



Aluno(a): Rodrigo Ribamar Silva do Nascimento

Professor(a): Bruno Duarte da Silva Moreira

Capítulo(s) Ref.: I/II

Lista de Exercícios: 001

Data: 25/04/2023

Fase: LEF102-08U

PRIMEIRA AVALIAÇÃO

Resumo:

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

Sumário

Problema 01	1
Problema 02	3
Problema 03	5
Problema 04	8
Problema 05	12
Problema 06	15
Problema 07	19
Problema 08	21
Problema 09	21
Problema 10	26

Problema 1. Considere a função de onda

$$\Psi(x, t) = Ae^{-\lambda|x|}e^{-i\omega t} \quad (1)$$

onde A , λ e ω são constantes reais positivas

- Normalize Ψ
- Determine os valores médios $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$
- 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

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

de modo que

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} |Ae^{-\lambda|x|}e^{-i\omega t}Ae^{-\lambda|x|}e^{+i\omega t}|dx &= 1 \\ \int_{-\infty}^{+\infty} A^2e^{-2\lambda|x|}dx &= 1 \end{aligned} \quad (3)$$

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

$$\begin{aligned} 2A^2 \int_0^{+\infty} e^{-2\lambda|x|}dx &= 1 \\ 2A^2 \left(-\frac{1}{2\lambda}e^{-2\lambda x} \Big|_0^{+\infty} \right) &= 1 \\ A^2 &= \lambda \\ A &= \sqrt{\lambda} \end{aligned} \quad (4)$$

ou seja

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

- b) Calculando $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$

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

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

$$\boxed{\langle x \rangle = 0} \quad (6)$$

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

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

$\psi(x)$ é novamente par, então

$$\langle x^2 \rangle = 2\lambda \int_0^{\infty} x^2 e^{-2\lambda x} dx \quad (8)$$

$$(9)$$

usando integração por partes duas vezes, chegamos ao seguinte resultado

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= - \left[\frac{x^2}{e^{2\lambda x}} \Big|_0^{\infty} + \frac{x}{\lambda e^{2\lambda x}} \Big|_0^{\infty} + \frac{2}{2\lambda e^{2\lambda x}} \Big|_0^{\infty} \right] \Rightarrow \left[-\frac{\infty}{\infty} \right] \\ &= - \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{x^2}{e^{2\lambda x}} \Rightarrow \left[-\frac{\infty}{\infty} \right] \\ &\stackrel{H}{=} - \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{2x}{2\lambda e^{2\lambda x}} \Rightarrow \left[-\frac{\infty}{\infty} \right] \\ &\stackrel{H}{=} - \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{2}{4\lambda^2 e^{2\lambda x}} \Rightarrow [0] \therefore \\ &= - \left[\lim_{b \rightarrow \infty} \frac{2}{4\lambda^2 e^{2\lambda x}} \Big|_0^b \right] \\ &= - \left(0 - \frac{1}{2\lambda^2} \right) \end{aligned} \quad (10)$$

$$\boxed{\langle x^2 \rangle = \frac{1}{2\lambda^2}} \quad (11)$$

c) Calculando σ

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

$$\boxed{\sigma = \frac{\sqrt{2}}{2\lambda}} \quad (13)$$

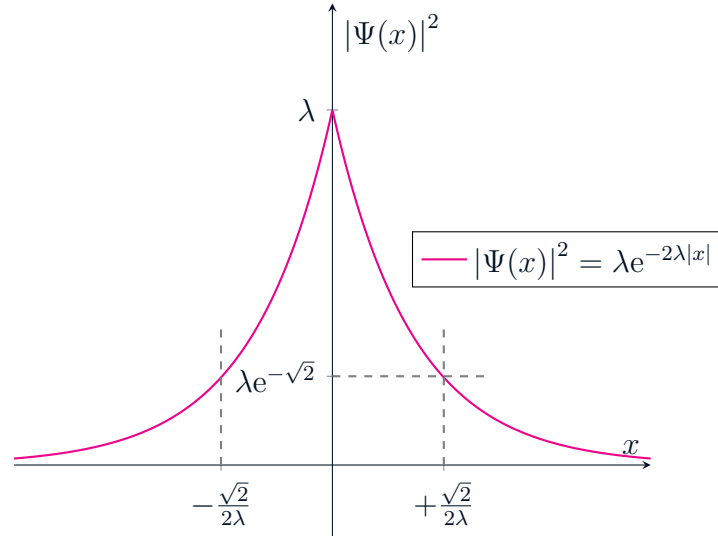


Figura 1 – Região de probabilidade de encontrar a partícula entre os valores do desvio padrão $\pm\sigma$

