FNC375N: Lista 8

25/11/2004

O poço quadrado infinito

1. Um próton se encontra num poço infinito de largura L. Compute a energia do estado fundamental para (a) $L = 0{,}1\,\mathrm{nm}$, o tamanho aproximado de uma molécula, e (b) $L = 1\,\mathrm{fm}$, o tamanho aproximado de um núcleo.

2. Considere um poço infinito com as paredes em $x = 0$ e $x = L$.

   (a) Escreva a função de onda normalizada do estado fundamental de uma partícula neste poço.

   (b) Para o estado fundamental, compute a probabilidade de a partícula ser encontrada num intervalo de largura $\Delta x = 2L/1000$ nas proximidades de (i) $x = L/2$, (ii) $x = 2L/3$ e (iii) $x = L$ (como Δx é muito pequeno, não é necessário efetuar nenhuma integração).

3. Repita o problema anterior para o caso de uma partícula no segundo estado excitado.

4. Um corpo de massa $m = 1\,\mu\mathrm{g}$ está se movendo com velocidade de $10^{-1}\,\mathrm{cm/s}$ em uma caixa de $1\,\mathrm{cm}$ de comprimento. Considerando a caixa como um poço infinito unidimensional, compute o número aproximado do número quântico n associado ao estado da partícula.

5. O comprimento de onda da luz emitida por um laser de rubi é $694{,}3\,\mathrm{nm}$. Qual seria a largura L de um poço infinito tal que um fóton deste comprimento de onda fosse emitido na transição de um elétron do estado $n = 2$ para o estado $n = 1$?

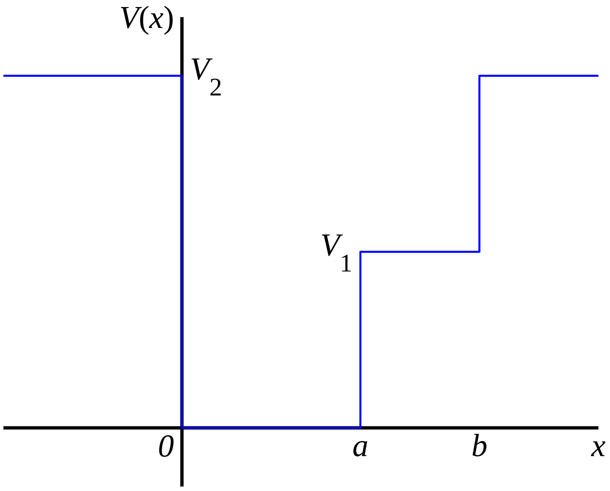
6. Uma partícula se encontra no estado $n = 5$ de um poço infinito de largura L. Calcule a probabilidade da partícula ser encontrada na região entre $2L/5 < x < 4L/5$.

7. Um elétron se encontra no estado fundamental de um poço unidimensional infinito de largura $L = 1$ Å. Compute a "força"que o elétron exerce ao se chocar com uma das paredes do poço, e compare-a com o peso de um elétron na superfície da Terra. (Sugestão: $F = -\mathrm{d}E_n\mathrm{d}L$. Por quê?)

O poço quadrado finito

1. Um elétron está confinado a um poço quadrado finito de altura $8{,}0\,\mathrm{eV}$ e a energia do seu estado fundamental é $0{,}5\,\mathrm{eV}$. Faça uma estimativa da largura do poço utilizando as expressões para o poço infinito. A largura real do poço é maior ou menor que esta estimativa. Explique.

2. Levando em conta características como curvatura, comprimento de onda e amplitude, esboce gráficos para funções de onda de uma partícula no potencial representado na figura. Considere energia tais que $0 < E < V_1$ e $V_1 < E < V_2$.



Valores esperados e operadores

1. Determine $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$ para o estado $n = 3$ de um poço infinito unidimensional.

2. Mostre que a distribuição de probabilidade clássica para uma partícula em um poço infinito unidimensional de largura L é dada por $P(x) = 1/L$. Utilize este resultado para calcular $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$ para uma partícula clássica neste tipo de poço.

3. Mostre, a partir da Equação de Schrödinger dependente do tempo, que
$$\left\langle p^2 \right\rangle = \langle 2m[E - V(x)] \rangle \,,$$
para qualquer potencial $V(x)$. Mostre que, no caso do poço infinito, isto leva a $\langle p^2 \rangle = 2m \langle E \rangle$.

