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:** 24/04/2023 **Fase:** LEF102-08U

PRIMEIRA AVALIAÇÃO

Resumo:

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

Sumário

Problema 1. Considere a função de onda

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

onde A, λ e ω são constantes reais positivas

a) Normalize Ψ

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 σ 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

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

a $\psi(x)$ é uma função par $\psi(x) = \psi(-x)$ e o intervalo de integração é simétrico em x, o que nos permite 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) Calculando $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)|\, dx = \int_{-\infty}^{\infty} x|\psi(x)|^2\, dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} x\lambda\mathrm{e}^{-2\lambda x}\, dx\end{aligned} \tag{5}$$

neste caso a função $\psi(x)$ é ímpar $\psi(-x) = -\psi(x)$, o que num intervalo de integração simétrico com relação a origem, retorna zero, ou seja

$$\boxed{\langle x\rangle = 0} \tag{6}$$

Para $\langle x^2\rangle$, tem-se que

$$\begin{aligned}\langle x^2\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2|\psi(x)|^2\,dx \\ &= \lambda\int_{-\infty}^{\infty} x^2\mathrm{e}^{-2\lambda x}\,dx\end{aligned} \tag{7}$$

$\psi(x)$ é novamente par, então

$$\langle x^2\rangle = 2\lambda\int_{0}^{\infty} x^2\mathrm{e}^{-2\lambda x}\,dx \tag{8}$$

$$\tag{9}$$

usando integração por partes duas vezes, chegamos ao seguinte resultado

$$\begin{aligned}\langle x^2\rangle &= -\left[\frac{x^2}{\mathrm{e}^{2\lambda x}}\bigg|_0^\infty + \frac{x}{\lambda\mathrm{e}^{2\lambda x}}\bigg|_0^\infty + \frac{2}{2\lambda\mathrm{e}^{2\lambda x}}\bigg|_0^\infty\right] \implies \left[-\frac{\infty}{\infty}\right] \\ &= -\lim_{x\to\infty}\frac{x^2}{\mathrm{e}^{2\lambda x}} \implies \left[-\frac{\infty}{\infty}\right] \\ &\overset{H}{=} -\lim_{x\to\infty}\frac{2x}{2\lambda\mathrm{e}^{2\lambda x}} \implies \left[-\frac{\infty}{\infty}\right] \\ &\overset{H}{=} -\lim_{x\to\infty}\frac{2}{4\lambda^2\mathrm{e}^{2\lambda x}} \implies [0]\therefore \\ &= -\left[\lim_{b\to\infty}\frac{2}{4\lambda^2\mathrm{e}^{2\lambda x}}\bigg|_0^b\right] \\ &= -\left(0 - \frac{1}{2\lambda^2}\right)\end{aligned} \tag{10}$$

$$\boxed{\langle x^2\rangle = \frac{1}{2\lambda^2}} \tag{11}$$

c) Calculando σ

$$\begin{aligned}\sigma &= \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} \\ &= \sqrt{\frac{1}{2\lambda^2} - 0} \\ &= \frac{1}{\lambda\sqrt{2}}\end{aligned} \tag{12}$$

$$\boxed{\sigma = \frac{\sqrt{2}}{2\lambda}} \tag{13}$$

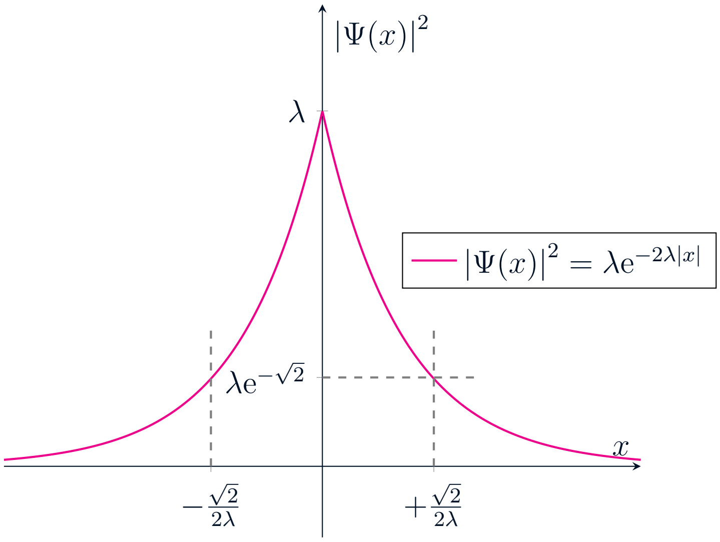


Figura 1 – Região de probabilidade de encontrar a partícula entre os valores do desvio padrão $\pm\sigma$

Para valores de $x \in (-\infty, -\sigma]$ e $x \in [+\sigma, +\infty)$, tem-se que

$$\begin{aligned} 2\lambda \int_{\sigma}^{\infty} e^{-2\lambda|x|}\, dx &= 2\lambda \left[-\frac{1}{2\lambda} e^{-2\lambda x} \Big|_{\sigma}^{\infty} \right] \\ &= 0 + \frac{1}{e^{2\lambda\sigma}} \\ &= \frac{1}{e^{\sqrt{2}}} \end{aligned} \tag{14}$$

