

1. Considere um sistema de dimensão dois em que o operador Hamiltoniano é dado por:

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \cdot \leftarrow$$

- (a) Quais são os valores possíveis para a energia desse sistema? $E_1 = 3, E_2 = -1$
(b) Quais estados possuem energia bem definida? $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$
(c) Qual é a probabilidade de cada resposta se medirmos a energia em um sistema no estado $|0\rangle$? $p(E_1) = p(E_2)$
(d) Qual é a evolução temporal de um estado arbitrário desse sistema?

$$|\psi(t)\rangle = \alpha e^{-3it/\hbar} |\psi_1\rangle + \beta e^{it/\hbar} |\psi_2\rangle = \frac{1}{2}$$

a) e b)

Valores possíveis para a energia: os autovalores de H

Estados com energia bem definida: autovetores de H

Encontrar autovetores e autovalores de H :

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\det(H - \lambda I) = 0$$

$$H - \lambda I = \begin{bmatrix} 1-\lambda & 2 \\ 2 & 1-\lambda \end{bmatrix}$$

$$\det(H - \lambda I) = (1-\lambda)^2 - 4 = 0$$

$$\lambda^2 - 2\lambda + 1 - 4 = 0$$

$$\lambda^2 - 2\lambda - 3 = 0$$

$$S = 2$$

$$P = -3$$

$$\underline{\lambda_1 = 3}$$

$$\underline{\lambda_2 = -1}$$

Valores possíveis para a energia

Autovetores para $\lambda_1 = 3$

$$\begin{bmatrix} 1 - \lambda_1 & 2 \\ 2 & 1 - \lambda_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} -2 & 2 \\ 2 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$-2v_1 + 2v_2 = 0 \Rightarrow v_1 = v_2$$

$$|\psi_1\rangle = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_1 \end{bmatrix} \quad v_1 \in \mathbb{C}$$

Normalização: $\|\psi_1\|^2 = 1$

$$|v_1|^2 + |v_1|^2 = 1$$

$$2|v_1|^2 = 1$$

$$|v_1|^2 = \frac{1}{2}$$

$$|v_1| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Escolhemos a possibilidade mais simples

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$|\psi_1\rangle = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix}$$

Estado com energia bem definida

$$E_1 = 3$$

Autovetores para $\lambda_2 = -1$

$$\begin{bmatrix} 1 - \lambda_2 & 2 \\ 2 & 1 - \lambda_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$2v_1 + 2v_2 = 0 \Rightarrow v_1 = -v_2$$

$$|\Psi_2\rangle = \begin{bmatrix} v_1 \\ -v_1 \end{bmatrix}$$

Normalização: $\|\Psi_2\|^2 = 1$ → condição de normalização

$$|v_1|^2 + |-v_1|^2 = 1$$

$$2|v_1|^2 = 1$$

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

→ escolha mais simples

$$|\Psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

vetor com energia bem definida

$$E_2 = -1$$

c) $|0\rangle = \alpha |\Psi_1\rangle + \beta |\Psi_2\rangle$

$$|\Psi_1\rangle = |+\rangle$$

$$|\Psi_2\rangle = |-\rangle$$

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle$$

$$P(E_1) = |\alpha|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2}$$

$$P(E_2) = |\beta|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \right|^2 = \frac{1}{2}$$

Caso geral:

$$|\psi\rangle = \underline{\alpha} |\psi_1\rangle + \beta |\psi_2\rangle$$

$$\langle \psi_1 | \psi \rangle = \alpha \underbrace{\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle}_{=1} + \beta \underbrace{\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle}_{=0}$$

$$\alpha = \underline{\langle \psi_1 | \psi \rangle}$$

$$\langle \psi_2 | \psi \rangle = \alpha \underbrace{\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle}_{=0} + \beta \underbrace{\langle \psi_2 | \psi_2 \rangle}_{=1}$$

$$\beta = \langle \psi_2 | \psi \rangle$$

No nosso exemplo:

$$\alpha = \langle \psi_1 | \psi \rangle = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\beta = \langle \psi_2 | \psi \rangle = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$P(E_1) = |\alpha|^2 = \frac{1}{2}$$

$$P(E_2) = |\beta|^2 = \frac{1}{2}$$

d) Evolução temporal dos estados estacionários

$$\begin{aligned} |\Psi_1(t)\rangle &= e^{-iE_1 t/\hbar} |\Psi_1\rangle \\ &= e^{-3it/\hbar} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |\Psi_2(t)\rangle &= e^{-iE_2 t/\hbar} |\Psi_2\rangle \\ &= e^{it/\hbar} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

$$|\Psi\rangle = \alpha |\Psi_1\rangle + \beta |\Psi_2\rangle \leftarrow$$

$$|\Psi(t)\rangle = \alpha |\Psi_1(t)\rangle + \beta |\Psi_2(t)\rangle$$

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= \alpha e^{-3it/\hbar} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{bmatrix} \\ &\quad + \beta e^{it/\hbar} \begin{bmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