4. Calcule os desvios padrões da posição, $\sigma_x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$, e do momento, $\sigma_p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$, para o estado fundamental do poço quadrado infinito. Compare o produto $\sigma_x \sigma_p$ com o princípio da incerteza.

5. Uma partícula se encontra num estado dado por
$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_1(x,t) + \Psi_2(x,t) \right] ,$$
em que $\Psi_n(x,t)$ representa a auto-função normalizada do estado estacionário n de um poço infinito de largura L, com paredes em $x = -L/2$ e $x = +L/2$. Verifique que esta função de onda é normalizada. Determine os valores esperados e respectivos desvios padrão para as seguintes grandezas: a posição, o momento, e a energia da partícula.

Integrais úteis

$$\begin{aligned}
\int \operatorname{sen}(u)^2 \mathrm{d}u &= \frac{u}{2} - \frac{1}{4}\operatorname{sen}(2u) \\
\int u \operatorname{sen}(u)^2 \mathrm{d}u &= \frac{u^2}{4} - \frac{1}{8}\cos(2u) - \frac{u}{4}\sin(2u) \\
\int u^2 \operatorname{sen}(u)^2 \mathrm{d}u &= \frac{u^3}{6} - \frac{u}{4}\cos(2u) - \frac{1}{8}(-1+2u^2)\sin(2u) \\
\int u^3 \operatorname{sen}(u)^2 \mathrm{d}u &= \frac{u^4}{8} - \frac{3}{16}(-1+2u^2)\cos(2u) - \frac{u}{8}(-3+2u^2)\sin(2u) \\
\int u^4 \operatorname{sen}(u)^2 \mathrm{d}u &= \frac{u^5}{10} - \frac{u}{4}(-3+2u^2)\cos(2u) - \frac{1}{8}(3-6u^2+2u^4)\sin(2u)
\end{aligned}$$

Solução do Problema 5

Recapitulando: as funções $\Psi_n(x,t)$ para o poço infinito têm a forma

$$\Psi_n(x,t) \quad = \quad \psi_n(x)\mathrm{e}^{-i\omega_n t},$$

em que $\psi_n(x)$ satisfaz a Equação de Schrödinger independente do tempo, com auto-valores da energia $E_n = \hbar\omega_n$. Dentro do poço infinito, $-L/2 < x < +L/2$, $V(x) = 0$ e a equação fica

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi_n}{\mathrm{d}x^2} = E_n\psi_n(x).$$

Na região interna ao poço, as soluções normalizadas podem ser escritas na forma

$$\psi_n(x) \quad = \quad \sqrt{\frac{2}{L}}\,\mathrm{sen}\left[k_n\left(x + L/2\right)\right] = \sqrt{\frac{2}{L}}\,\mathrm{sen}\left[\frac{n\pi}{L}\left(x + L/2\right)\right] \tag{1}$$

$$\text{com} \qquad E_n = \frac{\hbar k_n^2}{2m} = \frac{\hbar\pi^2}{2mL^2}n^2. \tag{2}$$

Fora do poço, $\psi_n(x) = 0$. A quantização da energia vem das condições de contorno que, no caso, exigem a continuidade da função em todos os pontos. Em particular, nas paredes do poço $\psi_n(-L/2) = \psi_n(+L/2) = 0$.

Vamos tomar uma função um pouco mais geral que a do problema escrevendo

$$\Psi(x,t) \quad = \quad c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t). \tag{3}$$

A função dada no problema corresponde a tomar $c_1 = c_2 = 1/\sqrt{2}$.

A condição de normalização se escreve

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)\mathrm{d}x = 1.$$

Tomando a forma dada em (3), a densidade de probabilidade fica

$$\begin{aligned}|\Psi(x,t)|^2 \quad = \quad & |c_1|^2\psi_1^*(x)\psi_1(x) + |c_2|^2\psi_2^*(x)\psi_2(x) \\ & + c_1^*c_2\mathrm{e}^{-i(\omega_2-\omega_1)t}\psi_1^*(x)\psi_2(x) + c_2^*c_1\mathrm{e}^{+i(\omega_2-\omega_1)t}\psi_2^*(x)\psi_1(x).\end{aligned}$$

Note que as duas primeiras parcelas que compõem a densidade de probabilidade são independentes do tempo, enquanto as duas últimas constituem termos oscilatórios com freqüência $\omega_2 - \omega_1$.