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

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

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

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

e obtenha o Teorema de Ehrenfest

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

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

o que resulta em

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

□

b) Dado que

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

ou seja

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

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

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

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

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

e portanto,

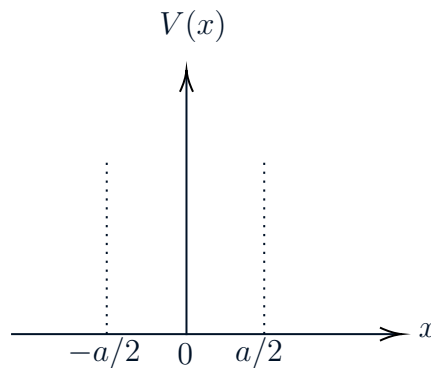
$$\begin{aligned} \frac{d\langle p \rangle}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, V] \rangle \\ \frac{d\langle p \rangle}{dt} &= \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle \end{aligned} \quad (23)$$

$$\boxed{\frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\langle \nabla V \rangle} \quad (24)$$

□

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:

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



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

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

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

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

da condição de contorno sabemos que

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

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

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 $\sin(-x) = -\sin(x)$, já a função *coseno* é uma função *par* isto é $\cos(-x) = \cos(x)$, logo

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

resolvendo o sistema para o *coseno*, 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

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

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

$$2A \sin(ka/2) = 0 \tag{31}$$

tal como anteriormente A é não nulo de modo que

$$\sin\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \iff \frac{ka}{2} = \pi, 2\pi, 3\pi, \dots \tag{32}$$

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

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

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 $\psi(x)$

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

$$(36)$$

para $n = 2, 4, 6, \dots$

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{-\frac{a}{2}} |\psi_n(x)|^2 dx + \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} |\psi_n(x)|^2 dx + \int_{\frac{a}{2}}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx &= 1 \\ \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} A_n^2 \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{a} \right) dx &= 1 \\ A_n^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{a} \right) dx &= 1 \end{aligned} \quad (37)$$

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

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

o que simplificando da

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (39)$$

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

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

procedendo de forma análoga obtemos

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

ou seja

$$B_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (42)$$

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

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) & \text{se, } n = 2, 4, 6, \dots (\text{par}) \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) & \text{se, } n = 1, 3, 5, \dots (\text{ímpar}) \end{cases} \quad (43)$$

e

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad (44)$$

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

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

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad (46)$$

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

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

logo, teremos

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

fazendo a substituição

$$u = \frac{n\pi x}{a} \quad (48a)$$

$$du = \frac{n\pi}{a} dx \quad (48b)$$

e notando que

$$x \rightarrow 0 \implies u \rightarrow 0 \quad (49a)$$

$$x \rightarrow a \implies u \rightarrow n\pi \quad (49b)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\boxed{\langle x \rangle = \frac{a}{2}} \quad (53)$$

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

$$\begin{aligned}
 \langle x^2 \rangle &= \int_0^a \frac{2}{a} x^2 \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{a} \right) dx \\
 &= \frac{2}{a} \int_0^{n\pi} \left(\frac{a}{n\pi} \right)^2 u^2 \sin^2 u \left(\frac{a}{n\pi} \right) du \\
 &= \frac{2}{a} \left(\frac{a}{n\pi} \right)^3 \int_0^{n\pi} u^2 \sin^2 u du \\
 &= \frac{2a^2}{n^3\pi^3} \left[\frac{u^3}{6} - \frac{u^2}{4} \sin(2u) - \frac{u}{4} \cos(2u) + \frac{1}{8} \sin(2u) \right] \Big|_0^{n\pi} \\
 &= \frac{2a^2}{n^3\pi^3} \left[\frac{n^3\pi^3}{6} - \frac{n^2\pi^2}{4} \underbrace{\sin(2n\pi)}_0 - \frac{n\pi}{4} \underbrace{\cos(2n\pi)}_1 + \frac{1}{8} \underbrace{\sin(2n\pi)}_0 \right] \\
 &= \frac{2a^2}{n^3\pi^3} \left[\frac{n^3\pi^3}{6} - \frac{n\pi}{4} \right]
 \end{aligned} \tag{54}$$

