isto é:

$$V(x) = \begin{cases} \infty, & \text{se } x < -a/2 \\ 0, & \text{se } -a/2 \leq x \leq a/2 \\ \infty, & \text{se } x > a/2 \end{cases}$$




Para este problema encontre as autofunções $\psi_n(x)$ e os autovalores de energia $E_n$.

**Solução 3.** A equação de Schrödinger para pontos no interior do poço é dada por

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = E\psi(x) \tag{15}$$

manipulando a equação (15) obtemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} &= -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) \\ \frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} &= -k^2\psi(x) \end{aligned} \tag{16}$$

cujo a solução geral é dada por

$$\psi(x)A\,\mathrm{sen}(kx) + B\cos(kx), \quad \text{com } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

da condição de contorno sabemos que

$$\psi(a/2) = A\,\mathrm{sen}(ka/2) + B\cos(ka/2) = 0 \tag{17a}$$

$$\psi(-a/2) = A\,\mathrm{sen}(-ka/2) + B\cos(-ka/2) = 0 \tag{17b}$$

O par de equações descrito pelas (17a) e (17b), formam um sistema de equações. A função *seno* é uma função *ímpar* o que equivale a dizer que $\mathrm{sen}(-x) = -\mathrm{sen}(x)$, já a função *cosseno* é uma função *par* isto é $\cos(-x) = \cos(x)$, logo

$$\begin{aligned} A \operatorname{sen}(ka/2) + B\cos(ka/2) = 0 \\ -A \operatorname{sen}(ka/2) + B\cos(ka/2) = 0 \end{aligned} \tag{18}$$

resolvendo o sistema para o *cosseno*, obtemos

$$2B\cos(ka/2) = 0 \tag{19}$$

$B$ não pode ser nulo, do contrário não há função de onda no intervalo de interesse, portanto

$$\cos\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \iff \frac{ka}{2} = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \ldots \tag{20}$$

por outro lado, se resolvermos o sistema para o *seno*, teremos

$$2A \operatorname{sen}(ka/2) = 0 \tag{21}$$

tal como anteriormente $A$ é não nulo de modo que

$$\operatorname{sen}\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \iff \frac{ka}{2} = \pi, 2\pi, 3\pi, \ldots \tag{22}$$

Há portanto duas soluções possíveis para a $\psi(x)$

$$\psi_n(x) = \begin{cases} A_n \operatorname{sen}(k_n x) & \text{se, } n = 2, 4, 6, ...(\text{par}) \\ B_n \cos(k_n x) & \text{se, } n = 1, 3, 5, ...(\text{ímpar}) \end{cases} \tag{23}$$

e

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \tag{24}$$

As constantes $A_n$ e $B_n$ são obtidas impondo a condição de normalização das funções $\psi(x)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n^*(x)\psi_n(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1 \tag{25}$$

$$\tag{26}$$

para $n = 2, 4, 6, ...$

$$\int_{-\infty}^{-\frac{a}{2}} |\cancelto{0}{\psi_n(x)}|^2 dx + \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} |\psi_n(x)|^2 dx + \int_{\frac{a}{2}}^{\infty} |\cancelto{0}{\psi_n(x)}|^2 dx = 1$$

$$\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} A_n^2 \operatorname{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = 1 \tag{27}$$

$$A_n^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \operatorname{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = 1$$

fazendo a mudança de variável $u = n\pi x/2$, $du = n\pi dx/2$, quando $x = -\pi/2$ então $u = -n\pi/2$, e quando $x = \pi/2$, $u = n\pi/2$, dessa forma o resultado da integral acima fica

$$A_n^2 \left[\frac{a}{n\pi}\right] \left[ \left(\frac{n\pi}{2}\right) - \cancelto{0}{\frac{1}{2}\left(\frac{\sin(2u)}{2}\right)\Bigg|_{-n\pi/2}^{n\pi/2}} \right] = 1 \tag{28}$$

o que simplificando da

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \tag{29}$$

A solução para $n = 1, 3, 5, ...$ é similar, mas agora a função que devemos integrar é

$$B_n^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \cos^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = 1 \tag{30}$$

procedendo de forma análoga obtemos

$$B_n^2 \left[\frac{a}{n\pi}\right] \left[ \left(\frac{n\pi}{2}\right) + \cancelto{0}{\frac{1}{2}\left(\frac{\sin(2u)}{2}\right)\Bigg|_{-n\pi/2}^{n\pi/2}} \right] = 1 \tag{31}$$