As auto-funções normalizadas $\psi_n(x)$ têm a propriedade

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_j^*(x)\psi_\ell(x)\mathrm{d}x = \delta_{j\ell},, \tag{4}$$

onde o símbolo $\delta_{j\ell}$, denominado *delta de Kronecker*, significa

$$\delta_{j\ell} = \begin{cases} 1, & \text{se } j = \ell, \\ 0, & \text{se } j \neq \ell. \end{cases}$$

Utilizando esta propriedade, vemos que a condição de normalização para $\Psi(x,t)$ resulta em

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x,t)|^2 \mathrm{d}x = |c_1|^2 + |c_2|^2 = 1.$$

Esta condição é satisfeita para a função dada.

Vamos verificar a propriedade (4) no caso do poço infinito. Tomando $\psi_n(x)$ da Eq. (1), temos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_j^*(x)\psi_\ell(x)\mathrm{d}x = \frac{2}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} \operatorname{sen}\left[\frac{j\pi}{L}(x+L/2)\right] \operatorname{sen}\left[\frac{\ell\pi}{L}(x+L/2)\right]\mathrm{d}x$$

O produto dos senos pode ser transformado numa soma de cossenos através da identidade

$$\cos(A-B) - \cos(A+B) = 2\operatorname{sen}A\operatorname{sen}B,$$

resultando

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_j^*(x)\psi_\ell(x)\mathrm{d}x &= \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} \cos\left[\frac{(j-\ell)\pi}{L}(x+L/2)\right]\mathrm{d}x \\ &\quad -\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} \cos\left[\frac{(j+\ell)\pi}{L}(x+L/2)\right]\mathrm{d}x. \end{aligned} \tag{5}$$

Se $j \neq \ell$ ambas as integrais são nulas, como veremos. Para cada uma delas podemos fazer a substituição de variável

$$u = \frac{(j\pm\ell)\pi}{L}(x+L/2)\,, \quad \mathrm{d}u = \frac{(j\pm\ell)\pi}{L}\mathrm{d}x,$$

obtendo

$$\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} \cos\left[\frac{(j\pm\ell)\pi}{L}(x+L/2)\right]\mathrm{d}x = \frac{1}{(j\pm\ell)\pi}\int_0^{(j\pm\ell)\pi} \cos u\mathrm{d}u.$$

Assim, cada uma delas se reduz a uma integral do cosseno entre 0 e um múltiplo inteiro de π. Elas são, portanto, nulas porque o cosseno muda de sinal no centro de cada um dos intervalos. Explicitamente,

$$\int_0^{(j\pm\ell)\pi} \cos u\mathrm{d}u = \operatorname{sen}u\,\Big|_0^{(j\pm\ell)\pi} = \operatorname{sen}[(j\pm\ell)\pi] - 0 = 0,$$

porque $j\pm\ell$ é um inteiro.

Se $j=\ell$ a segunda integral, envolvendo $j+\ell$ tem a mesma forma que as agora discutidas e é, assim, nula. A primeira integral, como $j-\ell=0$ e $\cos(0)=1$, fica simplesmente

$$\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{+L/2}\mathrm{d}x = 1,$$

confirmando que as auto-funções utilizadas são normalizadas.

Assim, verificamos a propriedade de ortogonalidade (4) dos auto-estados do poço infinito unidimensional. Relembro e enfatizo que esta é uma propriedade geral dos auto-estados da Eq. de Schrödinger independente do tempo qualquer que seja o potencial.

Valor Esperado da posição

O valor esperado da posição, x, da partícula é dado por

$$\langle x\rangle \quad = \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)\mathrm{d}x$$

que, com a forma dada de $\Psi(x,t)$ resulta em

$$\begin{aligned} \langle x\rangle \quad &= \quad |c_1|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*(x)x\psi_1(x)\mathrm{d}x+|c_2|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2^*(x)x\psi_2(x)\mathrm{d}x \\ &\quad +c_1^*c_2\mathrm{e}^{-i(\omega_2-\omega_1)t}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*(x)x\psi_2(x)\mathrm{d}x+c_2^*c_1\mathrm{e}^{+i(\omega_2-\omega_1)t}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2^*(x)x\psi_1(x)\mathrm{d}x. \end{aligned}$$

Note que nas duas primeiras parcelas, independentes do tempo, as integrais significam os valores esperados da posição em cada um dos auto-estados, ψ_1 e ψ_2:

$$\langle x\rangle_n = \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_n^*(x)x\psi_n(x)\mathrm{d}x = 0.$$

Pela simetria da densidade de probabilidade nestes estados, o valor esperado da posição é o centro do poço, que no caso é a origem $x=0$. Outra maneira de ver este resultado é a partir da paridade do integrando: A função $f(x)=x|\psi_n|^2$ é uma função ímpar ($f(-x)=-f(x)$, ou quando se troca x por $-x$ a função simplesmente muda de sinal. Integradas num intervalo simétrico em relação à origem tais funções resultam numa integral nula.