Problema 2. O Teorema de Ehrenfest

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

$$[\hat{p}, f(x)] = -i\hbar \frac{\partial f(x)}{\partial x} \tag{15}$$

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

$$\frac{d\langle Q\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left\langle \left[\hat{Q}, \hat{H}\right] \right\rangle \tag{16}$$

e obtenha o Teorema de Ehrenfest

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

$$\begin{aligned}[\hat{p}, f(x)]\,\psi(x) &= \hat{p}f(x)\psi(x) - f(x)\hat{p}\psi(x)\\ &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\left[f(x)\psi(x)\right] + i\hbar f(x)\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\\ &= (-i\hbar)\left[\frac{\partial f(x)}{\partial x}\psi(x) + f(x)\frac{\partial\psi(x)}{\partial x} - f(x)\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\right]\\ &= -i\hbar\frac{\partial f(x)}{\partial x}\psi(x) \end{aligned} \tag{17}$$

o que resulta em

$$\boxed{[\hat{p}, f(x)] = -i\hbar\frac{\partial f(x)}{\partial x}} \tag{18}$$

□

b) Dado que

$$\begin{aligned}\frac{d\langle Q\rangle}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{Q},\hat{H}\right]\right\rangle\\ &= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\left[\hat{Q},\hat{H}\right]\psi dx\end{aligned} \tag{19}$$

ou seja

$$\begin{aligned}\frac{d\langle Q\rangle}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\left(\hat{Q}\hat{H}-\hat{H}\hat{Q}\right)\psi dx\\ &= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\hat{Q}\hat{H}\psi dx - \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\hat{H}\hat{Q}\psi dx\\ &= \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\hat{Q}\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}+V\right)\psi dx - \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}+V\right)\hat{Q}\psi dx\\ &= \frac{1}{i\hbar}\left[\frac{1}{2m}\left(\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\hat{Q}\hat{p}^2\psi dx - \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\hat{p}^2\hat{Q}\psi dx\right)+\right.\\ &\qquad\left.+\int_{-\infty}^{\infty}\psi^*\hat{Q}V\psi dx - \int_{-\infty}^{\infty}\psi^*V\hat{Q}\psi dx\right]\\ &= \frac{1}{2i\hbar m}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\psi^*\hat{Q}\hat{p}^2\psi - \psi^*\hat{p}^2\hat{Q}\psi\right)dx+\\ &\qquad+\frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\psi^*\hat{Q}V\psi - \psi^*V\hat{Q}\psi\right)dx\\ &= \frac{1}{2i\hbar m}\left\langle\left[\hat{Q},\hat{p}^2\right]\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{Q},V\right]\right\rangle\end{aligned} \tag{20}$$

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

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = \frac{1}{2i\hbar m}\left\langle\left[\hat{p},\hat{p}^2\right]\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\left\langle[\hat{p},V]\right\rangle \tag{21}$$

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

$$[\hat{p}, V(x)] = -i\hbar \frac{\partial V(x)}{\partial x} \tag{22}$$

e portanto,

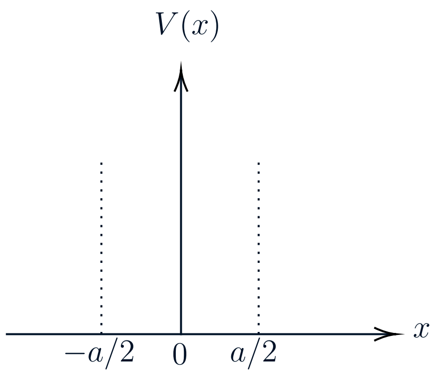
$$\begin{aligned} \frac{d\langle p\rangle}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}\Big\langle [\hat{p}, V] \Big\rangle \\ \frac{d\langle p\rangle}{dt} &= \Big\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \Big\rangle \end{aligned} \tag{23}$$

$$\boxed{\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -\Big\langle \nabla V \Big\rangle} \tag{24}$$

□

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:

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



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

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = E\psi(x) \tag{25}$$

manipulando a equação (25) obtemos

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} &= -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)\\ \frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} &= -k^2\psi(x)\end{aligned} \tag{26}$$

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

$$\psi(a/2) = A\,\mathrm{sen}(ka/2) + B\cos(ka/2) = 0 \tag{27a}$$

$$\psi(-a/2) = A\,\mathrm{sen}(-ka/2) + B\cos(-ka/2) = 0 \tag{27b}$$

O par de equações descrito pelas (27a) e (27b), 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

$$\begin{aligned}A\,\mathrm{sen}(ka/2) + B\cos(ka/2) = 0\\ -A\,\mathrm{sen}(ka/2) + B\cos(ka/2) = 0\end{aligned} \tag{28}$$

resolvendo o sistema para o *cosseno*, obtemos

$$2B\cos(ka/2) = 0 \tag{29}$$

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

$$\cos\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \iff \frac{ka}{2} = \frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}, \frac{5\pi}{2}, \ldots \tag{30}$$

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

$$2A\,\mathrm{sen}(ka/2) = 0 \tag{31}$$

tal como anteriormente A é não nulo de modo que

$$\mathrm{sen}\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \iff \frac{ka}{2} = \pi, 2\pi, 3\pi, \ldots \tag{32}$$

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

$$\psi_n(x) = \begin{cases} A_n\,\mathrm{sen}\,(k_n x) & \text{se, } n = 2, 4, 6, \ldots(\text{par})\\ B_n\cos\,(k_n x) & \text{se, } n = 1, 3, 5, \ldots(\text{ímpar})\end{cases} \tag{33}$$

e

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

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n^*(x)\psi_n(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx = 1 \tag{35}$$

$$\tag{36}$$

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

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

$$\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} A_n^2 \operatorname{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = 1 \tag{37}$$