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 Schrödinger escrita para o problema. Notando que a partícula somente pode existir 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 simultaneamente com precisão o valor de duas variáveis conjugadas, matematicamente isso é expresso por

$$\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2} \quad (69)$$

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

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

usando o princípio de incerteza

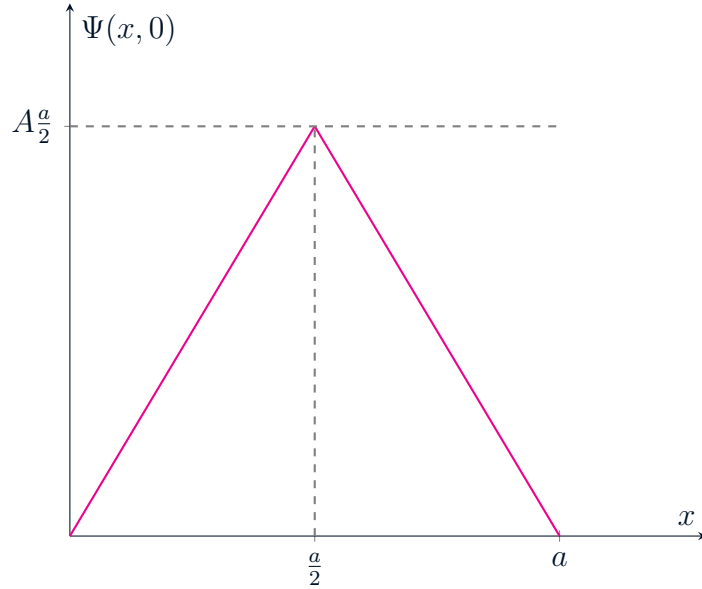
$$\begin{aligned} \sigma_x \sigma_x &\geq \frac{\hbar}{2} \\ \frac{n\pi\hbar}{2} \sqrt{\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\pi^2}} &\geq \frac{\hbar}{2} \\ n^2\pi^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{2}{n^2\pi^2} \right) &\geq 1 \\ \frac{n^2\pi^2}{3} - 2 &\geq 1 \\ \frac{n^2\pi^2}{3} &\geq 3 \\ n &\geq \frac{3}{\pi} \end{aligned}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

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

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

- Esboce o gráfico de $\Psi(x, 0)$ e determine a constante de normalização A
- Encontre $\Psi(x, t)$
- Qual é a probabilidade de que uma medida da energia retorne o valor E_1
- 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:

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx &= \int_0^{a/2} |Ax|^2 dx + \int_{a/2}^a |A(a-x)|^2 dx = 1 \\
 &= A^2 \left[\frac{x^3}{3} \Big|_0^{a/2} + \left(a^2 x - 2a \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} \right) \Big|_{a/2}^a \right] = 1 \\
 &= A^2 \left[\frac{a^3}{24} + \frac{a^3}{2} - \frac{3a^3}{4} + \frac{7a^3}{24} \right] = 1 \\
 &= A^2 \left[\frac{8a^3 + 12a^3 - 18a^3}{24} \right] = 1 \\
 &= A^2 \left[\frac{a^3}{12} \right] = 1 \implies \boxed{A = 2\sqrt{\frac{3}{a^3}}}
 \end{aligned} \tag{72}$$

b) Uma vez que

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

e

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

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

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

Se $n = 1, 2, 3, 4, 5, \dots$, 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,

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

e por fim

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

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

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

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

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

ou seja,

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

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

a) Mostre que

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = 1 \quad (78)$$

b) Utilizando a equação

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

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

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

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

construindo uma expressão para o comutador dos operadores

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = \hat{a}_- \hat{a}_+ - \hat{a}_+ \hat{a}_- \quad (81)$$

mas

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

e analogamente,

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

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

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

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

uma vez que

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

tem-se portanto

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

\therefore

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

□

b) Se a $\psi_0(x)$ é dada por

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

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

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

logo

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Verificando o princípio de incerteza

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

e

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

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

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

$$\boxed{\sigma_x \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}} \quad (98)$$

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

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad (99)$$

Mostre que a equação pode ser escrita como

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

- b) Substitua na equação acima a proposta de solução

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

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 $h(\xi)$

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

e obtenha a relação de recorrência entre os coeficientes.