As duas outras parcelas são uma o complexo conjugado da outra, resultando num termo real. Podemos simplificar a expressão escrevendo, por exemplo: $c_2^*c_1=c^2\mathrm{e}^{i\phi}$, com c^2 real. Como as funções $\psi_n(x)$ foram tomadas reais, obtemos

$$\begin{aligned} \langle x\rangle \quad &= \quad \left(c_1^*c_2\mathrm{e}^{-i(\omega_2-\omega_1)t}+c_2^*c_1\mathrm{e}^{+i(\omega_2-\omega_1)t}\right)\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1(x)x\psi_2(x)\mathrm{d}x \\ &= \quad c^2\left(\mathrm{e}^{-i(\omega_2-\omega_1)t-\phi}+\mathrm{e}^{+i(\omega_2-\omega_1)t+\phi}\right)\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1(x)x\psi_2(x)\mathrm{d}x \\ &= \quad 2c^2\cos\left[(\omega_2-\omega_1)t+\phi\right]\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1(x)x\psi_2(x)\mathrm{d}x \\ &= \quad x_0\cos\left[(\omega_2-\omega_1)t+\phi\right]. \end{aligned}$$

Verificamos que o valor esperado da posição depende do tempo, com uma parte oscilatória de freqüência $\omega=\omega_2=\omega_1$ e amplitude

$$x_0 = 2c^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1(x)x\psi_2(x)\mathrm{d}x = 2c^2\langle x\rangle_{1,2}.$$

A integral nesta expressão é proporcional ao denominado elemento de matriz do dipolo elétrico entre os estados ψ_1 e ψ_2.

Vamos computar $\langle x\rangle_{j,\ell}$ para os auto-estados do poço infinito. Com as expressões (1) escrevemos,

$$\begin{aligned} \langle x\rangle_{j,\ell} \quad &= \quad \int_{-\infty}^{+\infty}\psi_j^*(x)x\psi_\ell(x)\mathrm{d}x \\ &= \quad \frac{2}{L}\int_{=L/2}^{+L/2}\mathrm{sen}\left[\frac{j\pi}{L}(x+L/2)\right]x\,\mathrm{sen}\left[\frac{\ell\pi}{L}(x+L/2)\right]\mathrm{d}x. \end{aligned}$$

Refazendo o procedimento que resultou na equação (5), obtemos

$$\begin{aligned} \langle x \rangle_{j,\ell} &= \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} x\cos\left[\frac{(j-\ell)\pi}{L}\,(x+L/2)\right]\mathrm{d}x \\ &\quad -\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} x\cos\left[\frac{(j+\ell)\pi}{L}\,(x+L/2)\right]\mathrm{d}x. \end{aligned} \tag{6}$$

Com a mesma substituição de variáveis,

$$u = \frac{(j\pm\ell)\pi}{L}\,(x+L/2)\,, \quad \mathrm{d}u = \frac{(j\pm\ell)\pi}{L}\mathrm{d}x,$$

obtemos

$$\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} x\cos\left[\frac{(j\pm\ell)\pi}{L}\,(x+L/2)\right]\mathrm{d}x \;=\; \frac{L}{(j\pm\ell)^2\pi^2}\int_0^{(j\pm\ell)\pi}[u-(j\pm\ell)\pi/2]\cos u\mathrm{d}u.$$

Uma vez que

$$\int_0^{(j\pm\ell)\pi}\cos u\mathrm{d}u = 0,$$

nos resta computar a integral

$$\int_0^{(j\pm\ell)\pi} u\cos u\mathrm{d}u.$$

Ela pode ser obtida integrando por partes, $\int u\mathrm{d}v = uv - \int v\mathrm{d}u$, com $\mathrm{d}v = \cos u\mathrm{d}u$, $v = \operatorname{sen} u$:

$$\begin{aligned} \int_0^{(j\pm\ell)\pi} u\cos u\mathrm{d}u &= u\operatorname{sen} u\,\Big|_0^{(j\pm\ell)\pi} - \int_0^{(j\pm\ell)\pi}\operatorname{sen} u\mathrm{d}u \\ &= \cos u\,\Big|_0^{(j\pm\ell)\pi}. \end{aligned}$$