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

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

$$A_n^2 \left[\frac{a}{n\pi}\right] \left[\left(\frac{n\pi}{2}\right) - \cancelto{0}{\frac{1}{2}\left(\frac{\sin(2u)}{2}\right)\Bigg|_{-n\pi/2}^{n\pi/2}} \right] = 1 \tag{38}$$

o que simplificando da

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \tag{39}$$

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

$$B_n^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \cos^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = 1 \tag{40}$$

procedendo de forma análoga obtemos

$$B_n^2 \left[\frac{a}{n\pi}\right] \left[\left(\frac{n\pi}{2}\right) + \cancelto{0}{\frac{1}{2}\left(\frac{\sin(2u)}{2}\right)\Bigg|_{-n\pi/2}^{n\pi/2}} \right] = 1 \tag{41}$$

ou seja

$$B_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \tag{42}$$

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

$$\boxed{\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2}{a}}\,\text{sen}\left(\dfrac{n\pi x}{a}\right) & \text{se, } n = 2, 4, 6, ...\text{(par)} \\ \sqrt{\dfrac{2}{a}}\cos\left(\dfrac{n\pi x}{a}\right) & \text{se, } n = 1, 3, 5, ...\text{(ímpar)} \end{cases}} \tag{43}$$

e

$$\boxed{k_n = \frac{n\pi}{a}} \tag{44}$$

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

$$k_n = \frac{n\pi}{a} = \sqrt{\frac{2mE_n}{\hbar^2}} \tag{45}$$

$$\boxed{E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2} \tag{46}$$

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 σ_x e σ_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

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

logo, teremos

$$\begin{aligned} \langle x\rangle &= \int_0^a \psi^* x\psi dx \\ &= \int_0^a x|\psi|^2 dx \\ &= \int_0^a x\left[\sqrt{\frac{2}{a}}\,\text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\right]^2 dx \\ &= \frac{2}{a}\int_0^a x\,\text{sen}^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \end{aligned} \tag{47}$$

fazendo a substituição

$$u = \frac{n\pi x}{a} \tag{48a}$$
$$du = \frac{n\pi}{a}dx \tag{48b}$$

e notando que

$$x \to 0 \implies u \to 0 \tag{49a}$$
$$x \to a \implies u \to n\pi \tag{49b}$$

ajustamos o argumento do *seno* para poder aplicar integração por partes e ficamos com

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= \frac{2}{a}\int_0^{n\pi}\left(\frac{a}{n\pi}\right)u\,\mathrm{sen}^2\,u\left(\frac{a}{n\pi}\right)\,du\\ &= \frac{2}{a}\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2\int_0^{n\pi}u\sin^2 u\,du\end{aligned}$$

no exercício anterior já mostramos que o resultado da integral de $\sin^2(x)$, a menos de uma constante, é igual a

$$\int \sin^2 x\,dx = \frac{1}{2}\left[x - \frac{1}{2}\sin(2x)\right] \tag{50}$$

de modo que, aplicando a integração por partes na integral de interesse, obtemos

$$\begin{aligned}\frac{2a}{n^2\pi^2}\int_0^{n\pi}u\sin^2 u\,du &= \frac{2a}{n^2\pi^2}\left\{\frac{u}{2}\left[u - \frac{1}{2}\sin(2u)\right]\Bigg|_0^{n\pi}\right\} - \frac{2a}{n^2\pi^2}\frac{1}{2}\int_0^{n\pi}\left[u - \frac{1}{2}\sin(2u)\right]du\\ &= \frac{2a}{n^2\pi^2}\left[\frac{u^2}{2} - \frac{u}{4}\sin(2u)\right]\Bigg|_0^{n\pi} - \frac{2a}{n^2\pi^2}\frac{1}{2}\left[\frac{u^2}{2} + \frac{1}{4}\cos(2u)\right]\Bigg|_0^{n\pi}\\ &= \frac{2a}{n^2\pi^2}\left[\frac{n^2\pi^2}{2} - \frac{n\pi}{4}\sin(2n\pi) - \frac{n^2\pi^2}{4} - \frac{1}{8}\cos(2n\pi) + \frac{1}{8}\right] = \langle x\rangle\end{aligned} \tag{51}$$

Desde que $n \in \mathbb{N}^* \implies \sin(2n\pi) = 0$ e $\cos(2n\pi) = 1$ ou seja

$$\langle x\rangle = \frac{2a}{n^2\pi^2}\left[\frac{n^2\pi^2}{2} - \frac{n^2\pi^2}{4}\right] = \frac{2a}{n^2\pi^2}\left(\frac{n^2\pi^2}{4}\right) \therefore \tag{52}$$

$$\boxed{\langle x\rangle = \frac{a}{2}} \tag{53}$$

procedendo de forma análoga para $\langle x^2 \rangle$

$$\begin{aligned}
\langle x^2 \rangle &= \int_0^a \frac{2}{a} x^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \\
&= \frac{2}{a}\int_0^{n\pi} \left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 u^2 \sin^2 u \left(\frac{a}{n\pi}\right) du \\
&= \frac{2}{a}\left(\frac{a}{n\pi}\right)^3 \int_0^{n\pi} u^2 \sin^2 u \, du \\
&= \frac{2a^2}{n^3\pi^3}\left[\frac{u^3}{6} - \frac{u^2}{4}\sin(2u) - \frac{x}{4}\cos(2u) + \frac{1}{8}\sin(2u)\right]\Bigg|_0^{n\pi} \\
&= \frac{2a^2}{n^3\pi^3}\left[\frac{n^3\pi^3}{6} - \frac{n^2\pi^2}{4}\underbrace{\sin(2n\pi)}_{0} - \frac{n\pi}{4}\underbrace{\cos(2n\pi)}_{1} + \frac{1}{8}\underbrace{\sin(2n\pi)}_{0}\right] \\
&= \frac{2a^2}{n^3\pi^3}\left[\frac{n^3\pi^3}{6} - \frac{n\pi}{4}\right]
\end{aligned} \tag{54}$$

portanto,

$$\boxed{\langle x^2 \rangle = \frac{a^2}{3} - \frac{1}{2}\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2} \tag{55}$$