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

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

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

$$\begin{aligned}\frac{d\psi}{dx} &= \frac{d\phi}{d\xi} \frac{d\xi}{dx} \\ \frac{d^2\psi}{dx^2} &= \frac{d^2\phi}{d\xi^2} \frac{d\xi}{dx} + \frac{d\phi}{d\xi} \frac{d^2\xi}{dx^2}\end{aligned}\quad (103)$$

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

$$\frac{d}{d\xi} \left[\frac{d\psi}{dx} \right] = \frac{d^2\phi}{d\xi^2} \frac{d\xi}{dx} = \frac{d^2\phi}{dx d\xi} \quad (104)$$

então

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

na eq. de Sch. fica

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

por fim, usando o valor designado para K

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

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

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

substituindo em (107)

$$\begin{aligned}\frac{d^2\phi}{d\xi^2} &= [\xi^2 - K] \phi \\ \frac{d^2h}{d\xi^2} e^{-\xi^2/2} - 2\xi \frac{dh}{d\xi} e^{-\xi^2/2} - h e^{-\xi^2/2} + h\xi^2 e^{-\xi^2/2} &= [\xi^2 - K] h e^{-\xi^2/2} \\ \frac{d^2h}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dh}{d\xi} - h + h\xi^2 &= h\xi^2 - Kh\end{aligned}\quad (109)$$

e por fim

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

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

$$h(\xi) = \sum_n a_j \xi^j \quad (111)$$

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

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

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

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

substituindo tudo na (110) ficamos com

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

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

$$\sum_j [(j+1)(j+2) a_{j+2} - 2j a_j + K a_j - a_j] \xi^j = 0 \quad (115)$$

$$(j+1)(j+2) a_{j+2} = (2j+1-K) a_j$$

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

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

$$v_{grupo} = 2v_{fase} \quad (117)$$

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) Primeiramente precisamos construir a solução da eq. de Sch para o estado ligado ($E < 0$)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \alpha\delta(x) = E\psi(x) \quad (118)$$

Para casos em que $|x| \neq 0$, o potencial é nulo, do contrário o potencial é dado pela delta $V(x) = -\alpha\delta(x)$. Nas regiões em que o potencial não atua a eq. de Sch. fica

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} &= E\psi(x) \\ \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} - \frac{2m|E|}{\hbar^2}\psi(x) &= 0 \end{aligned} \quad (119)$$

portanto, a solução geral é do tipo

$$\psi(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx}, \quad \text{com } k = \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}$$

Da análise da solução geral e da condição de normalização das funções de onda, nota-se que

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{kx}, & \text{se } x < 0 \\ Be^{-kx}, & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (120)$$

e da condição de continuidade da função densidade de probabilidade $|\psi(x)|^2$, é necessário que $\psi_{x<0}(0) = \psi_{x>0}(0)$ o que resulta diretamente em $A = B$. Reescrevendo a solução geral tem-se:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{kx}, & \text{se } x < 0 \\ Ae^{-kx}, & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (121)$$

Passando a normalização da $\psi(x)$ de modo a determinar A

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx &= 1 \\ \int_{-\infty}^0 |A|^2 e^{2kx} dx + \int_0^{\infty} |A|^2 e^{-2kx} dx &= 1 \\ |A|^2 \left[\frac{1}{2k} - 0 \right] + |A|^2 \left[0 - \frac{1}{-2k} \right] &= 1 \\ A &= \sqrt{k} \end{aligned} \quad (122)$$

A $\psi(x)$ normalizada fica então

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{k}e^{kx}, & \text{se } x < 0 \\ \sqrt{k}e^{-kx}, & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (123)$$

Ainda é preciso obter a influência do potencial delta na função $\psi(x)$. Uma estratégia para isto, é investigar a descontinuidade das derivadas da $\psi(x)$ em $x = 0$. A princípio tem-se que

$$\psi'(x) = \begin{cases} k\sqrt{k}e^{kx}, & \text{se } x < 0 \\ -k\sqrt{k}e^{-kx}, & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (124)$$

de modo que

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\psi_{x>0}(x)}{dx} \right|_{x=0} - \left. \frac{d\psi_{x<0}(x)}{dx} \right|_{x=0} &= -k\sqrt{k} - k\sqrt{k} \\ \Delta \left[\frac{d\psi(x)}{dx} \right] &= -2k\sqrt{k} \end{aligned} \quad (125)$$