Como $\cos(n\pi) = (-1)^n$, obtemos

$$\int_0^{(j\pm\ell)\pi} u\cos u\mathrm{d}u \;=\; (-1)^{(j\pm\ell)} - 1.$$

Verificamos que se $j\pm\ell$ é um número par, a integral se anula. Se $j\pm\ell$ é um número ímpar o resultado é -2. Observe que a diferença $j-\ell$ tem a mesma paridade que a soma $j+\ell$. Assim, obtemos a regra de seleção para o poço infinito: só são não nulos os elementos de matriz do dipolo entre estados de paridade diferente, ou seja, se $j-\ell$ for um número ímpar. Assim,

$$\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} x\cos\left[\frac{(j\pm\ell)\pi}{L}\,(x+L/2)\right]\mathrm{d}x \;=\; \frac{-2L}{(j\pm\ell)^2\pi^2}, \quad \text{para} \quad (j\pm\ell) \quad \text{ímpar}.$$

Substituindo este resultado na expressão (6) para $\langle x\rangle_{j,\ell}$, temos:

$$\begin{aligned}\langle x\rangle_{j,\ell} &= \frac{1}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} x\cos\left[\frac{(j-\ell)\pi}{L}(x+L/2)\right]\mathrm{d}x\\ &\quad -\frac{1}{L}\int_{-L/2}^{+L/2} x\cos\left[\frac{(j+\ell)\pi}{L}(x+L/2)\right]\mathrm{d}x\\ &= -\frac{2L}{\pi^2}\left[\frac{1}{(j-\ell)^2}-\frac{1}{(j+\ell)^2}\right]\end{aligned}$$

Ou seja,

$$\langle x\rangle_{j,\ell} = \langle x\rangle_{\ell,j} = \begin{cases} -\dfrac{2L}{\pi^2}\left[\dfrac{4j\ell}{(j^2-\ell^2)^2}\right], \text{ para } (j\pm\ell) \text{ ímpar.}\\ 0, \text{ para } (j\pm\ell) \text{ par.}\end{cases}$$

Para a função de onda do problema $j=1$, $\ell=2$ e, $\langle x\rangle_{1,2} = -16L/9\pi^2$. Com $c_1=c_2=1/\sqrt{2}$, $2c^2=1$ e $\phi=0$, resulta $x_0=\langle x\rangle_{1,2}$, e

$$\langle x\rangle = -\frac{16L}{9\pi^2}\cos[(\omega_2-\omega_1)t].$$

Para computar a incerteza na posição é necessário obter $\langle x^2\rangle$. O procedimento para obter $\langle x\rangle$ deve ser refeito com x^2 no lugar de x. É tudo muito similar e tedioso.

Valor esperado do momento

Ao momento linear é associado o operador $\hat{p}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$, e o seu valor esperado no estado $\Psi(x,t)$ se escreve

$$\langle p\rangle = -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi^*(x,t)\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial x}\mathrm{d}x.$$

Com a forma dada de $\Psi(x,t)$ teremos

$$\begin{aligned}\frac{i}{\hbar}\langle p\rangle &= |c_1|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*(x)\frac{\mathrm{d}\psi_1}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x + |c_2|^2\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2^*(x)\frac{\mathrm{d}\psi_2}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x\\ &\quad + c_1^*c_2\mathrm{e}^{-i(\omega_2-\omega_1)t}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_1^*(x)\frac{\mathrm{d}\psi_2}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x + c_2^*c_1\mathrm{e}^{+i(\omega_2-\omega_1)t}\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_2^*(x)\frac{\mathrm{d}\psi_1}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x.\end{aligned}$$

