

## Exercício Exemplo

①

①

- a) Verdadeira. Outra forma  $\frac{d^2 \psi}{dx^2} < 0$  quando  $x \rightarrow \infty$  e não está normalizada.
- b) Verdadeira. O estado de energia mínima é sempre o (ou dois) menos estados.
- c) Verdadeira. As soluções para  $\hat{H}\psi = E\psi$  são válidas para qualquer  $V_0$ .
- d) Verdadeira.  $x^2 \propto A^2 + (A^\dagger)^2 + AA^\dagger + A^\dagger A$  e  $\langle n | x^2 | n \rangle$  é diferente de zero se  $n = m \pm 2$  ou  $n = m$ .

②

a) Pelo postulado de expansão

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \psi_n(x)$$

Os únicos  $A_n \neq 0$  são  $A_0 = 2A$ ;  $A_1 = -4A$ ;  $A_2 = A$

$$\text{Com } \sum_{n=0}^{\infty} |A_n|^2 = 1 \Rightarrow A^2 (4 + 16 + 1) = 1 \Rightarrow A = \frac{1}{\sqrt{21}} \quad (A > 0)$$

$$\text{Logo } P(E = E_1) = |A_1|^2 = \frac{16}{21}.$$

$$b) \langle H \rangle = |A_0|^2 E_0 + |A_1|^2 E_1 + |A_2|^2 E_2$$

$$= \frac{1}{21} \frac{\hbar \omega}{2} (4 + 16 \times 3 + 1 \times 5) = \frac{\hbar \omega}{2} \frac{57}{21}$$

$$= \frac{\hbar \omega}{2} \cdot \frac{19}{7}$$

$$c) \Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{21}} \left[ 2 \psi_0(x) e^{-i \frac{\hbar \omega}{2} t} - 4 \psi_1(x) e^{-i \frac{3\hbar \omega}{2} t} + \psi_2(x) e^{-i \frac{5\hbar \omega}{2} t} \right]$$

$$d) \Psi(x, T) = \Psi(x, 0) \Rightarrow \frac{\hbar \omega}{2} T = 2\pi \Rightarrow T = \frac{4\pi}{\omega}$$

A equação de Schrödinger a 1 dimensão é

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] u(x) = 0$$

1) a) Estados ligados  $-V_0 < E < 0$ . Para  $x < 0$   $u(x) = 0$ . Para as outras regiões

$0 < x < a$

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [V_0 - |E|] u(x) = \frac{d^2 u}{dx^2} + q^2 u(x) = 0$$

$$q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E|)}$$

$x > a$

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} |E| u(x) = \frac{d^2 u}{dx^2} - \alpha^2 u(x) = 0$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{2m |E|}{\hbar^2}}$$

$$\begin{cases} u_{\text{I}}(x) = A \sin qx & u_{\text{I}}(0) = 0 \\ u_{\text{II}}(x) = B e^{-\alpha x} & u_{\text{II}}(\infty) = 0 \end{cases}$$

em  $x = a$

$$\begin{cases} A \sin qa = B e^{-\alpha a} \\ -\alpha B e^{-\alpha a} - A q \cos qa = -\frac{\lambda'}{a} B e^{-\alpha a} \end{cases}$$

donde  $-\alpha B e^{-\alpha a} - q \cot qa B e^{-\alpha a} = -\frac{\lambda'}{a} B e^{-\alpha a}$

ou seja  $\boxed{-\cot y = \frac{\sqrt{\lambda - y^2} - \lambda'}{y}}$

$$y = qa = \sqrt{\frac{2ma^2}{\hbar^2} (V_0 - |E|)}$$

$$\alpha a = \sqrt{\lambda - y^2}$$

b)  $E < -V_0$

note que em  $0 < x < a$

$$\frac{d^2 u}{dx^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (|E| - V_0) u = \frac{d^2 u}{dx^2} - k^2 u = 0$$

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (|E| - V_0)}$$

e pontos

$$\begin{cases} u_I(x) = A \sinh kx \\ u_{II}(x) = B e^{-\alpha x} \end{cases}$$

em  $x=a$

$$\begin{cases} A \sinh ka = B e^{-\alpha a} \\ -\alpha B e^{-ka} - A k \cosh ka = -\frac{\lambda'}{a} B e^{-\alpha a} \end{cases}$$