A integração da eq. de Sch. (118), num intervalo entre ε e $-\varepsilon$, irá nos fornecer mais informação sobre o que ocorre no ponto de singularidade $x = 0$ via análise por limites, isto é

$$\begin{aligned} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \left[\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} \right] dx &= \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \left[\frac{-\alpha\delta(x) - E}{\hbar^2} \right] 2m\psi(x) dx \\ \left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{x=\varepsilon} - \left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{x=-\varepsilon} &= -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x)\psi(x) dx - \frac{2mE}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi(x) dx \\ \left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{x=\varepsilon} - \left. \frac{d\psi(x)}{dx} \right|_{x=-\varepsilon} &= -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0) - \frac{2mE}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi(x) dx \end{aligned} \quad (126)$$

agora, tomando o intervalo suficientemente pequeno de modo que no limite tenhamos $\varepsilon \rightarrow 0$ tem-se

$$\begin{aligned} \Delta \left[\frac{d\psi(x)}{dx} \right] &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\left. \frac{d\psi_{x>0}(x)}{dx} \right|_{x=\varepsilon} - \left. \frac{d\psi_{x<0}(x)}{dx} \right|_{x=-\varepsilon} \right] \\ &= -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0) - \underbrace{\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi(x) dx \right]}_0 \end{aligned} \quad (127)$$

é fácil de ver que $\psi(0) = \sqrt{k}$, assim podemos atualizar a nossa solução da $\psi(x)$ considerando a atuação do potencial delta no ponto em que se tem a descontinuidade, uma vez que em $x = 0$ devemos ter

$$\begin{aligned} -2k\sqrt{k} &= -\frac{2m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{k} \\ k &= \frac{m\alpha}{\hbar^2} \end{aligned} \quad (128)$$

logo

$$\psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}} e^{m\alpha x/\hbar^2}, & \text{se } x \leq 0 \\ \sqrt{\frac{m\alpha}{\hbar^2}} e^{-m\alpha x/\hbar^2}, & \text{se } x \geq 0 \end{cases}, \quad \text{e } E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \quad (129)$$

De posse desta solução, e do conhecimento de como ela se comporta em $x = 0$ podemos agora definir um γ tal que

$$\gamma = \sqrt{k} = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar} \quad (130)$$

Deseja-se mostrar que

$$\psi''(x) = -2\gamma^3\delta(x) + \gamma^4\psi(x) \quad (131)$$

Demonstração. Reescrevendo a solução para a $\psi(x)$ em termos do γ tem-se que

$$\psi(x) = \begin{cases} \gamma e^{\gamma^2 x}, & \text{se } x \leq 0 \\ \gamma e^{-\gamma^2 x}, & \text{se } x \geq 0 \end{cases} \quad (132)$$

Já sabemos como se comporta a derivada primeira da $\psi(x)$ em $x = 0$, o que em termos do fator γ fica simplesmente

$$\psi'(x) = \begin{cases} \gamma^3 e^{\gamma^2 x}, & \text{se } x \leq 0 \\ -\gamma^3 e^{-\gamma^2 x}, & \text{se } x \geq 0 \end{cases} \quad (133)$$

pra fazer a análise da derivada segunda da $\psi(x)$ no ponto em que há a descontinuidade $x = 0$, usamos a função degrau unitário de Heaviside $\theta(x)$ e reescrevemos a $\psi'(x)$ ficando com

$$\psi'(x) = \gamma^3 [\theta(-x)e^{\gamma^2 x} - \theta(x)e^{-\gamma^2 x}] \quad (134)$$