Para determinar $\langle p \rangle$, uma vez que conhecemos $\langle x \rangle$, basta fazermos

$$\langle p \rangle = \frac{d\langle x \rangle}{dt} \tag{56}$$

logo

$$\langle p \rangle = \frac{d}{dt}\left(\frac{a}{2}\right) \tag{57}$$

ou simplesmente

$$\boxed{\langle p \rangle = 0} \tag{58}$$

Porém para determinar $\langle p^2 \rangle$, precisaremos da equação de Schröedinger escrita para o problema. Notando que a partícula somente pode exisitir no interior do poço infinito onde a função de onda $\psi(x)$ é diferente de zero, e que nesta região a partícula é livre ($V = 0$)

$$\begin{aligned}
\hat{H}\psi &= E\psi \\
-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} &= E_n\psi_n(x) \\
\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} &= -\frac{2mE_n}{\hbar^2}\psi_n(x)
\end{aligned} \tag{59}$$

atento a isto, segue que

$$\begin{aligned}
\langle p^2\rangle &= \int_0^a \psi_n^*(x)\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)^2\psi_n(x)\,dx \\
&= -\hbar^2\int_a^b \psi^*(x)\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2}\,dx \\
&= \hbar^2\frac{2mE_n}{\hbar^2}\int_0^a \psi_n^*(x)\psi_n(x)\,dx
\end{aligned} \tag{60}$$

usando a condição de normalização das funções $\psi_n(x)$

$$\langle p^2\rangle = 2mE_n \tag{61}$$

em sala de aula, encontramos para o valor de energia

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \tag{62}$$

então

$$\boxed{\langle p^2\rangle = \left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2} \tag{63}$$

Para o n-ésimo estado estacionário a incerteza na posição é dada por

$$\sigma_x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} \tag{64}$$

portanto

$$\begin{aligned}
\sigma_x &= \sqrt{\left[\frac{a^2}{3} - \frac{1}{2}\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2\right] - \frac{a^2}{4}} \\
&= \sqrt{\frac{a^2}{12} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2}}
\end{aligned} \tag{65}$$

$$\boxed{\sigma_x = \frac{a}{2}\sqrt{\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\pi^2}}} \tag{66}$$

e para o momento teremos

$$\begin{aligned}
\sigma_p &= \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2} \\
&= \sqrt{\left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right)^2}
\end{aligned} \tag{67}$$

$$\boxed{\sigma_p = \frac{n\pi\hbar}{a}} \tag{68}$$

Segundo o princípio de incerteza, não é possível obter simultâneamente com precisão o valor de duas variáveis conjugadas, matemáticamente isso é expresso por

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \tag{69}$$

se isso for verdade, então, para o caso em questão teremos

$$\begin{aligned} \sigma_x \sigma_p &= \left(\frac{n\pi\hbar}{a}\right) \frac{a}{2} \sqrt{\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\pi^2}} \\ &= \frac{n\pi\hbar}{2} \sqrt{\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\pi^2}} \end{aligned} \tag{70}$$

usando o princípio de incerteza

$$\begin{aligned} \sigma_x \sigma_x &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \frac{n\pi\hbar}{2} \sqrt{\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\pi^2}} &\geq \frac{\hbar}{2} \\ n^2\pi^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\pi^2}\right) &\geq 1 \\ \frac{n^2\pi^2}{3} - 2 &\geq 1 \\ \frac{n^2\pi^2}{3} &\geq 3 \\ n &\geq \frac{3}{\pi} \end{aligned} \tag{71}$$

como $n \in \mathbb{N}^*$ a desigualdade acima é sempre verdade, o que de fato satisfaz o princípio de incerteza. O produto $\sigma_x \sigma_p$ é proporcional a constante reduzida de planck $\hbar$, no intervalo avaliado o menor valor possível de n é $n = 1$ o que consequentemente é também o valor mais próximo do limite inferior de incerteza.

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

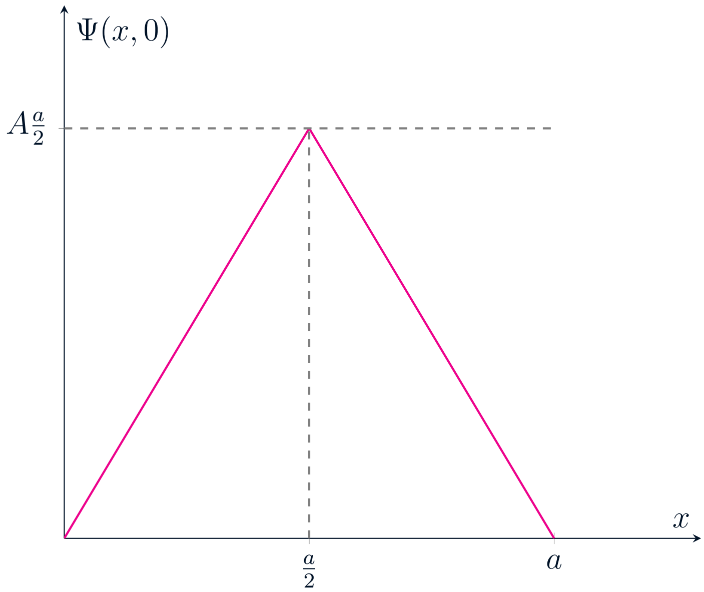


Figura 2 – Gráfico da $\Psi(x,0)$

Solução 5. a) A função $\Psi(x,0) \times x$ encontra-se plotada na Figura 2

Normalizando a $\Psi(x,0)$ no intervalo indicado:

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*\Psi\, dx &= \int_{0}^{a/2} |Ax|^2\, dx + \int_{a/2}^{a} |A(a-x)|^2\, dx = 1 \\
&= A^2 \left[\left.\frac{x^3}{3}\right|_0^{a/2} + \left.\left(a^2 x - 2a\frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} \right)\right|_{a/2}^{a} \right] = 1 \\
&= A^2 \left[\frac{a^3}{24} + \frac{a^3}{2} - \frac{3a^3}{4} + \frac{7a^3}{24} \right] = 1 \\
&= A^2 \left[\frac{8a^3 + 12a^3 - 18a^3}{24} \right] = 1 \\
&= A^2 \left[\frac{a^3}{12} \right] = 1 \implies \boxed{A = 2\sqrt{\frac{3}{a^3}}}
\end{aligned} \tag{72}$$

b) Uma vez que

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \mathrm{e}^{-Et/\hbar}, \quad \text{com } c_n = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^*(x)\Psi(x,0)\, dx$$

e

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\, \mathrm{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \quad \text{com } n = 1, 2, 3, 4, 5, \ldots$$

Determinando c_n no intervalo $x \in [0, a]$:

$$\begin{aligned}
c_n &= \sqrt{\frac{2}{a}} \left[\int_0^{a/2} Ax \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx + \int_{a/2}^{a} A(a-x) \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx \right] \\
&= A\sqrt{\frac{2}{a}} \left[\left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \int_0^{n\pi/2} u \operatorname{sen}(u)\, du + a\left(\frac{a}{n\pi}\right) \int_{n\pi/2}^{n\pi} \operatorname{sen}(u)\, du + \right. \\
&\quad \left. - \left(\frac{a}{n\pi}\right)^2 \int_{n\pi/2}^{n\pi} u \operatorname{sen}(u)\, du \right] \\
&= A\sqrt{\frac{2}{a}} \left[\frac{a^2}{n^2\pi^2} \left(\int_0^{n\pi/2} u \operatorname{sen}(u)\, du - \int_{n\pi/2}^{n\pi} u \operatorname{sen}(u)\, du \right) + \right. \\
&\quad \left. + \frac{a^2}{n\pi} \int_{n\pi/2}^{n\pi} \operatorname{sen}(u)\, du \right] \\
&= A\sqrt{\frac{2}{a}} \left[\frac{a^2}{n^2\pi^2} \left(\underbrace{-u\cos(u)\Big|_0^{n\pi/2}}_{0} + \underbrace{\operatorname{sen}(u)\Big|_0^{n\pi/2}}_{\operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{2}\right)} + \underbrace{u\cos(u)\Big|_{n\pi/2}^{n\pi}}_{n\pi\cos(n\pi)} + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \underbrace{- \operatorname{sen}(u)\Big|_{n\pi/2}^{n\pi}}_{-\operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{2}\right)} \right) - \frac{a^2}{n\pi} \underbrace{\cos(u)\Big|_{n\pi/2}^{n\pi}}_{\cos(n\pi)} \right] \\
&= A\sqrt{\frac{2}{a}} \left[\frac{a^2}{n^2\pi^2} \sin\left(\frac{n\pi}{2}\right) + \frac{a^2}{n\pi}\cos(n\pi) + \frac{a^2}{n^2\pi^2} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{2}\right) - \frac{a^2}{n\pi}\cos(n\pi) \right] \\
&= A\sqrt{\frac{2}{a}} \left[\frac{2a^2}{n^2\pi^2} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{2}\right) \right] \\
&= 2\sqrt{\frac{3}{a^3}} \sqrt{\frac{2}{a}} \left[\frac{2a^2}{n^2\pi^2} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{2}\right) \right] \\
&= \frac{4\sqrt{6}}{n^2\pi^2} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{2}\right)
\end{aligned} \tag{73}$$

Se $n = 1, 2, 3, 4, 5, ...$, então

$$\begin{aligned}
c_1 &= \frac{4\sqrt{6}}{(1)^2\pi^2}(1) & c_2 &= \frac{4\sqrt{6}}{(2)^2\pi^2}(0) \\
c_3 &= \frac{4\sqrt{6}}{(3)^2\pi^2}(-1) & c_4 &= \frac{4\sqrt{6}}{(4)^2\pi^2}(0) \\
c_5 &= \frac{4\sqrt{6}}{(5)^2\pi^2}(1) & c_6 &= \frac{4\sqrt{6}}{(6)^2\pi^2}(0) \\
c_7 &= \frac{4\sqrt{6}}{(7)^2\pi^2}(-1) & c_8 &= \frac{4\sqrt{6}}{(8)^2\pi^2}(0)
\end{aligned}$$

