Gabarito P2 - MQ1 - 2017-2

1) $a = \frac{\tilde{X} + i\tilde{P}}{\sqrt{2}}$, $\tilde{X} = \frac{X}{x_0}$, $x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$

$$\tilde{P} = P x_0/\hbar$$

$$a^+ = \frac{\tilde{X} - i\tilde{P}}{\sqrt{2}}$$

$$\Rightarrow \tilde{X} = \frac{a + a^+}{\sqrt{2}}$$

$$\tilde{P} = \frac{a - a^+}{\sqrt{2}\, i}$$

Valores médios

$$\Rightarrow \langle \tilde{X} \rangle = \langle 0|\tilde{X}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \overbrace{\langle 0|a|0\rangle}^{=0} + c.c. = 0$$

$$\Rightarrow \langle X \rangle = 0$$

$$\langle \tilde{P} \rangle = \langle 0|\tilde{P}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\, i} \langle 0|a|0\rangle + c.c. = 0$$

$$\Rightarrow \langle P \rangle = 0$$

<u>Incertezas:</u> $\tilde{X}^2 = \frac{1}{2}\left(a^2 + a^{+2} + a a^+ + a^+ a\right)$

$$\langle \tilde{X}^2 \rangle = \langle 0|\tilde{X}^2|0\rangle = \frac{1}{2}\langle 0|a \underbrace{a^+|0\rangle}_{=|1\rangle} = \frac{1}{2}\langle 0|0\rangle = \frac{1}{2}$$

$$\tilde{P}^2 = -\frac{1}{2}\left(a^2 + a^{+2} - a a^+ - a^+ a\right)$$

$$\langle \tilde{P}^2 \rangle = \frac{1}{2}\langle 0|a a^+|0\rangle = \frac{1}{2} \Rightarrow \Delta\tilde{X} = \Delta\tilde{P} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\Delta X = x_0 \Delta\tilde{X} = \frac{x_0}{\sqrt{2}}, \quad \Delta P = \frac{\hbar}{x_0}\Delta\tilde{P} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}\, x_0}$$

$\Rightarrow \Delta X \cdot \Delta P = \frac{\hbar}{2}$; note que a relação de incerteza estabelece que

$$\Delta X \cdot \Delta P \geq \frac{\hbar}{2}$$

Logo estado fundamental é estado de incerteza *mínima*, i.e, menor incerteza possível sem violar a relação de incerteza.

Cálculo da energia decorrente das incertezas ΔX e ΔP:

$$\mathcal{E} = \frac{k\,\Delta X^2}{2} + \frac{\Delta P^2}{2m} = \frac{m\omega^2 x_0^2}{4} + \frac{\hbar^2}{4 m x_0^2} = \frac{\hbar\omega_0}{4} + \frac{\hbar\omega_0}{4}$$

$$\Rightarrow \mathcal{E} = \frac{\hbar\omega_0}{2}$$, que é o valor correto!

2) a) $\frac{1}{2}|210\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}|211\rangle$ é estacionário pois é auto-vetor de H (mesmo n na combinação linear)

O 2º exemplo não é estacionário, pois envolve valores distintos de n

Evolução temporal: estado no tempo t:

$$|\Psi\rangle_t = \frac{e^{-i\mathcal{E}_2 t/\hbar}|210\rangle + i e^{-i\mathcal{E}_3 t/\hbar}|321\rangle}{\sqrt{2}}$$

$$= \frac{e^{-i\mathcal{E}_2 t/\hbar}}{\sqrt{2}} \cdot \left(|210\rangle + i e^{-i\omega_{32} t}|321\rangle\right)$$

$$\omega_{32} = \frac{\mathcal{E}_3 - \mathcal{E}_2}{\hbar} = \frac{-\frac{R}{9} + \frac{R}{4}}{\hbar} = \frac{5R}{36\hbar} = \frac{5\mu e^4}{72\hbar^3}$$

$$_0\langle\Psi|\Psi\rangle_t = 0 \Rightarrow 1 + 1 e^{-i\omega_{32} t} = 0$$

$$e^{-i\omega_{32}t} = -1 = e^{-ij\pi},\ j \text{ ímpar}$$

$$\Rightarrow t_k = \frac{(2k+1)\pi}{\omega_{32}},\ k \in \mathbb{N}$$

b)