seguindo com a derivação e usando as propriedades da função $\theta(x)$

$$\begin{aligned} \psi''(x) &= \gamma^3 \left[\frac{d\theta(-x)}{dx} e^{\gamma^2 x} + \theta(-x)\gamma^2 e^{\gamma^2 x} - \frac{d\theta(x)}{dx} e^{-\gamma^2 x} + \theta(x)\gamma^2 e^{-\gamma^2 x} \right] \\ &= \gamma^3 [\delta(-x)e^{\gamma^2 x} + \theta(-x)\gamma^2 e^{\gamma^2 x} - \delta(x)e^{-\gamma^2 x} + \theta(x)\gamma^2 e^{-\gamma^2 x}] \\ &= -\gamma^3\delta(x) - \gamma^3\delta(x) + \gamma^5\theta(-x)e^{\gamma^2 x} + \gamma^5\theta(x)e^{-\gamma^2 x} \\ &= -2\gamma^3\delta(x) + \gamma^4 \underbrace{[\gamma\theta(-x)e^{\gamma^2 x} + \gamma\theta(x)e^{-\gamma^2 x}]}_{\psi(x)} \therefore \end{aligned} \quad (135)$$

$$\boxed{\psi''(x) = -2\gamma^3\delta(x) + \gamma^4\psi(x)} \quad (136)$$

□

- b) Cálculo dos valores médios e teste do princípio de incerteza, usando $\gamma = \sqrt{m\alpha}/\hbar^2$ pra simplificar os cálculos

Cálculo do $\langle x \rangle$:

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x)|^2 dx \\
 &= \gamma^2 \left[\int_{-\infty}^0 x e^{2\gamma^2 x} dx + \int_0^{\infty} x e^{-2\gamma^2 x} dx \right] \\
 &= \frac{1}{4\gamma^2} - \frac{1}{4\gamma^2} \implies \boxed{\langle x \rangle = 0}
 \end{aligned} \tag{137}$$

Cálculo do $\langle x^2 \rangle$:

$$\begin{aligned}
 \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx \\
 &= \gamma^2 \left[\int_{-\infty}^0 x^2 e^{2\gamma^2 x} dx + \int_0^{\infty} x^2 e^{-2\gamma^2 x} dx \right] \\
 &= \frac{1}{2\gamma^4} \implies \boxed{\langle x^2 \rangle = \frac{\hbar^4}{2m^2\alpha^2}}
 \end{aligned} \tag{138}$$

Cálculo do $\langle p \rangle$

$$\langle p \rangle = \frac{d\langle x \rangle}{dx} \implies \boxed{\langle p \rangle = 0} \tag{139}$$

Cálculo do $\langle p^2 \rangle$

$$\begin{aligned}
 \langle p^2 \rangle &= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi \left(\frac{d^2}{dx^2} \right) \psi dx \\
 &= -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \left[-2\gamma^3 \delta(x) + \gamma^4 \psi(x) \right] dx \\
 &= 2\hbar^2 \gamma^3 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \delta(x) dx}_{\psi(0) = \gamma} - \hbar^2 \gamma^4 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^2(x) dx \\
 &= 2\hbar^2 \gamma^4 - \hbar^2 \gamma^4 \left[\underbrace{\int_{-\infty}^0 \gamma^2 e^{2\gamma^2 x} dx + \int_0^{\infty} \gamma^2 e^{-2\gamma^2 x} dx}_1 \right] \\
 &= \hbar^2 \gamma^4 \implies \boxed{\langle p^2 \rangle = \frac{m^2 \alpha^2}{\hbar^2}}
 \end{aligned} \tag{140}$$

Verificando o princípio de incerteza

$$\begin{aligned}\sigma_x &= \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \\ &= \sqrt{\frac{h^4}{2m^2\alpha^2}} = \frac{\sqrt{2}\hbar^2}{2m\alpha}\end{aligned}\quad (141)$$

e

$$\begin{aligned}\sigma_p &= \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} \\ &= \sqrt{\frac{m^2\alpha^2}{\hbar^2}} = \frac{m\alpha}{\hbar}\end{aligned}\quad (142)$$

logo

$$\begin{aligned}\sigma_x\sigma_p &= \frac{\sqrt{2}\hbar^2}{2m\alpha} \frac{m\alpha}{\hbar} \\ &= \frac{\sqrt{2}\hbar}{2}\end{aligned}\quad (143)$$

princípio de incerteza, continua satisfeto

$$\boxed{\sigma_x\sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}} \quad (144)$$

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

$$\frac{\partial j}{\partial x} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \quad (145)$$

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

$$\rho = |\Psi(x, t)|^2 \quad (146)$$

e

$$j = \frac{i\hbar}{2m} \left[\Psi(x, t) \frac{\partial \Psi^*(x, t)}{\partial x} - \Psi^*(x, t) \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right] \quad (147)$$