ou seja,

$$c_n = \begin{cases} 0, & \text{se } n = 2, 4, 6, 8, ... \\ \dfrac{4\sqrt{6}}{\pi^2}\dfrac{(-1)^{(n-1)/2}}{n^2}, & \text{se } n = 1, 3, 5, 7, ... \end{cases} \tag{74}$$

e por fim

$$\boxed{\Psi(x,t) = \frac{4\sqrt{6}}{\pi^2}\sqrt{\frac{2}{a}}\sum_{n=1,3,5,...}\left[\frac{(-1)^{(n-1)/2}}{n^2}\,\text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\text{e}^{-E_n t/\hbar}\right]} \tag{75}$$

c) A probabilidade de que uma medida retorne o valor de energia E_1 é dada por

$$|c_1|^2 = \left|\frac{4\sqrt{6}}{\pi^2}\right|^2 = \boxed{0,985} \tag{76}$$

d) Para o valor médio de energia $\langle H \rangle$ tem-se que:

$$\langle H \rangle = \sum_{n=1,3,5,...} |c_n|^2 E_n, \quad \text{com } E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

ou seja,

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \frac{16(6)}{\pi^4}\sum_{n=1,3,5,...}\left[\frac{(-1)^{(n-1)/2}}{n^2}\right]^2\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \\ &= \frac{96}{\pi^4}\sum_{n=1,3,5,...}\frac{(-1)^{(n-1)}}{n^4}\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \\ &= \frac{48\hbar^2}{ma^2\pi^2}\sum_{n=1,3,5,...}\frac{(-1)^{(n-1)}}{n^2} \\ &= \frac{48\hbar^2}{ma^2\pi^2}\frac{\pi^2}{8} = \boxed{\frac{6\hbar^2}{ma^2}} \end{aligned} \tag{77}$$

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

a) Mostre que

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = 1 \tag{78}$$

b) Utilizando a equação

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_+)^n\,\psi_0 \tag{79}$$

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. a) *Demonstração.* Partindo-se dos operadores

$$\hat{a}_- = \left(\frac{i\hat{p} + m\omega\hat{x}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\right) \tag{80a}$$

$$\hat{a}_+ = \left(\frac{-i\hat{p} + m\omega\hat{x}}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\right) \tag{80b}$$

construindo uma expressão para o comutador dos operadores

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = \hat{a}_-\hat{a}_+ - \hat{a}_+\hat{a}_- \tag{81}$$

mas

$$\begin{aligned}
\hat{a}_-\hat{a}_+ &= \frac{1}{2m\omega\hbar}\left[(i\hat{p} + m\omega\hat{x})(-i\hat{p} + m\omega\hat{x})\right] \\
&= \frac{1}{2m\omega\hbar}\left[\hat{p}^2 + im\omega\hat{p}\hat{x} - im\omega\hat{x}\hat{p} + (m\omega\hat{x})^2\right] \\
&= \frac{1}{2m\hbar\omega}[\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2] - \frac{i}{2\hbar}(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x})
\end{aligned} \tag{82}$$

e analogamente,

$$\hat{a}_+\hat{a}_- = \frac{1}{2m\hbar\omega}[\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2] + \frac{i}{2\hbar}(\hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}) \tag{83}$$

reescrevendo em termos do comutador $[\hat{x}, \hat{p}] = \hat{x}\hat{p} - \hat{p}\hat{x}$

$$\hat{a}_-\hat{a}_+ = \frac{1}{2m\hbar\omega}[\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2] - \frac{i}{2\hbar}[\hat{x}, \hat{p}] \tag{84a}$$

$$\hat{a}_+\hat{a}_- = \frac{1}{2m\hbar\omega}[\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2] + \frac{i}{2\hbar}[\hat{x}, \hat{p}] \tag{84b}$$

uma vez que

$$\begin{aligned}
[\hat{x}, \hat{p}]f(x) &= -xi\hbar\frac{\partial f(x)}{\partial x} + i\hbar\frac{\partial x}{\partial x}f(x) + i\hbar x\frac{\partial f(x)}{\partial x} \\
&= i\hbar f(x)
\end{aligned} \tag{84c}$$

tem-se portanto

$$\begin{aligned}
[\hat{a}_-, \hat{a}_+] &= \frac{1}{2m\omega\hbar}\left[\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2\right] - \frac{i}{2\hbar}ih + \\
&\quad - \frac{1}{2m\omega\hbar}[\hat{p}^2 + (m\omega\hat{x})^2] - \frac{i}{2\hbar}ih \\
&= \frac{1}{2} + \frac{1}{2}
\end{aligned} \tag{85}$$

$$\therefore$$

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

$\square$

b) Se a $\psi_0(x)$ é dada por

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \tag{86}$$

então, para encontrar a $\psi_2(x)$ basta computarmos

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2!}}(\hat{a}_+)^2\psi_0, \quad \text{com } \hat{a}_+ = \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\left(-\hbar\frac{d}{dx} + m\omega\hat{x}\right)$$

logo

$$\begin{aligned}
\hat{a}_+\psi_0(x) &= \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\left(-\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right)\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left[-\hbar\left(\frac{-2m\omega}{2\hbar}\right)x\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} + m\omega x\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\right] \\
&= \frac{1}{\sqrt{2m\omega\hbar}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left[2m\omega x\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\right] \\
\hat{a}_+\hat{a}_+\psi_0(x) &= \frac{1}{2m\omega\hbar}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left[-\hbar\frac{d}{dx} + m\omega x\right]2m\omega x\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \\
&= \frac{1}{2m\omega\hbar}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left[-\hbar\left(2m\omega\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} - \frac{2m^2\omega^2x^2}{\hbar}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\right) + \right. \\
&\quad \left. +2m^2\omega^2x^2\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}\right] \\
&= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left[-\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}} + \frac{2m\omega x^2}{\hbar}\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}}\right] \\
&= \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left[\frac{2m\omega x^2}{\hbar} - 1\right]\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}}
\end{aligned} \tag{87}$$

$$\boxed{\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4}\left[\frac{2m\omega x^2}{\hbar} - 1\right]\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}}} \tag{88}$$

c) Os operadores $\hat{x}$ e $\hat{p}$ em termos dos operadores escadas $\hat{a}_\pm$ ficam

