1)

a) $[H]_{\mathcal{B}} = i\varepsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$

Autovalores λ:

$$\det \begin{pmatrix} -\lambda & i\varepsilon \\ -i\varepsilon & -\lambda \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda^2 - \varepsilon^2 = 0 \Rightarrow \lambda = \pm\varepsilon$$

Autovetores

$$[H]_{\mathcal{B}} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} = \pm\varepsilon \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} i\varepsilon a_2 = \pm\varepsilon a_1 \\ -i\varepsilon a_1 = \pm\varepsilon a_2 \end{cases}$$

logo $a_2 = \mp i a_1$

autovetor de norma unitária: $\left[|\pm\varepsilon\rangle\right]_{\mathcal{B}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \mp i \end{pmatrix}$

Conclusão:

- estado estacionário $|\varepsilon\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\varphi_1\rangle - i|\varphi_2\rangle\right) \to$ energia $+\varepsilon$
- " " $|-\varepsilon\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\varphi_1\rangle + i|\varphi_2\rangle\right) \to$ " $-\varepsilon$

b) Note que $|\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\varepsilon\rangle + |-\varepsilon\rangle\right)$ não é estacionário pois é comb. linear de autovetores de H com autovalores (energias) distintas.

b) (continuação)

Evolução temporal

$$|\psi\rangle_0 = |\varphi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\varepsilon\rangle + |-\varepsilon\rangle\right)$$

$$\Rightarrow |\psi\rangle_t = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-i\varepsilon t/\hbar}|\varepsilon\rangle + e^{i\varepsilon t/\hbar}|-\varepsilon\rangle\right)$$

c) $P_{1\to 2} = |\langle\varphi_2|\psi_0\rangle_t|^2$

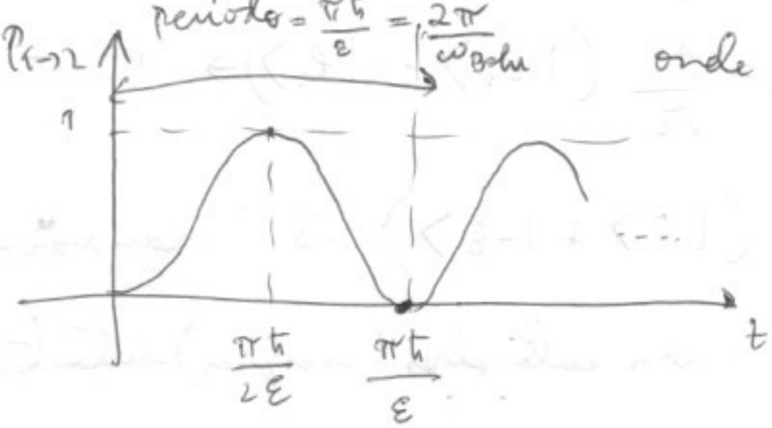
$|\varphi_2\rangle$ pode ser escrito como combinação linear de $|\varepsilon\rangle$ e $|-\varepsilon\rangle$:

$$|\varepsilon\rangle - |-\varepsilon\rangle = -\frac{2i}{\sqrt{2}}|\varphi_2\rangle = -\sqrt{2}\,i\,|\varphi_2\rangle \Rightarrow$$

$$|\varphi_2\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}\left(|\varepsilon\rangle - |-\varepsilon\rangle\right)$$

Como $\langle\varepsilon|-\varepsilon\rangle = 0$, temos então

$$P_{1\to 2} = \left|\frac{(-i)}{2}\underbrace{\left(e^{-i\varepsilon t/\hbar} - e^{i\varepsilon t/\hbar}\right)}_{-2i\,\mathrm{sen}\,\varepsilon t/\hbar}\right|^2 = \mathrm{sen}^2\left(\frac{\varepsilon t}{\hbar}\right)$$



onde freq. de Bohr

$$\omega_{Bohr} = \frac{\varepsilon - (-\varepsilon)}{\hbar} = \frac{2\varepsilon}{\hbar}$$