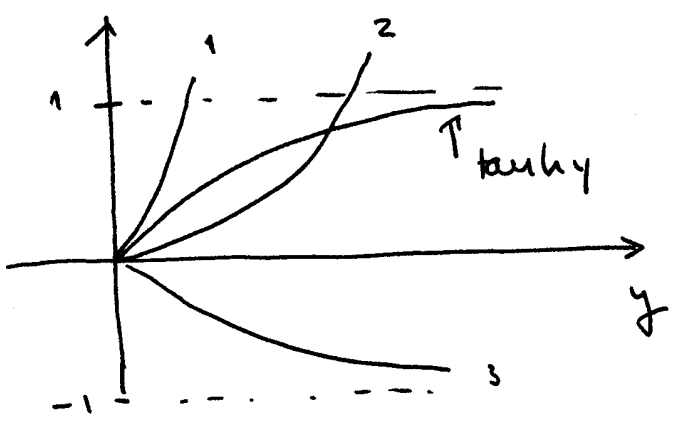
ou seja

$$\cosh ka = \frac{\lambda' - \alpha a}{ka}$$

e pontos ( $y=ka$ )

$$\boxed{\tanh y = \frac{y}{\lambda' - \sqrt{\lambda + y^2}}}$$

2) Para  $E < -V_0$



1, 2, 3 variam com o dependendo de  $\lambda$  e  $\lambda'$ .

Seja:  $f(y) = \frac{y}{\lambda' - \sqrt{\lambda + y^2}} \Rightarrow f'(0) = \frac{1}{\lambda' - \sqrt{\lambda}}$

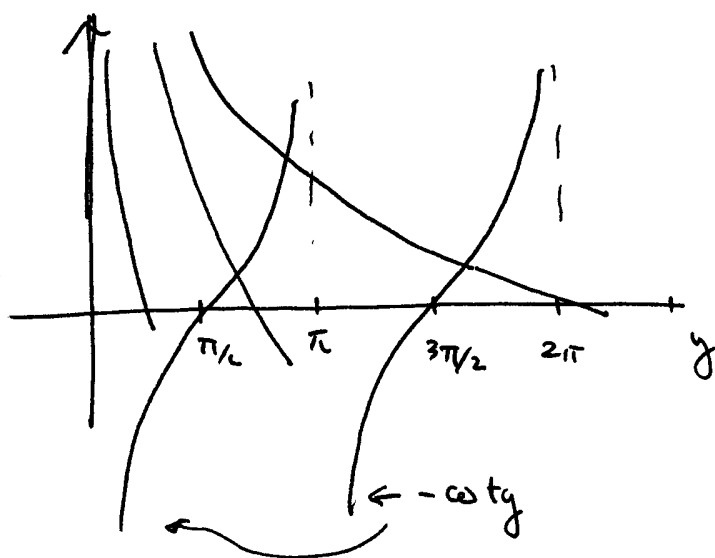
Condição:  $0 < \frac{1}{\lambda' - \sqrt{\lambda}} < 1 \Rightarrow \lambda' > \sqrt{\lambda} + 1$

Por  $\lambda' = \sqrt{\frac{mV_0 a^2}{8\hbar^2}} = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}} = \frac{1}{4} \sqrt{\lambda} \Rightarrow$  Não há solução para  $E < -V_0$

Para  $\underline{-V_0 < E < 0}$

temos  $-\cot y = \frac{\sqrt{\lambda - y^2} - \lambda'}{y}$ . Como se vê no gráfico

houves estas duas linhas depende dos valores de  $\lambda, \lambda'$



Por exemplo  $\lambda = \left(\frac{\pi}{4}\right)^2 \Rightarrow \lambda' = \frac{\pi}{16}$