Pela paridade dos integrandos podemos notar que as duas primeiras integrais são nulas (se $f(x)$ é par, $\mathrm{d}f/\mathrm{d}x$ é ímpar, e vice-versa, de modo que o produto $f\mathrm{d}f/\mathrm{d}x$ é sempre ímpar). As outras duas são da forma

$$\begin{aligned}\langle p\rangle_{j,\ell} &= -i\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}\psi_j^*(x)\frac{\mathrm{d}\psi_\ell}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x\\ &= \frac{-2i\hbar}{L}\frac{\ell\pi}{L}\int_{-L/2}^{+L/2}\mathrm{sen}\left[\frac{j\pi}{L}(x+L/2)\right]\cos\left[\frac{\ell\pi}{L}(x+L/2)\right]\mathrm{d}x.\end{aligned}$$

O produto pode ser expresso como uma soma utilizando $\operatorname{sen}(A+B)+\operatorname{sen}(A-B) = 2\operatorname{sen}A\cos B$, e obtemos integrais simples do seno:

$$\begin{aligned}
\langle p \rangle_{j,\ell} &= \frac{-i\hbar\ell\pi}{L^2}\int_{-L/2}^{+L/2}\left\{\operatorname{sen}\left[\frac{(j+\ell)\pi}{L}(x+L/2)\right]+\operatorname{sen}\left[\frac{(j-\ell)\pi}{L}(x+L/2)\right]\right\}\mathrm{d}x \\
&= \frac{-i\hbar\ell\pi}{L^2}\left\{-\frac{L}{(j+\ell)\pi}\cos\left[\frac{(j+\ell)\pi}{L}(x+L/2)\right]_{-L/2}^{+L/2}\right. \\
&\qquad \left. -\frac{L}{(j-\ell)\pi}\cos\left[\frac{(j-\ell)\pi}{L}(x+L/2)\right]_{-L/2}^{+L/2}\right\} \\
&= \frac{i\hbar\ell}{L}\left\{\frac{\cos[(j+\ell)\pi]-1}{j+\ell}+\frac{\cos[(j-\ell)\pi]-1}{j-\ell}\right\}.
\end{aligned}$$

Se $j\pm\ell$ são pares, $\cos[(j\pm\ell)\pi]=1$ e as integrais são nulas. Se $j\pm\ell$ são ímpares, $\cos[(j\pm\ell)\pi] = -1$ e obtemos:

$$\langle p \rangle_{j,\ell} = \frac{-2i\hbar\ell}{L}\left\{\frac{1}{j+\ell}+\frac{1}{j-\ell}\right\},$$

e finalmente,

$$\langle p \rangle_{j,\ell} = -\langle p \rangle_{\ell,j} = \begin{cases} \dfrac{i\hbar}{L}\dfrac{4j\ell}{\ell^2-j^2}, \text{ para } (j\pm\ell) \text{ ímpar} \\ 0, \text{ para } (j\pm\ell) \text{ par.} \end{cases}$$

Note que a regra da paridade diferente também se aplica a estes resultados. Substituindo este resultado, utilizando a identidade $\sin(u) = (\mathrm{e}^{+iu}-\mathrm{e}^{-iu})/(2i)$, e escrevendo como antes $c_2^*c_1 = c^2\mathrm{e}^{i\phi}$, obtemos para $\langle p \rangle$, depois:

$$\langle p \rangle = \frac{2\hbar c^2}{L}\frac{4j\ell}{\ell^2-j^2}\operatorname{sen}[(\omega_\ell-\omega_j)t+\phi].$$

Verifique que vale a relação:

$$\langle p \rangle = m\frac{\mathrm{d}\langle x \rangle}{\mathrm{d}t}.$$

Para a função de onda do problema $j=1$, $\ell=2$, $c_1=c_2=1/\sqrt{2}$, $2c^2=1$ e $\phi=0$, resultando

$$\langle p \rangle = \frac{8\hbar}{3L}\operatorname{sen}[(\omega_2-\omega_1)t].$$

Valor esperado da energia

O operador associado á energia é o hamiltoniano, $\mathcal{H} = K+V$, que neste caso é simplesmente

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}.$$

Assim,

$$\langle E\rangle = \langle \mathcal{H}\rangle \;=\; \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)\mathcal{H}\Psi(x,t)\mathrm{d}x.$$

O efeito de aplicar $\mathcal{H}$ sobre a função de onda $\Psi(x,t)$ é simples neste caso, uma vez que os auto-estados $\Psi_n(x,t)$ obedecem a

$$\mathcal{H}\Psi_n(x,t) \;=\; \mathcal{H}\psi_n(x)\mathrm{e}^{-i\omega_n t} = E_n\psi_n(x)\mathrm{e}^{-i\omega_n t} = E_n\Psi_n(x,t).$$

