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:** 19/03/2023 **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

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

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

$$\begin{aligned}2A^2\int_{0}^{+\infty} \mathrm{e}^{-2\lambda|x|}dx &= 1\\ 2A^2\left(-\frac{1}{2\lambda}\mathrm{e}^{-2\lambda x}\Big|_0^{+\infty}\right) &= 1\\ A^2 &= \lambda\\ A &= \sqrt{\lambda}\end{aligned} \tag{4}$$

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

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

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

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

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,

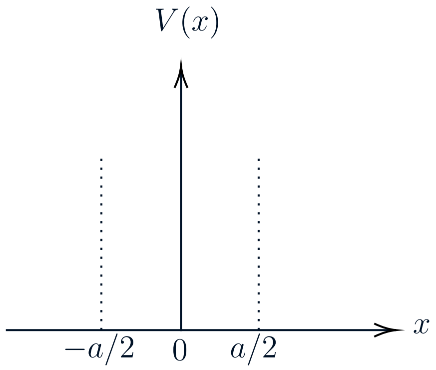
$$\begin{aligned}
\frac{d\langle p\rangle}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}\left\langle[\hat{p},V]\right\rangle \\
\frac{d\langle p\rangle}{dt} &= \left\langle-\frac{\partial V}{\partial x}\right\rangle
\end{aligned} \tag{13}$$

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

□

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

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

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

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

tal como anteriormente A é não nulo de modo que

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

ou seja

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

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

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

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

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

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