O valor máximo de  $y$  é  $y_{\max} = \pi/4$  e temos

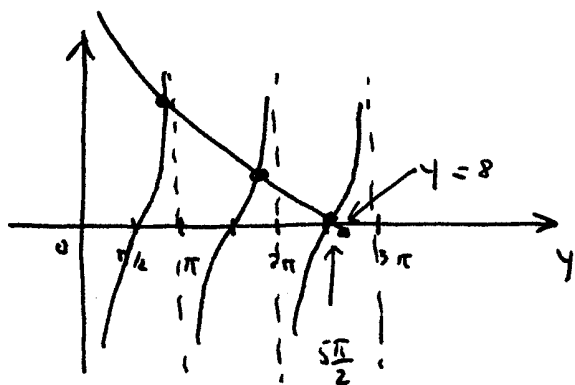
$$-\cot y_{\max} = -1 < \frac{\sqrt{\lambda - y_{\max}^2} - \lambda'}{y_{\max}} = \frac{-\frac{\pi}{16}}{\frac{\pi}{4}} = -\frac{1}{4}$$

e não houve. Para valores maiores de  $\lambda$  já há. Numericamente  $\lambda > 1.7579$

3)  $V_0 = \frac{32 \hbar^2}{m a^2} \Rightarrow \lambda = 64 \Rightarrow \lambda' = 2 \Rightarrow y_{\max} = \sqrt{\lambda} = 8 > \frac{5\pi}{2}$

Como  $\frac{5\pi}{2} < y_{\max} < 3\pi$  temos a situação de

próximos finais



3 Estados ligados.

4)  $E > 0$  ( $u_{II}(a)=0$ )

$$u_I(x) = A \sin qx$$

$$u_{II}(x) = e^{-ikx} + R e^{ikx}$$

$$q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E)}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$$

em  $x=a$

$$A \sin qa = e^{-ika} + R e^{ika}$$

$$\left\{ \begin{aligned} & -ik(e^{-ika} - R e^{ika}) - Aq \cos qa = -\frac{\lambda'}{a} (e^{-ika} + R e^{ika}) \end{aligned} \right.$$

ou

$$-ika(e^{-ika} - R e^{ika}) - qa(e^{-ika} + R e^{ika}) \cot qa = -\frac{\lambda'}{a} (e^{-ika} + R e^{ika})$$

$$R e^{ika} (ika - qa \cot qa + \lambda') = e^{-ika} (ika + qa \cot qa - \lambda')$$

$$R = e^{-2ika} \frac{qa \cot qa - \lambda' + ika}{-qa \cot qa + \lambda' + ika} \Rightarrow |R| = 1$$

5) 
$$j(x) = \frac{\hbar}{2im} \left( \psi^* \frac{d\psi}{dx} - \psi \frac{d\psi^*}{dx} \right)$$

$$j_I(x) = 0$$

$$j_{II}(x) = \frac{\hbar k}{m} (-1 + |R|^2) = 0$$

IV

a) verdadeira.  $L_i = \epsilon_{ijk} x_j P_k$  com  $k \neq j$  e  $[x_j, P_k] = 0$

b) falso. Basta  $\frac{1}{r^{3/2+\epsilon}}$

c) falso. Só pode ser  $\pm \frac{1}{2}$

d) falso no estado fundamental  $l=0$  e o operador é nulo. Logo o valor é zero.

V

a) Trate-se de um átomo que é um com linhas lineares de átomos com  $n=2$ . Logo

$$\langle H \rangle = E_2 = -13.6 \frac{1}{4} \text{ eV}$$

b) A função  $R_{21}$  é normalizada e as harmonicas esféricas ortnormalizadas são:

$$\int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \phi) Y_{l'm'}(\theta, \phi) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

pois que devemos ter

$$|a|^2 + |b|^2 + |c|^2 = 1$$

ou (real)  
 $a^2 + b^2 + c^2 = 1$

Calculemos agora  $\langle L_z \rangle$ .

$$\langle L_z \rangle = \hbar |a|^2 + 0 |b|^2 - \hbar |c|^2 = 0 \Rightarrow a = c \text{ (real e positivos)}$$