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\left(\hat{a}_+ - \hat{a}_-\right), \qquad \hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{a}_+ + \hat{a}_-\right) \tag{89}$$

de modo que para o estado fundamental $\psi_0(x)$ devemos ter

$$\begin{aligned}
\langle x\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* x\psi_0\, dx \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m}}\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*\left(a_+ + a_-\right)\psi_0\, dx \\
&= \sqrt{\frac{\hbar}{2m}}\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^*\left(a_+\psi_0 + a_-\psi_0\right)\, dx
\end{aligned} \tag{90}$$

sabendo que $a_-\psi_0 = 0$ e $a_+\psi_0 = \sqrt{1}\psi_1$ além de $\delta_{mn} = 0$ se $m \neq n$ obtêm-se que

$$\langle x \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \psi_1 \, dx = \sqrt{\frac{\hbar}{2m}} \delta_{01} \implies \boxed{\langle x \rangle = 0} \tag{91}$$

de maneira análoga, para o operador momento $\hat{p}$ teremos

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* p \psi_0 \, dx \\ &= i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \left(a_+ - a_-\right) \psi_0 \, dx \\ &= i\sqrt{\frac{\hbar}{2m}} \delta_{01} \implies \boxed{\langle p \rangle = 0} \end{aligned} \tag{92}$$

Calculando o valor médio de $\langle x^2 \rangle$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \left[\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left(a_+ + a_-\right) \right]^2 \psi_0 \, dx \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \left[(a_+)^2 + (a_+ a_-) + (a_- a_+) + (a_-)^2 \right] \psi_0 \, dx \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \left[(a_+)\psi_1 + (a_+)0 + (a_-)\psi_1 + (a_-)0 \right] dx \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \left[\sqrt{2}\psi_2 + \psi_0 \right] dx \implies \boxed{\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}} \end{aligned} \tag{93}$$

Por fim, calculando $\langle p^2 \rangle$

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \left[i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \left(a_+ - a_-\right) \right] \psi_0 \, dx \\ &= -\frac{\hbar m\omega}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \left[(a_+)^2 - (a_+ a_-) - (a_- a_+) + (a_-)^2 \right] \psi_0 \, dx \\ &= -\frac{\hbar m\omega}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^* \left[\sqrt{2}\psi_2 - \psi_0 \right] dx \implies \boxed{\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}} \end{aligned} \tag{94}$$

Verificando o princípio de incerteza

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \end{aligned} \tag{95}$$

e

$$\begin{aligned} \sigma_p &= \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \\ &= \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \end{aligned} \tag{96}$$

$$\begin{aligned}\sigma_x\sigma_p &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\\ &= \sqrt{\frac{\hbar^2}{4}} = \frac{\hbar}{2}\end{aligned} \tag{97}$$

ou seja, sim o princípio de incerteza continua sendo respeitado!

$$\boxed{\sigma_x\sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}} \tag{98}$$

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

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x, \tag{99}$$

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

$$\phi(\xi) = h(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2} \tag{100}$$

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 $h(\xi)$

$$\frac{d^2h(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh(\xi)}{d\xi} + (K-1)\,h(\xi) = 0 \tag{101}$$

e obtenha a relação de recorrência entre os coeficientes.

Solução 7. a) Considere a equação de Schrödinger para o oscilador harmônico

$$\begin{aligned}-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2\psi_n(x) &= E\psi_n(x)\\ \frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} - \frac{m^2\omega^2x^2}{\hbar^2}\psi_n(x) + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_n(x) &= 0\\ \frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2x^2}{\hbar^2}\right]\psi_n(x) &= 0\end{aligned} \tag{102}$$

assumindo a mundaça de variável $x \to \xi$ em que $\xi(x) = \alpha x$, $\alpha = \sqrt{m\omega\hbar^{-1}}$ e $\psi(x) \to \phi(\xi)$. Deseja-se reescrever a eq. de Sch. em termos da ξ portanto

$$\begin{aligned}\frac{d\psi}{dx} &= \frac{d\phi}{d\xi}\frac{d\xi}{dx} \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} &= \frac{d^2\phi}{dxd\xi}\frac{d\xi}{dx} + \frac{d\phi}{d\xi}\frac{d^2\xi}{dx^2}\end{aligned} \tag{103}$$

supondo que $\phi(\xi)$ é contínua e definida em todo o seu domínio, podemos usar o teorema de Clairaut para avaliar as derivadas cruzadas

$$\frac{d}{d\xi}\left[\frac{d\psi}{dx}\right] = \frac{d^2\phi}{d\xi^2}\frac{d\xi}{dx} = \frac{d^2\phi}{dxd\xi} \tag{104}$$

