



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: 31/03/2023

Fase: LEF102-08U

PRIMEIRA AVALIAÇÃO

Resumo:

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

Sumário

Problema 01	1
Problema 02	1
Problema 03	3
Problema 04	7
Problema 05	9
Problema 06	10
Problema 07	10
Problema 08	11

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

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

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

Problema 2. O Teorema de Ehrenfest

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

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

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

$$\frac{d\langle Q \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{Q}, \hat{H}] \rangle \quad (6)$$

e obtenha o Teorema de Ehrenfest

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

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

o que resulta em

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

□

b) Dado que

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

ou seja

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

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

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

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,

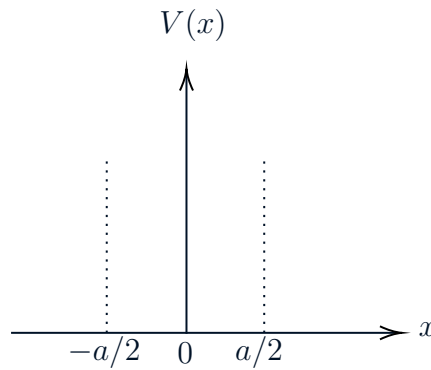
$$\begin{aligned}
\frac{d\langle p \rangle}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{p}, V] \rangle \\
\frac{d\langle p \rangle}{dt} &= \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle
\end{aligned} \tag{13}$$

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

□

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

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

manipulando a equação (15) obtemos

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

cuja 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

$$\psi(a/2) = A \sin(ka/2) + B \cos(ka/2) = 0 \quad (17a)$$

$$\psi(-a/2) = A \sin(-ka/2) + B \cos(-ka/2) = 0 \quad (17b)$$

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 $\sin(-x) = -\sin(x)$, já a função

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

$$\begin{aligned} A \sin(ka/2) + B \cos(ka/2) &= 0 \\ -A \sin(ka/2) + B \cos(ka/2) &= 0 \end{aligned} \quad (18)$$

resolvendo o sistema para o *coseno*, obtemos

$$2B \cos(ka/2) = 0 \quad (19)$$

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

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

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

$$2A \sin(ka/2) = 0 \quad (21)$$

tal como anteriormente A é não nulo de modo que

$$\sin\left(\frac{ka}{2}\right) = 0 \iff \frac{ka}{2} = \pi, 2\pi, 3\pi, \dots \quad (22)$$

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

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

e

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad (24)$$

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

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

$$(26)$$

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

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{-\frac{a}{2}} |\psi_n(x)|^2 dx + \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} |\psi_n(x)|^2 dx + \int_{\frac{a}{2}}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 dx &= 1 \\ \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} A_n^2 \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx &= 1 \\ A_n^2 \int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx &= 1 \end{aligned} \quad (27)$$

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

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

o que simplificando da

$$A_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (29)$$

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

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

procedendo de forma análoga obtemos

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

ou seja

$$B_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \quad (32)$$

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

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

e

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \quad (34)$$

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

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

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2 \quad (36)$$

Problema 4. Para o problema do poço quadrado infinito calculado em aula (poço assimétrico em torno da origem), calcule $\langle x \rangle$, $\langle x^2 \rangle$, $\langle p \rangle$ e $\langle p^2 \rangle$ e use-os para calcular as incertezas 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

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

logo, teremos

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

fazendo a substituição

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

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

e notando que

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

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

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

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

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

$$\int \sin^2 x \, dx = \frac{1}{2} \left[x - \frac{1}{2} \sin(2x) \right] \quad (40)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{2a}{n^2\pi^2} \int_0^{n\pi} u \sin^2 u \, du &= \frac{2a}{n^2\pi^2} \left\{ \frac{u}{2} \left[u - \frac{1}{2} \sin(2u) \right] \right|_0^{n\pi} \right\} - \frac{2a}{n^2\pi^2} \frac{1}{2} \int_0^{n\pi} \left[u - \frac{1}{2} \sin(2u) \right] du \\ &= \frac{2a}{n^2\pi^2} \left[\frac{u^2}{2} - \frac{u}{4} \sin(2u) \right] \Big|_0^{n\pi} - \frac{2a}{n^2\pi^2} \frac{1}{2} \left[\frac{u^2}{2} + \frac{1}{4} \cos(2u) \right] \Big|_0^{n\pi} \\ &= \frac{2a}{n^2\pi^2} \left[\frac{n^2\pi^2}{2} - \frac{n\pi}{4} \sin(2n\pi) - \frac{n^2\pi^2}{4} - \frac{1}{8} \cos(2n\pi) + \frac{1}{8} \right] = \langle x \rangle \end{aligned} \quad (41)$$