2)

a) $|n\rangle$ não é auto-estado de a^+, porque

$$a^+|n\rangle = C|n+1\rangle$$

e $|n+1\rangle$ não é da forma $\alpha|n\rangle$; de fato $|n+1\rangle$ é ortogonal $a|n\rangle$

Calculando $|C|$:

$$\| a^+|n\rangle \|^2 = \langle n|a a^+|n\rangle = |C|^2$$

mas $aa^+ = a^+a + \mathbb{1} \Rightarrow |C|^2 = \langle n|a^+a+\mathbb{1}|n\rangle = n+1$

Podemos então tomar $C = \sqrt{n+1}$

b) $\langle n|X|n\rangle = ?$

$$\left.\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{X}{x_0} + iPx_0/\hbar\right) \\ a^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{X}{x_0} - iPx_0/\hbar\right) \end{aligned}\right\} \Rightarrow \quad a^+ + a = \sqrt{2}\,\frac{X}{x_0} \qquad X = \frac{x_0}{\sqrt{2}}(a+a^+)$$

Logo $\langle n|X|n\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\langle n|a+a^+|n\rangle = \frac{x_0}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{n}\langle n|n-1\rangle + \sqrt{n+1}\langle n|n+1\rangle\right)$

$$= 0$$

Temos tb. $\langle n|P|n\rangle = m\frac{d}{dt}\langle x\rangle = 0$

Discussão: como $V(x) = V(-x)$, estados estacionários $\varphi_n(x) = \langle x|n\rangle$ tem paridade definida, e logo dens. de probabilidade é par $\Rightarrow \langle x\rangle = 0$

Por outro lado, $\langle P\rangle = 0$ para qualquer estado estacionário ligado, independentemente da forma do potencial, já que é proporcional à derivada temporal de $\langle x\rangle$.

c) $\langle V(x)\rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \langle X^2\rangle$

$$X^2 = \frac{x_0^2}{2}(a+a^+)^2 = \frac{x_0^2}{2}(a^2 + a^{+2} + \underbrace{aa^+}_{a^+a+\mathbb{1}} + a^+a)$$

Temos:

$$\langle n|a^2|n\rangle = \sqrt{n(n-1)}\,\langle n|n-2\rangle = 0$$

$$\langle n|a^{+2}|n\rangle = \langle n|a^2|n\rangle^* = 0$$

$$\langle n|a^+a|n\rangle = n$$

Logo $\langle X^2\rangle = \frac{x_0^2}{2}(2n+1) = x_0^2(n+1/2) \Rightarrow$

$$\langle V\rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{\hbar}{m\omega}(n+1/2) = \frac{\hbar\omega}{2}(n+1/2)$$

d) $\langle T\rangle + \langle V\rangle = \mathcal{E}_n = \hbar\omega(n+1/2) \Rightarrow \langle T\rangle = \langle V\rangle = \frac{\mathcal{E}_n}{2} = \frac{\hbar\omega(n+1/2)}{2}$

3) $\Psi(r) = C \exp(-r/a_0)$

a) Norma unitária $\Rightarrow \int d^3r\, |\Psi|^2 = 1$

Como Ψ independe de θ e φ, integral angular fornece fator 4π (ângulo sólido):

$$\int d^3r\,|\Psi|^2 = 4\pi \int_0^\infty dr\, r^2\, |C|^2 \exp(-2r/a_0) = \cancel{4}\pi |C|^2 a_0^3 \underbrace{\int_0^\infty d\xi\, \xi^2 e^{-2\xi}}_{\frac{2}{2^3} = \frac{1}{\cancel{4}}}$$