Calculemos  $\langle L_x \rangle$ . Temos  $L_x = \frac{1}{2} (L_+ + L_-)$  e

$$\begin{aligned} & L_x (a |1+1\rangle + b |10\rangle + c |1-1\rangle) \\ &= \frac{1}{2} (L_+ + L_-) (a |1+1\rangle + b |10\rangle + c |1-1\rangle) \end{aligned}$$

$$= \frac{\hbar}{2} \left( + b\sqrt{2} |11\rangle + c\sqrt{2} |10\rangle + a\sqrt{2} |10\rangle + b\sqrt{2} |1-1\rangle \right) \quad (6)$$

$$= \frac{\hbar\sqrt{2}}{2} \left( b |11\rangle + 2a |10\rangle + b |1-1\rangle \right)$$

onde se usa  $a=c$ . Usando a pm e ortogonalização dos estados  $|lm\rangle$  obtém

$$\langle L_x \rangle = \frac{\hbar\sqrt{2}}{2} (ab + 2ab + ab) = 2\sqrt{2} \hbar ab$$

Comparando com  $\langle L_x \rangle = \frac{\sqrt{2}}{3} \hbar$  obtém

$$\begin{cases} 2a^2 + b^2 = 1 \\ ab = \frac{1}{3} \end{cases}$$

Este sistema tem a) soluções

$$a=c=b = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

$$\boxed{a=c = \sqrt{\frac{1}{6}} ; b = \sqrt{\frac{2}{3}}} \quad \checkmark \quad \underline{a < b}$$

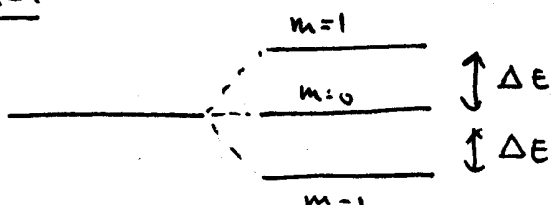
VI

a) As funções próprias do átomo de Hidrogênio são funções de  $|nlm\rangle$  são funções próprias de  $L^2$  e  $L_z$ , logo

$$E_{n,m}^{(1)} = \frac{e\hbar}{2m} m_l B \equiv \mu_B B m_l$$

$$\mu_B = 5.78 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$$

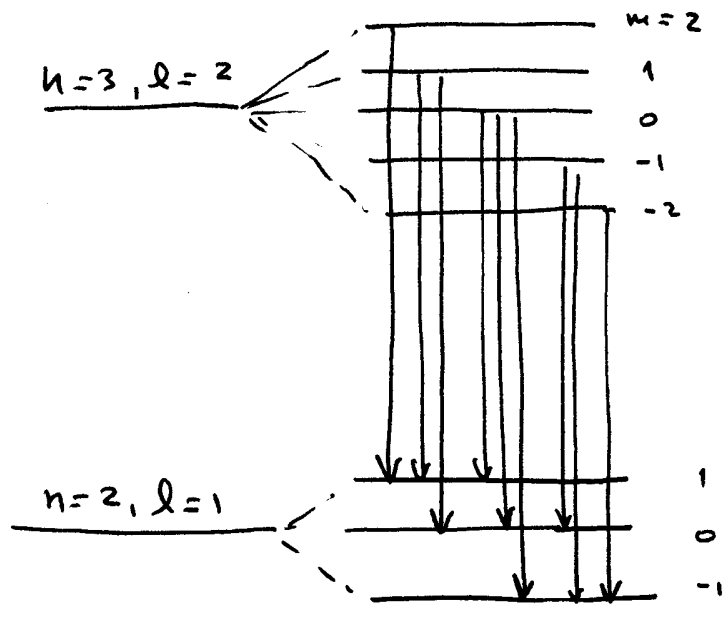
$$\underline{n=2, l=1}$$



$$\Delta E = \mu_B B = 5.78 \times 10^{-5} \text{ eV}$$

$$\text{para } B = 1 \text{ T}$$

b)



9 r islas.

VII

a) No estado fundamental  $l=0$  e portanto há simetria esférica.

Então 
$$\int d\Omega (\vec{S}_e \cdot \vec{e}_r) (\vec{S}_d \cdot \vec{e}_r) = \frac{1}{3} \int d\Omega \vec{S}_e \cdot \vec{S}_d$$

pois no o número tácio no parâmetros não críticos.