	H	L^2	L_z	prob.
	$\mathcal{E} = \mathcal{E}_2 = -R/4$	$2\hbar^2$	0	$1/2$
	$\mathcal{E} = \mathcal{E}_3 = -R/9$	$6\hbar^2$	$\hbar$	$\left\lvert\frac{i}{\sqrt{2}}\right\rvert^2 = \frac{1}{2}$

nenhuma outra combinação de valores é possível

c) $\langle L_x\rangle = \langle\phi|L_x|\phi\rangle$

$$2L_x = L_+ + L_-$$

$|\phi\rangle = \frac{1}{2}|210\rangle + \frac{\sqrt{3}}{2}|211\rangle$;

$$\Rightarrow L_x = \frac{L_+ + L_-}{2}$$

$$\langle L_x \rangle = \frac{1}{2}\left(\langle L_+ \rangle + \langle L_- \rangle\right) = \frac{1}{2}\langle L_+ \rangle + \text{c.c.}$$

$$L_+/\hbar \, |210\rangle = \sqrt{2-0}\,|211\rangle$$

$$\Rightarrow \left\langle \frac{L_+}{\hbar} \right\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2}\,\frac{1}{2}\cdot\sqrt{2}\,\langle 211|211\rangle = \frac{\sqrt{6}}{4}$$

$$\Rightarrow \langle L_x \rangle = \frac{\sqrt{6}}{4}\cdot\hbar$$

3)

a) $H\Psi = \mathcal{E}\Psi$ $\quad (*)$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M_e}\nabla^2 + V(r)$$

Em coordenadas esféricas, com $\Psi(r) = e^{-r/a}$ independente de θ e φ, fica

$$\nabla^2\Psi = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\Psi)$$

e logo $(*) \Rightarrow$

$$-\frac{\hbar^2}{2M_e}\frac{1}{r}\underbrace{\frac{d^2}{dr^2}\left(r e^{-r/a}\right)}_{= 2\left(-\frac{1}{a}\right)e^{-r/a} + \frac{1}{a^2} r e^{-r/a}} - \frac{Ze^2}{r}e^{-r/a} = \mathcal{E}e^{-r/a}$$

multiplicando por r:

$$\left(\frac{\hbar^2}{M_e a} - Ze^2\right)e^{-r/a} - \frac{\hbar^2}{2M_e a^2} r e^{-r/a} = \mathcal{E} r e^{-r/a}$$

Como esta eq. vale para todo r, temos

$$\frac{\hbar^2}{M_e a} = Ze^2 \Rightarrow a = \frac{\hbar^2}{M_e Z e^2} \quad \text{(item a)}$$

b) $$\mathcal{E} = -\frac{\hbar^2}{2M_e a^2} = -\frac{\hbar^2}{2M_e}\cdot\frac{M_e^2 Z^2 e^4}{\hbar^4}$$

$$\mathcal{E} = -\frac{M_e (Ze^2)^2}{2\hbar^2}$$

Note que podemos escrever também

$$\mathcal{E} = -\frac{(Ze \cdot e)}{2a}$$

Pelo teorema do virial aplicado ao potencial Coulombiano,

$$\langle V \rangle = 2\,\mathcal{E} = -\frac{Ze \cdot e}{a}$$, que é a expressão

esperada p/ uma distância de separação a entre o núcleo (carga $+Ze$) e o elétron (carga $-e$)

c) A distância média $\sim a$ decresce com Z. Quanto maior a carga do núcleo, + forte é a atração entre o núcleo e o elétron.

d) $\left.\begin{array}{l} L^2\Psi = 0 \\ \underbrace{L_z\Psi = 0}_{\text{puramente angular!}} \end{array}\right\} \Rightarrow$ estado tem valores bem definidos p/ L^2 e L_z: ambos nulos.