Logo $|C|^2 = \dfrac{1}{\pi a_0^3}$; podemos escolher $C = \dfrac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}}$

b) Valor médio do (vetor) posição relativa:

$$\langle \vec{R} \rangle = |C|^2 \int d^3r \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right)\vec{r} = C^2 \int_0^\infty dr\, r^3 \exp\left(-\frac{2r}{a_0}\right) \underbrace{\int_0^\pi d\theta\, \mathrm{sen}\,\theta \int_0^{2\pi} d\varphi\, \hat{r}(\theta,\varphi)}_{=0}$$

Temos então $\langle \vec{R} \rangle = 0$ como esperado p/ uma densidade de probabilidade que independe de θ e φ (isotropia). Por outro lado, $\langle \vec{P} \rangle = \mu \frac{d}{dt}\langle \vec{R} \rangle = 0$, como esperado para qualquer estado estacionário ligado.

c) $$\langle \hat{r}.\vec{R} \rangle = C^2\, 4\pi \int_0^\infty dr\, r^3 \exp(-2r/a_0) = \frac{4\pi}{\pi a_0^3}\, a_0^4 \underbrace{\int_0^\infty d\xi\, \xi^3 \exp(-2\xi)}_{\frac{3!}{2^4} = \frac{3}{8}}$$

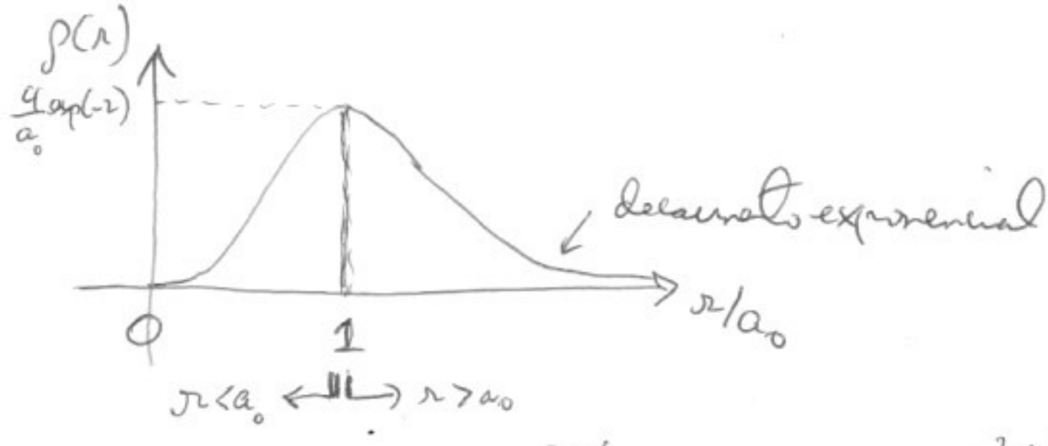
$\hat{r}.\vec{R}$ representa a distância entre o elétron e o próton

$\Rightarrow \langle \hat{r}.\vec{R} \rangle = \frac{3}{2} a_0$

a_0 é o raio de Bohr e determina a escala característica para a distância entre o elétron e o próton no estado fundamental ("tamanho" do átomo).

d) Densidade de probabilidade

$$\rho(r) = 4\pi C^2 r^2 e^{-2r/a_0} = \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0} = \frac{4}{a_0}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-2r/a_0}$$



$$\rho'(r) = 0 \Rightarrow 2r e^{-2r/a_0} + \frac{r^2}{a_0}(-2) e^{-2r/a_0} = 0$$

$$\Rightarrow r = a_0 \quad (\text{max. da densidade de prob. radial})$$

Novamente aqui aparece a_0 como escala de comprimento característica para a distância entre o elétron e o próton. Vemos que a faixa de distância + provável é em torno de a_0; entretanto o valor médio obtido no item c é 50% maior que a_0. Isto se deve à assimetria da densidade de probabilidade em relação ao pto. de máximo $r=a_0$. É + provável obter $r > a_0$ do que $r < a_0$, e assim a média é $> a_0$.