Assim

$$E_0^{(1)} = \langle 100 | H_{HF} | 100 \rangle = a \langle \vec{S}_e \cdot \vec{S}_d \rangle \frac{8\pi}{3} \int d^3r |\psi_{100}(r)|^2 \delta^3(r)$$

Com 
$$a = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2g\mu}{4\mu_d\mu_e c^2}$$

Então

$$E_0^{(1)} = \frac{8\pi}{3} a \langle \vec{S}_e \cdot \vec{S}_d \rangle |\psi_{100}(0)|^2$$

Usando

$$|\psi_{100}(0)|^2 = \frac{4}{4\pi} \frac{1}{a_0^3} = \frac{1}{\pi} \frac{m_e^3 c^3 \alpha^3}{h^3}$$



obtains

$$E_0^{(1)} = \frac{8\pi}{3} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{2g_d}{4m_d m_e c^2} \frac{4 m_e^3 c^3 \alpha^3}{4\pi \hbar^3} \langle \vec{S}_e \cdot \vec{S}_d \rangle$$

$$= \frac{4}{3} m_e c^2 \alpha^4 g_d \frac{m_e}{m_d} \frac{\langle \vec{S}_e \cdot \vec{S}_d \rangle}{\hbar^2}$$

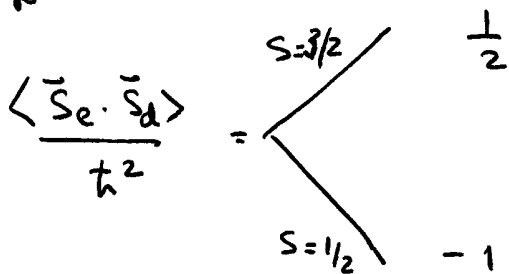
b)  $\vec{S}_e$  spin 1/2 ;  $\vec{S}_d$  : spin 1

$$\vec{S} = \vec{S}_e + \vec{S}_d \quad S \text{ spin } 3/2 \text{ or } 1/2.$$

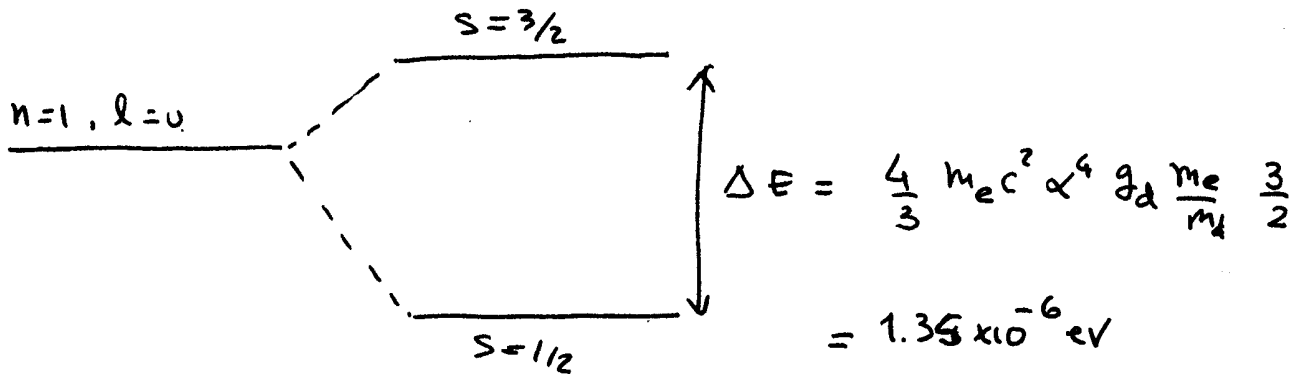
$$\vec{S}_e \cdot \vec{S}_d = \frac{1}{2} [S^2 - S_e^2 - S_d^2] = \frac{\hbar^2}{2} [S(S+1) - \frac{3}{4} - 2]$$

$$= \frac{\hbar^2}{2} [S(S+1) - \frac{11}{4}]$$

with



c)



$$\lambda = \frac{c}{f} = \frac{hc}{\Delta E} = \frac{1240 \times 10^{-7} \text{ cm} \cdot \text{eV}}{1.35 \times 10^{-6} \text{ eV}} = 91.8 \text{ cm}$$