então

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{d^2\phi}{d\xi^2}\left(\frac{d\xi}{dx}\right)^2 + \frac{d\phi}{d\xi}\frac{d^2\xi}{d\xi^2} = \alpha^2\frac{d^2\phi}{d\xi^2} \tag{105}$$

na eq. de Sch. fica

$$\begin{aligned}a^2\frac{d^2\phi(\xi)}{d\xi^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}\left(\frac{\xi^2\hbar}{m\omega}\right)\right]\phi(\xi) = 0 \\ \frac{d^2\phi(\xi)}{d\xi^2} + \frac{\hbar}{\omega m}\left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m\omega}{\hbar}\xi^2\right]\phi(\xi) = 0 \\ \frac{d^2\phi(\xi)}{d\xi^2} + \left[\frac{2E}{\omega\hbar} - \xi^2\right]\phi(\xi) = 0\end{aligned} \tag{106}$$

por fim, usando o valor designado para K

$$\boxed{\frac{d^2\phi(\xi)}{d\xi^2} = \left[\xi^2 - K\right]\phi(\xi)} \tag{107}$$

b) Se $\phi(\xi) = h(\xi)\mathrm{e}^{-\xi^2/2}$ tem-se

$$\begin{aligned}\frac{d\phi}{d\xi} &= \frac{dh}{d\xi}\mathrm{e}^{-\xi^2/2} - h\xi\mathrm{e}^{-\xi^2/2} \\ \frac{d^2\phi}{d\xi^2} &= \frac{d^2h}{d\xi^2}\mathrm{e}^{-\xi^2/2} - \xi\frac{dh}{d\xi}\mathrm{e}^{-\xi^2/2} - \frac{dh}{d\xi}\xi\mathrm{e}^{-\xi^2/2} - h\mathrm{e}^{-\xi^2/2} + h\xi^2\mathrm{e}^{-\xi^2/2} \\ \frac{d^2\phi}{d\xi^2} &= \frac{d^2h}{d\xi^2}\mathrm{e}^{-\xi^2/2} - 2\xi\frac{dh}{d\xi} - h\mathrm{e}^{-\xi^2/2} + h\xi^2\mathrm{e}^{-\xi^2/2}\end{aligned} \tag{108}$$

substituindo em (107)

$$\begin{aligned}\frac{d^2\phi}{d\xi^2} &= \left[\xi^2 - K\right]\phi \\ \frac{d^2h}{d\xi^2}\mathrm{e}^{-\xi^2/2} - 2\xi\frac{dh}{d\xi} - h\mathrm{e}^{-\xi^2/2} + h\xi^2\mathrm{e}^{-\xi^2/2} &= \left[\xi^2 - K\right]h\mathrm{e}^{-\xi^2/2} \\ \frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh}{d\xi} - h + h\xi^2 &= h\xi^2 - Kh\end{aligned} \tag{109}$$

e por fim

$$\boxed{\frac{d^2h(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi\frac{dh(\xi)}{d\xi} + [K-1]\,h(\xi) = 0} \tag{110}$$

c) Propondo como solução da (110) a série de potência

$$h(\xi) = \sum_n a_j \xi^j \tag{111}$$

calculando todas as derivadas necessárias de $h(\xi)$

$$\frac{dh(\xi)}{d\xi} = \sum_j j a_j \xi^{j-1}, \qquad \frac{d^2h(\xi)}{d\xi^2} = \sum_j (j-1) j a_j \xi^{j-1} \tag{112}$$

para manter todos os termos na mesma potência de ξ, fazemos a mudança de variável $j \to j+2$ no termo da derivada segunda de ξ ficando assim:

$$\frac{d^2h(\xi)}{d\xi^2} = \sum_j (j+1)(j+2) a_{j+2} \xi^j \tag{113}$$

substituindo tudo na (110) ficamos com

$$\sum_j (j+1)(j+2) a_{j+2} \xi^j - 2\sum_j j a_j \xi^{j-1}\xi + (k-1)\sum_j a_j \xi^j = 0 \tag{114}$$

logo, a relação de recorrência para os coeficientes é dada por

$$\begin{gathered} \sum_j \left[(j+1)(j+2)a_{j+2} - 2ja_j + Ka_j - a_j\right]\xi^j = 0 \\ (j+1)(j+2)a_{j+2} = (2j+1-K)\, a_j \end{gathered} \tag{115}$$

$$\boxed{a_{j+2} = \frac{2j+1-K}{(j+1)(j+2)} a_j} \tag{116}$$

Problema 8. Faça um estudo do final da seção 2.4 do Griffiths, sobre partícula livre, e argumente que

$$v_{grupo} = 2v_{fase} \tag{117}$$

Problema 9. Para o problema do potencial delta no caso de estados ligados ($E < 0$):

a) Mostre que

$$\psi''(x) = -2\gamma^3\delta(x) + \gamma^4\psi(x), \quad \gamma = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar^2}$$

b) Calcule os valores médios de x, x^2, p e p^2 e teste o princípio da incerteza para este problema.

Solução 8. a)

Problema 10. Mostre que a equação de Schröedinger respeita a equação da continuidade (1D em nossos estudos, por enquanto)

$$\frac{\partial j}{\partial x} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \tag{118}$$

com a densidade de probabilidade e densidade de corrente dadas, respectivamente por

$$\rho = |\Psi(x,t)|^2 \tag{119}$$

e

$$j = \frac{i\hbar}{2m}\left[\Psi(x,t)\frac{\partial \Psi^*(x,t)}{\partial x} - \Psi^*(x,t)\frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x}\right] \tag{120}$$
