Mecânica Quântica – Série 8

Curso de Engenharia Física Tecnológica – 2014/2015

`(Versão de 10 de Novembro de 2014)`

∗ 8.1 *Gasiorowicz 8.1*

Considere um caso especial dum potencial da forma

$$V(x,y,z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z) \tag{1}$$

onde cada um dos potenciais V_i tem a mesma forma,

$$V(x) = \begin{cases} 0 & 0 < x < a \\ \infty & x < 0 \text{ or } x > a \end{cases} \tag{2}$$

(há uma gralha no enunciado do Gasiorowicz, aqui corrigida) e de modo semelhante para y e z. Usando os resultados a uma dimensão encontre os valores próprios e as funções próprias para uma partícula numa caixa tridimensional.

8.2 Este problema destina-se a ganhar intuição com as funções radiais do átomo de Hidrogénio. Estas funções, corretamente normalizadas, são dadas por (por simplicidade fizemos $Z = 1$, o caso $Z > 1$ pode ser facilmente obtido fazendo $a_0 \to a_0/Z$),

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{2}{na_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L^{2l+1}_{n-l-1}(2r/na_0)\, e^{-r/na_0}$$

onde

$$a_0 = \frac{\hbar}{\mu c \alpha}$$

é o raio de Bohr, e os polinómios associados de Laguerre são definidos por

$$L^\alpha_n(\rho) = \sum_{k=0}^{n} \begin{pmatrix} n+\alpha \\ n-k \end{pmatrix} \frac{(-\rho)^m}{m!}$$

a) Use estas definições para encontrar as funções R_{10}, R_{20} e R_{21}. Compare os resultados com o livro e com o `Mathematica` que tem o comando `LaguerreL[n,m,r]`. Para isso use a seguinte função no `Mathematica`

```
R = Function[{n,l,r},(2/(n a0))^(3/2) Sqrt[(n-l-1)!/(2 n)/((n +l)!)]
   (2 r/(n a0))^l  LaguerreL[n-l-1,2 l+1, 2 r/(n a0)] E^(-r/(n a0))]
```

b) Use o `Mathematica` para fazer gráficos das funções R_{10}, R_{20} e R_{21} e das respetivas distribuições de probabilidade radiais definidas por

$$P_{nl}(r) = r^2 R^2_{nl}(r)$$

Observe os máximos e nodos. Experimente para outros valores de $n > 2$.

c) Usando o `Mathematica` verifique que as funções estão normalizadas, isto é,

$$\int_0^\infty dr\ r^2[R_{nl}(r)]^2 = 1$$

d) Usando o `Mathematica` verifique que as funções são ortogonais para $n \neq n'$ e $l = l'$ mas em geral não são ortogonais para $n = n'$ e $l \neq l'$, isto é,

$$\int_0^\infty dr\ r^2 R_{nl}(r) R_{n'l}(r) = \delta_{nn'} \quad \text{mas} \quad \int_0^\infty dr\ r^2 R_{nl}(r) R_{nl'}(r) \neq 0 \quad l \neq l'.$$

Explique como é possível este resultado.

∗8.3 *Gasiorowicz 8.6*

Compare os comprimentos de onda das transições $2P \to 1S$ em: *i)* Hidrogénio, *ii)* Deutério (massa nuclear $= 2\times$ massa do protão), *iii)* Positrónio (estado ligado de eletrão-positrão, cuja massa é igual à do eletrão),

8.4 Veja no site do livro, nos suplementos para o capítulo 8, a demonstração do teorema seguinte, devido a Pauli:

> *Seja um sistema do qual conhecemos as funções de onda e os valores próprios do Hamiltoniano. Considere que esses valores próprios dependem dum parâmetro α (uma massa, uma constante, enfim, qualquer parâmetro). Então a equação aos valores próprios escreve-se*
>
> $$H(\alpha) u_n(\vec{r}) = E_n(\alpha) u_n(\vec{r})$$
>
> *e*
>
> $$\frac{\partial E_n}{\partial \alpha} = \left\langle \frac{\partial H(\alpha)}{\partial \alpha} \right\rangle$$

Use este resultado para mostrar que

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} = \frac{Z}{a_0 n^2}$$

∗8.5 *Gasiorowicz 8.9*

Usando a expressão

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{n,l} = \frac{1}{a_0 n^2} \tag{3}$$

calcule a expressão para

$$\langle T \rangle_{n,l} = \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_{n,l} \tag{4}$$

para um átomo hidrogenóide (Z arbitrário). Mostre que em geral para este potencial se tem

$$\langle T \rangle = -\frac{1}{2} \langle V \rangle \tag{5}$$

o que constitui um exemplo especial do *Teorema do Virial.*

∗8.6 *Gasiorowicz 8.10*

Um eletrão num campo de Coulomb do protão está num estado descrito pela função de onda,

$$\psi(\vec{r}) = \frac{1}{6}\left[4\,\psi_{100}(\vec{r}) + 3\,\psi_{211}(\vec{r}) - \psi_{210}(\vec{r}) + \sqrt{10}\,\psi_{21-1}(\vec{r})\right] \tag{6}$$

a) Qual é o valor médio da energia?

b) Qual é o valor médio de L^2?

c) Qual o valor médio de L_z?