Assim, para $\Psi(x,t) = c_1\Psi_1(x,t) + c_2\Psi_2(x,t)$

$$\mathcal{H}\Psi(x,t) \;=\; c_1E_1\Psi_1(x,t) + c_2E_2\Psi_2(x,t),$$

e

$$\begin{aligned}
\langle E\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[c_1^*\Psi_1^*(x,t) + c_2^*\Psi_2^*(x,t)\right]\left[c_1E_1\Psi_1(x,t) + c_2E_2\Psi_2(x,t)\right]\mathrm{d}x \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[|c_1|^2E_1|\Psi_1|^2 + |c_2|^2E_2|\Psi_2|^2\right]\mathrm{d}x \\
&\quad + \int_{-\infty}^{+\infty} \left[c_1^*c_2E_1\Psi_1^*\Psi_2 + c_2^*c_1E_2\Psi_2^*\Psi_1\right]\mathrm{d}x.
\end{aligned}$$

A segunda integral é nula, devido à ortogonalidade dos auto-estados (equação 4). As duas primeiras ficam

$$\langle E\rangle \;=\; |c_1|^2E_1\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi_1|^2\mathrm{d}x + |c_2|^2E_2\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi_2|^2\mathrm{d}x = |c_1|^2E_1 + |c_2|^2E_2.$$

Lembre-se que a condição de normalização exige que $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$. O valor médio da energia, portanto, resulta $E_1 \le \langle E\rangle \le E_2$. Observe que o valor esperado da energia é constante, ou seja, independente do tempo. Esta é a versão quântica da conservação da energia.

No caso do problema $c_1 = c_2 = 1/\sqrt{2}$ e

$$\langle E\rangle \;=\; \frac{E_1+E_2}{2} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\frac{1^2+2^2}{2} = \frac{5}{4}\frac{\hbar^2\pi^2}{mL^2}.$$

Para calcular a incerteza na energia, $\sigma_E = \sqrt{\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2}$, falta computar $\langle E^2\rangle$. Esta operação é tão simples quanto a anterior, uma vez que

$$\mathcal{H}^2\Psi_n(x,t) \;=\; \mathcal{H}(\mathcal{H}\Psi_n(x,t)) = E_n^2\Psi_n(x,t).$$

Assim, simplesmente substituindo E_n^2 no lugar de E_n nas fórmulas da energia, obtemos

$$\left\langle E^2\right\rangle \;=\; |c_1|^2E_1^2 + |c_2|^2E_2^2.$$

Para a incerteza, temos:

$$\sigma_E^2 \;=\; \left\langle E^2\right\rangle - \langle E\rangle^2 = |c_1|^2(1-|c_1|^2)E_1^2 + |c_2|^2(1-|c_2|^2)E_1^2 - |c_1|^2|c_2|^2E_1E_2.$$

Observe que quando um dos coeficientes é tal que $|c_n| = 1$ e, conseqüentemente, o outro é nulo, o sistema se encontra no estado estacionário $\Psi_n(x,t)$. Neste caso o valor médio da energia é $\langle E \rangle = E_n$ e a incerteza é $\sigma_E = 0$. Nos estados estacionários a energia é perfeitamente definida na teoria de Schrödinger.

Para o caso do problema em que $c_1 = c_2 = 1\sqrt{2}$ esta expressão se reduz a

$$\sigma_E^2 = \frac{(E_2 - E_1)^2}{4}$$

que resulta em

$$\sigma_E = \frac{|E_2 - E_1|}{2} = \frac{3\hbar^2\pi^2}{4mL^2}.$$

Observe também que no caso do poço infinito $\mathcal{H} = p^2/2m$, e portanto $\langle E \rangle = \langle p^2 \rangle /2m$. Assim, no estado do problema

$$\left\langle p^2 \right\rangle = 2m \langle E \rangle = \frac{5}{2}\frac{\hbar^2\pi^2}{L^2}.$$

A incerteza no momento pode ser então computada facilmente. O resultado é

$$\sigma_p^2 = \left\langle p^2 \right\rangle - \langle p \rangle^2 = \left(\frac{\hbar\pi}{L}\right)^2 \left[\frac{5}{2} - \left(\frac{8}{3\pi}\,\mathrm{sen}[(\omega_2 - \omega_2)t]\right)^2\right].$$