

# Mecânica Quântica – Série 8

Curso de Engenharia Física Tecnológica – 2015/2016

(Versão de 9 de Novembro de 2015)

## \* 8.1 *Gasiorowicz 8.1*

Considere um caso especial dum potencial da forma

$$V(x, y, z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z) \quad (1)$$

onde cada um dos potenciais  $V_i$  tem a mesma forma,

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

(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  $a_0 \rightarrow a_0/Z$ ),

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

onde

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

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

$$L_n^\alpha(\rho) = \sum_{k=0}^n \binom{n+\alpha}{n-k} \frac{(-\rho)^k}{k!}$$

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 +1)!)]  
(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 respectivas distribuições de probabilidade radiais definidas por

$$P_{nl}(r) = r^2 R_{nl}^2(r)$$

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,

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

Explique como é possível este resultado.

**\* 8.3** *Gasiorowicz 8.6*

Compare os comprimentos de onda das transições  $2P \rightarrow 1S$  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  $\alpha$  (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,

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

- Qual é o valor médio da energia?
- Qual é o valor médio de  $L^2$ ?
- 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,

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

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

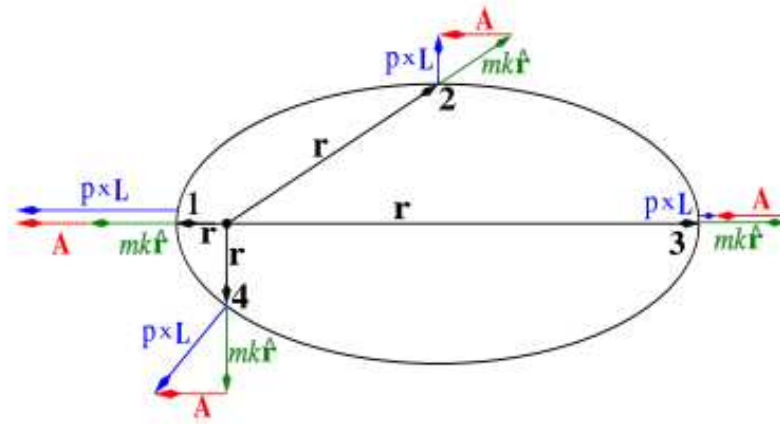


Figura 1: Vetor Runge-Lenz. Nesta figura, tirada da Wikipedia,  $k = \hat{\alpha}$ .

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

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

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

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

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

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

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

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 elétron 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 elétron no estado fundamental do átomo de Hidrogênio?