∗8.7 *Gasiorowicz 8.11*

Um eletrão num campo de Coulomb do protão está num estado descrito pela função de onda,

$$\psi(\vec{r}) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{3/2} e^{-\alpha^2 r^2/2} \tag{7}$$

Escreva a expressão para a probabilidade de uma medida do sistema encontrar o eletrão no estado fundamental do átomo de hidrogénio.

8.8 Os estados próprios do átomo de hidrogénio apresentam um elevado grau de degenerescência. Em mecânica quântica, isto quer normalmente dizer que haverá outro operador que comuta com o conjunto completo de operadores já considerado. No átomo de hidrogénio deverá assim existir um operador escondido que comute com H. Esse operador é o *vetor de Laplace-Runge-Lenz* ou *vetor de Runge-Lenz* que aparece para problemas com potenciais centrais cuja força varie com o inverso do quadrado da distância. Vamos aqui começar por explicar o seu papel em física clássica, no problema de Kepler, e depois em mecânica quântica, no átomo de hidrogénio. Para bibliografia sobre este assunto consulte os *links* indicados na página alternativa da disciplina. Vamos considerar então que temos um potencial central da forma

$$V(r) = -\frac{\hat{\alpha}}{r}$$

sendo, para o problema de Kepler, $\hat{\alpha} = G_N M m$, e para o átomo de hidrogénio, $\hat{\alpha} = \alpha\hbar c$.

a) Classicamente, para o problema de Kepler, o vetor de Runge-Lenz é definido por

$$\vec{A} = \frac{1}{m\hat{\alpha}}\,\vec{p}\times\vec{L} - \frac{\vec{r}}{r}$$

Verifique que é adimensional. Mostre que é conservado, isto é,

$$\frac{d\vec{A}}{dt} = 0$$

b) Mostre que a direção constante de $\vec{A}$, é a do periélio da órbita conforme indicado na Fig. 1

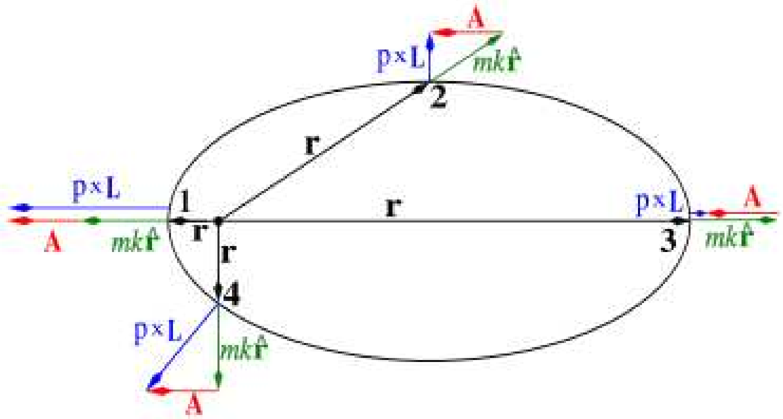

Figura 1: Vetor Runge-Lenz. Nesta figura, tirada da Wikipedia, $k = \hat{\alpha}$.

e que a excentricidade da órbita é dada por

$$e = \frac{|\vec{A}|}{m\hat{\alpha}}$$

c) Verifique explicitamente que o vetor $\vec{A}$ se anula para uma órbita circular ($e = 0$).

d) Em mecânica quântica é preciso redefinir $\vec{A}$ pois $\vec{p}$ e $\vec{L}$ não comutam. A definição correta é

$$\vec{A} = \frac{1}{2m\hat{\alpha}} \left(\vec{p} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{p}\right) - \frac{\vec{r}}{r} \tag{8}$$

Verifique que esta definição coincide com a definição anterior no limite clássico.

e) Use a Eh. (8) para mostrar que

$$\left[H, \vec{A}\right] = 0.$$

f) Mostre que

$$[L_i, A_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}A_k, \quad [A_i, A_j] = \frac{\hbar}{i}\frac{2}{m\hat{\alpha}^2}\, H\, \epsilon_{ijk}L_k\ .$$

e

$$\vec{L}\cdot\vec{A} = \vec{A}\cdot\vec{L} = 0, \quad \left(A^2 - 1\right) = \frac{2}{m\hat{\alpha}^2}\, H \left(L^2 + \hbar^2\right)$$

Verifique que $[L^2, \vec{A}] \neq 0$ e que portanto encontrar o conjunto completo de operadores que comuta com H é menos óbvio. Veja a referência *M. Bandeá, C. Itzykson, MeV. Moa. Physics* **38**, (1966), 330, para uma discussão mais aprofundada.

g) Estude a Secção IIA da referência da alínea anterior. Verifique que as relações de comutação anteriores podem ser usadas para encontrar a quantização das energias do átomo de hidrogénio, sem nunca referir as funções de onda. Isto foi feito por Pauli ainda antes da descoberta da equação de Schrödinger!

$*$ **8.9** *Adaptado do Griffiths 4.13*
Considere as seguintes questões no átomo de Hidrogénio.

a) Calcule $\langle r \rangle$ e $\langle r^2 \rangle$ para um eletrão no estado fundamental. O resultado deverá vir expresso em termos do raio de Bohr.

b) Determine agora $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$. Se usar a simetria esférica do estado fundamental não precisa de fazer mais contas.

c) Encontre $\langle x \rangle$ e $\langle x^2 \rangle$ para o estado $n = 2$, $l = 1$, $m = 1$. Notar que o estado não é esfericamente simétrico.

d) Qual é o valor mais provável para encontrar o eletrão no estado fundamental do átomo de Hidrogénio?