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

$$\langle x \rangle = \frac{2a}{n^2\pi^2} \left[\frac{n^2\pi^2}{2} - \frac{n^2\pi^2}{4} \right] = \frac{2a}{n^2\pi^2} \left(\frac{n^2\pi^2}{4} \right) \therefore \quad (42)$$

$$\boxed{\langle x \rangle = \frac{a}{2}} \quad (43)$$

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

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \int_0^a \frac{2}{a} x^2 \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{a} \right) dx \\ &= \frac{2}{a} \int_0^{n\pi} \left(\frac{a}{n\pi} \right)^2 u^2 \sin^2 u \left(\frac{a}{n\pi} \right) du \\ &= \frac{2}{a} \left(\frac{a}{n\pi} \right)^3 \int_0^{n\pi} u^2 \sin^2 u \, du \\ &= \frac{2a^2}{n^3\pi^3} \left[\frac{u^3}{6} - \frac{u^2}{4} \sin(2u) - \frac{u}{4} \cos(2u) + \frac{1}{8} \sin(2u) \right] \Big|_0^{n\pi} \\ &= \frac{2a^2}{n^3\pi^3} \left[\frac{n^3\pi^3}{6} - \frac{n^2\pi^2}{4} \underbrace{\sin(2n\pi)}_0 - \frac{n\pi}{4} \underbrace{\cos(2n\pi)}_1 + \frac{1}{8} \underbrace{\sin(2n\pi)}_0 \right] \\ &= \frac{2a^2}{n^3\pi^3} \left[\frac{n^3\pi^3}{6} - \frac{n\pi}{4} \right] \end{aligned} \quad (44)$$

portanto,

$$\boxed{\langle x^2 \rangle = \frac{a^2}{3} - \frac{1}{2} \left(\frac{a}{n\pi} \right)^2} \quad (45)$$

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

$$\langle p \rangle = \frac{d\langle x \rangle}{dt} \quad (46)$$

logo

$$\langle p \rangle = \frac{d}{dt} \left(\frac{a}{2} \right) \quad (47)$$

ou simplesmente

$$\boxed{\langle p \rangle = 0} \quad (48)$$

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 ($V = 0$)

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi &= E\psi \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} &= E_n\psi_n(x) \\ \frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} &= -\frac{2mE_n}{\hbar^2}\psi_n(x) \end{aligned} \quad (49)$$

atento a isto, segue que

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= \int_0^a \psi_n^*(x) \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right)^2 \psi_n(x) dx \\ &= -\hbar^2 \int_a^b \psi^*(x) \frac{d^2\psi_n(x)}{dx^2} dx \\ &= \hbar^2 \frac{2mE_n}{\hbar^2} \int_0^a \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx \end{aligned} \quad (50)$$

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

$$\langle p^2 \rangle = 2mE_n \quad (51)$$

em sala de aula, encontramos para o valor de energia

$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2} \quad (52)$$

então

$$\boxed{\langle p^2 \rangle = \left(\frac{n\pi\hbar}{a} \right)^2} \quad (53)$$

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

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

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

Solução 5.

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

- a) Mostre que

$$[\hat{a}_-, \hat{a}_+] = 1 \quad (54)$$

- b) Utilizando a equação

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}_+)^n \psi_0 \quad (55)$$

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

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

Solução 6.

Problema 7. Para o oscilador harmônico pelo método analítico:

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

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x, \quad (56)$$

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

$$\phi(\xi) = h(\xi)e^{-\xi^2/2} \quad (57)$$

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 $h(\xi)$

$$\frac{d^2 h(\xi)}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dh(\xi)}{d\xi} + (K - 1) h(\xi) = 0 \quad (58)$$

e obtenha a relação de recorrência entre os coeficientes.

Solução 7.