2. A função de onda de uma partícula de massa m sujeita ao potencial

$$U(x) = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$$

correspondente ao estado fundamental é:

$$\psi(x) = A \exp\left(\frac{-m\omega}{2\hbar} x^2\right).$$

(a) Calcule a constante A . $A = \sqrt{\frac{1}{I}}$

(b) Calcule a energia da partícula neste estado. $E = \frac{\hbar\omega}{2}$

(c) Calcule a probabilidade de encontrar a partícula para $x > 0$. $P = A^2 \int_0^\infty e^{(-\frac{m\omega}{\hbar} x^2)} dx$

(d) Calcule a evolução temporal desse estado $\Psi(t, x)$.

$$\Psi(x, t) = A e^{-i\omega t/2} e^{(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2)}$$

a) A é chamada constante de normalização

Precisamos que

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx = 1$$

Condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{\infty} A^2 \left(e^{(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2)} \right)^2 dx = 1$$

$$A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{(-\frac{m\omega}{\hbar} x^2)} dx = 1$$

I

$$A^2 \times I = 1 \Rightarrow$$

$$A = \sqrt{\frac{1}{I}}$$

b) Estado fundamental: estado estacionário de menor energia

Como calcular a energia de um estado estacionário?

Estados estacionários são autofunções do operador hamiltoniano com autovalor E .

$$H \Psi(x) = \underline{E} \Psi(x)$$

Para descobrir E calculamos $H \Psi(x)$.

$$H \Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + U(x) \Psi(x)$$

$$U(x) = \frac{m\omega^2}{2} x^2$$

$$\Psi(x) = A e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)}$$

$$\begin{aligned} \Psi'(x) &= A \cdot \left(-\frac{m\omega}{2\hbar}\right) \cdot 2x \cdot e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)} \\ &= -\frac{Am\omega x}{\hbar} e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Psi''(x) &= -\frac{Am\omega}{\hbar} \left[1 \cdot e^{\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}} + \right. \\ &\quad \left. \left[x \cdot \left(-\frac{m\omega x}{\hbar}\right) e^{\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}} \right] \right] \end{aligned}$$

$$\Psi''(x) = -\frac{Am\omega}{\hbar} \left(1 - \frac{m\omega x^2}{\hbar} \right) e^{\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}}$$

$$H \Psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi''(x) + U(x) \Psi(x)$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left(-\frac{Am\omega}{\hbar} \left(1 - \frac{m\omega x^2}{\hbar} \right) e^{\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}} \right) \\ &\quad + \left[\frac{m\omega^2}{2} x^2 \right] \cdot A e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2\right)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \left[\frac{A\hbar\omega}{2} - \cancel{\frac{Am\omega^2}{2}x^2} + \cancel{\frac{Am\omega^2}{2}x^2} \right] e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)} \\
 &= \frac{A\hbar\omega}{2} e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)} = \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right) \cdot \left(Ae^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)}\right) \\
 &= \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right) \cdot \Psi(x)
 \end{aligned}$$

$$H\Psi(x) = E\Psi(x) \quad \text{com} \quad E = \frac{\hbar\omega}{2}$$

c) Probabilidade de encontrar a partícula em uma região R :

$$\int_R |\Psi(x)|^2 dx = p(x \in R)$$

$$p(x > 0) = \int_0^\infty |\Psi(x)|^2 dx = \int_0^\infty \left[A e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)} \right]^2 dx$$

$$p(x > 0) = A^2 \int_0^\infty e^{\left(-\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)} dx$$

$$d) \Psi(x, t) = e^{-iEt/\hbar} \Psi(x)$$

$$= A e^{-iEt/\hbar} e^{\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right)} \quad E = \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$\Psi(x, t) = A e^{-i\omega t/2} e^{(-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2)}$$

estado fundamental

3. Considere a seguinte função de onda do elétron no átomo de hidrogênio dada por:

$$\psi(r, \theta, \phi) = C e^{-\frac{r}{a_0}},$$

onde a_0 é o raio de Bohr e C é uma constante real.