ou seja

$$B_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \tag{32}$$

completando a solução para as autofunções $\psi_n(x)$

$$\boxed{\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) & \text{se, } n = 2, 4, 6, ...\text{(par)} \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) & \text{se, } n = 1, 3, 5, ...\text{(ímpar)} \end{cases}} \tag{33}$$

e

$$\boxed{k_n = \frac{n\pi}{a}} \tag{34}$$

É de se esperar que os autovalores de energia associados $E_n$, sejam os mesmos encontrados para o poço infinito com centro deslocado da origem, e de fato, em termos dos $k_n$, teremos

$$k_n = \frac{n\pi}{a} = \sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}} \tag{35}$$

$$\boxed{E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2} n^2} \tag{36}$$

**Problema 4.** Para o problema do poço quadrado infinito calculado em aula (poço assimétrico em torno da origem), calcule $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p \rangle$ e $\langle p^2 \rangle$ e use-os para calcular as incertezas $\sigma_x$ e $\sigma_p$ para o n-ésimo estado estacionário do poço infinito. Mostre que o princípio de incerteza está sendo satisfeito. qual estado $n$ fica mais próximo do limite inferior do princípio de incerteza?

**Solução 4.** A solução da parte espacial da função de onda encontrada em aula é a seguinte

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad \text{com } n \in \mathbb{N}^*, \ 0 \leq x \leq a$$

logo, teremos

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_0^a \psi^* x \psi dx \\ &= \int_0^a x|\psi|^2 dx \\ &= \int_0^a x \left[\sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right]^2 dx \\ &= \frac{2}{a} \int_0^a x \operatorname{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \end{aligned} \tag{37}$$

fazendo a substituição

$$u = \frac{n\pi x}{a} \tag{38a}$$

$$du = \frac{n\pi}{a} dx \tag{38b}$$

e notando que

$$x \to 0 \implies u \to 0 \tag{39a}$$

$$x \to a \implies u \to n\pi \tag{39b}$$

a integral fica

$$\langle x \rangle = \frac{2}{a}$$

**Problema 5.** Uma partícula num poço quadrado infinito tem como função de onda inicial

$$\Psi(x,0) = \begin{cases} Ax, & \text{se } 0 \leq x \leq \dfrac{a}{2} \\ A\left(a-x\right), & \text{se } \dfrac{a}{2} \leq x \leq a \end{cases}$$

a) Esboce o gráfico de $\Psi(x,0)$ e determine a constante de normalização $A$

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

c) Qual é a probabilidade de que uma medida da energia retorne o valor $E_1$

d) Encontre o valor médio da energia

**Solução 5.**

---

**Problema 6.** Para um oscilador harmônico, pelo método algébrico:

a) Mostre que

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = 1 \tag{40}$$

b) Utilizando a equação

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\hat{a}_+\right)^n \psi_0 \tag{41}$$

e a expressão do operador $\hat{a}^+$ em termos da derivada em relação à posição, construa $\psi_2(x)$.

c) Escreva os operadores posição e momento em termos dos operadores escada $\hat{a}_\pm$ e calcule os valores médios de $x$, $p$, $x^2$ e $p^2$ para o estado fundamental $\psi_0(x)$ e verifique se o princípio de incerteza está sendo respeitado.

**Solução 6.**

---

**Problema 7.** Para o oscilador harmônico pelo método analítico:

a) Partindo da Equação de Schrödinger para o oscilador harmônico (primeira equação do slide 4) e usando a variável adimensional

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \tag{42}$$

Mostre que a equação pode ser escrita como

$$\frac{d^2\phi(\xi)}{d\xi^2} = \left(\xi^2 - K\right)\phi(\xi), \quad \text{com } K = \frac{2E}{\hbar\omega}$$

b) Substitua na equação acima a proposta de solução

$$\phi(\xi) = h(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2} \tag{43}$$

e obtenha a equação diferencial para $h(\xi)$ (equação mostrada no exercício seguinte). Utilize o método das séries de potências para a equação diferencial de $h(\xi)$

$$\frac{d^2h(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh(\xi)}{d\xi} + (K-1)\,h(\xi) = 0 \tag{44}$$

e obtenha a relação de recorrência entre os coeficientes.

**Solução 7.**