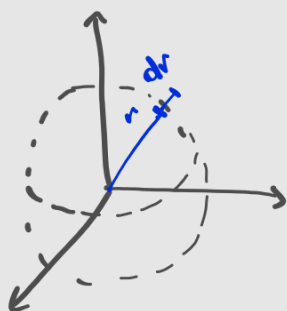
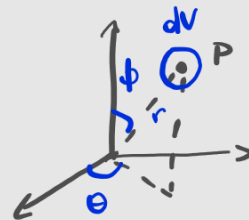
- Calcule a distância, medida a partir do centro do núcleo, onde a probabilidade radial de encontrar o elétron é máxima.
- Calcule a constante C e valor médio de r neste estado.
- Quais são os números quânticos associados ao estado do elétron correspondente à função de onda acima? Obtenha a energia, o módulo do momento angular orbital L e a componente do momento angular orbital deste elétron na direção z .
- Um elétron de um átomo de hidrogênio tem os seguintes números quânticos: $n = 2, l = 1, m_l = -1$ e $m_s = 1/2$. Calcule a energia, o módulo do momento angular e a componente do momento angular orbital deste elétron na direção z .

a) Probabilidade de encontrar o elétron na vizinhança de (r, θ, ϕ) é

$$|\Psi(r, \theta, \phi)|^2 dV =$$

$$|\Psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi$$

$$P(r) dr = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\Psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi$$



$P(r) dr$

$$p(r)dr = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi$$

$$= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi c^2 e^{-2r/a_0} r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi$$

$$= c^2 r^2 e^{-2r/a_0} dr \cdot \left[\int_0^\pi \sin(\theta) d\theta \right] \cdot \left[\int_0^{2\pi} d\phi \right]$$

$$\int_0^{2\pi} d\phi = \phi \Big|_0^{2\pi} = 2\pi$$

$$\int_0^\pi \sin(\theta) d\theta = -\cos(\theta) \Big|_0^\pi = -\cos(\pi) + \cos(0) = 2$$

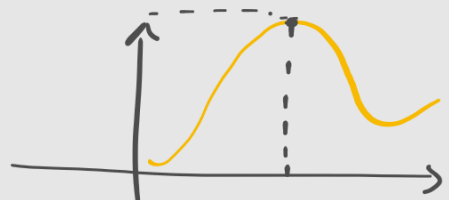
$$p(r)dr = \underbrace{4\pi r^2}_{\substack{\text{coordenadas} \\ \text{esféricas}}} \underbrace{c^2 e^{-2r/a_0}}_{|\psi(r)|^2}$$

Quando a função de onda depende apenas de r , a densidade de probabilidade radial é

$$p(r)dr = \underline{4\pi r^2} |\psi(r)|^2$$

Probabilidade máxima:

$$\frac{d}{dr} p(r) = 0$$



$$\frac{d}{dr} \left[4\pi r^2 c^2 e^{-2r/a_0} \right]$$

$$4\pi c^2 \frac{d}{dr} \left[r^2 e^{-2r/a_0} \right]$$

$$= 4\pi c^2 \left[2r e^{-2r/a_0} + r^2 \cdot \left(-\frac{2}{a_0} \right) e^{-2r/a_0} \right]$$

$$= \underbrace{4\pi c^2}_{\neq 0} \underbrace{\left[2r + -2r^2/a_0 \right]}_{=0} \underbrace{e^{-2r/a_0}}_{\neq 0} = 0$$

$$2r - \frac{2r^2}{a_0} = 0$$

$$2r \left(1 - \frac{r}{a_0} \right) = 0$$

$$r = 0$$

$$1 - \frac{r}{a_0} = 0$$

$$\Rightarrow r = a_0$$

$$b) \iiint_{\mathbb{R}^3} |\psi(r, \theta, \phi)|^2 dV = 1$$

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty c^2 e^{-2r/a_0} r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi = 1$$

$$c^2 \underbrace{\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty e^{-2r/a_0} r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi}_I$$

$$c^2 I = 1$$

$$= 1$$

$$c = \sqrt{\frac{1}{I}}$$

$$\langle r \rangle = \iiint_{\mathbb{R}^3} \Psi^*(r, \theta, \phi) \, r \, \Psi(r, \theta, \phi) \, dV$$

$$= \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^r C e^{-r/a_0} r C e^{-r/a_0} r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\phi$$

$$= C^2 \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^r r^3 e^{-2r/a_0} \sin(\theta) dr d\theta d\phi$$

c) Os números quânticos do estado fundamental do átomo de hidrogênio são:

$$n=1, \quad l=0, \quad m_l=0$$

$$E_n = -\frac{13,6}{n^2} \text{ eV}$$

$$|L| = \hbar \sqrt{l(l+1)}$$

$$L_z = \hbar m_l$$

$$E_1 = -13,6 \text{ eV}$$

$$|L| = \hbar \sqrt{0 \cdot (0+1)} = 0$$

$$L_z = \hbar \cdot 0 = 0$$

d) $n=2, \quad l=1, \quad m_l=-1$

$$E_2 = -\frac{13,6}{4} \text{ eV}$$

$$|L| = \hbar \sqrt{1(1+1)} = \sqrt{2} \hbar$$

$$L_z = -\hbar$$

Pozo e barreira

