Mecânica Quântica: 2014-2015

3ª Série

1. O oscilador harmónico fornece um exemplo do princípio da correspondência, em que os resultados da mecância quântica tendem para os da mecância clássica no limite clássico. Discuta este resultado e demonstre que a distribuição de probabilidade da posição da partícula é análoga ao resultado clássico se o oscilador se encontrar extremamente excitado.

(*vide* **Rae, págs. 36-37**)

2. A equação de Schrödinger para um oscilador harmónico simples tem como solução geral a função de onda $u_n(x) = H_n(x)\exp(-x^2/2)$, em que $H_n(x)$ são os polinómios de Hermite, que obedecem à seguinte equação:

$$H_n''(x) - 2xH_n'(x) + (\alpha - 1)H_n(x) = 0\,. \qquad (1)$$

2.1. Mostre que se verifica a relação de recorrência:

$$H_n(x) = 2xH_{n-1}(x) - H_{n-1}'(x)\,. \qquad (2)$$

2.2. Utilize a relação de recorrência dada na alínea anterior para provar as seguintes relações:

$$H_0(x) = 1, \qquad H_1(x) = 2x, \qquad \text{e} \qquad H_n(x) = (-1)^n\, e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x^2}\right)\,. \qquad (3)$$

2.3. Mostre que as funções de Hermite $u_n(x) = H_n(x)\exp(-x^2/2)$ formam um sistema ortonormado.

3. Considere a vibração de um átomo de hidrogénio, numa molécula de água, ao longo de uma direcção da ligação $O - H$. Este movimento pode ser excitado por radiação electromagnética com um comprimento de onda da ordem de $4 \times 10^{-6}\, m$.

3.1. Calcule a constante elástica desta vibração e o ponto-zero de energia do oscilador.

3.2. Dado que cada grau de liberdade molecular tem uma energia térmica de cerca de k_BT (em que a constante de Boltzmann é $k_B \simeq 1.4 \times 10^{-23} J/K$), qual é o estado vibracional mais provável da molécula de água à temperatura de $T = 450^oK$?

(*vide* **Rae, ex. 2.7, pág. 38**)

4. Considere uma partícula que se move no seguinte potencial bidimensional

$$V(x,y) = \begin{cases} 0, & \text{se} \quad |x| \leq a \quad |y| \leq b \\ \infty, & \text{se} \quad |x| > a \quad |y| > b \end{cases} . \tag{4}$$

4.1. Calcule os níveis de energia e obtenha as funções de onda associadas.

4.2. Discuta a degenerescência do sistema e a simetria da distribuição de probabilidade da posição no caso específico $a = b$.

(*vide* **Rae, ex. 3.1, pág. 59**)

5. Um exemplo de um sistema tri-dimensional em que a equação de Schrödinger pode ser separada em coordenadas Cartesianas é o do oscilador harmónico tri-dimensional, em que uma partícula se move no seguinte potencial

$$V(r) = \frac{1}{2}K_1\,x^2 + \frac{1}{2}K_2\,y^2 + \frac{1}{2}K_3\,z^2\,. \tag{5}$$

Calcule os níveis de energia e obtenha as funções de onda associadas.

6. Considere o caso do oscilador harmónico isotrópico, em que $K_1 = K_2 = K_3$ e o potencial dado por $V(r) = \frac{1}{2}Kr^2$.

6.1. Utilize os resultados da alínea anterior e demonstre que os níveis de energia deste caso isotrópico podem ser expressos como $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$, em que $n \geq 1$.

6.2. Utilizando as expressões dos polinómios de Hermite, no caso do oscilador harmónico isotrópico, exprima as funções de onda do estado de energia mais baixo e de um dos primeiros estados excitados degenerados, em coordenadas esféricas, e verifique que estas são soluções da seguinte equação radial

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2\chi}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m_e r^2}\right]\chi = E\chi\,. \tag{6}$$

7. Considere que uma partícula se move num potencial bidimensional com simetria circular.

7.1. Demonstre que a equação de Schrödinger, independente do tempo, pode ser separada em coordenadas polares planas, e que a componente angular da função de onda tem uma forma de $(2\pi)^{1/2}\exp(im\phi)$, em que m é inteiro.

7.2. Determine a simetria da distribuição de probablidade da posição no caso anterior?

(*vide* **Rae, ex. 3.3, pág. 59**)

8. Atendendo ao sistema bidimensional com simetria circular da alínea 7, em que o potencial é dado por

$$V(r) = \begin{cases} 0, & \text{se} \quad 0 < r \leq a \\ \infty, & \text{se} \quad r > a \end{cases} . \tag{7}$$

8.1. Demonstre que a componente radial $R(r)$ da função de onda satisfaz a seguinte equação

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{dR}{d\rho} + \left(1 - \frac{m^2}{\rho^2}\right) R = 0\,, \tag{8}$$

em que $\rho = (2m_e E/\hbar^2)^{1/2} r$.

8.2. No caso de $m = 0$, demonstre que $R = \sum_{k=0}^{+\infty} A_k \rho^k$, com $A_k = 0$ se k é ímpar e $A_{k+2} = -A_k/(k+2)^2$.
(*vide* **Rae, ex. 3.4, pág. 59**)

9. Considere o seguinte potencial com simetria esférica:

$$V(r) = 0, \quad r \leq a\,; \qquad V(r) = \infty, \quad r > a\,. \tag{9}$$

Encontre expressões para os níveis de energia. Suponha que $l = 0$ e discuta qualitativamente o caso para outros valores de l.

10. Uma partícula de massa m_e move-se num poço potencial, tri-dimendional e esfericamente simétrico, dado por

$$V(r) = \begin{cases} 0, & \text{se} \quad 0 < r \leq a \\ V_0, & \text{se} \quad r > a \end{cases} . \tag{10}$$

10.1. Demonstre que as energias dos estados com número quântico $l = 0$ são determinadas pela condição $k \cot(ka) = -\kappa$, em que $k^2 = 2mE/\hbar^2$ e $\kappa^2 = 2m(V_0 - E)/\hbar^2$.

10.2. Verifique que apenas há estados ligados do sistema para o caso $V_0 > \hbar^2\pi^2/(8ma^2)$.
(*vide* **Rae, ex. 3.5, pág. 59**)

11. Verifique a seguinte relação entre as harmónicas esféricas, Y_{lm}, e o seu complexo conjugado Y^*_{lm}

$$\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} Y^*_{lm}(\theta,\phi)\, Y_{l'm'}(\theta,\phi)\sin\theta\, d\theta d\phi = 0\,, \qquad l \neq l' \quad m \neq m'\,, \tag{11}$$

para todos os valores de l, l', m e m', com $l, l' \leq 2$.

(*vide* **Rae, ex. 3.7, pág. 59**)

12. Considere a equação associada de Legendre

$$\frac{d}{dx}\left[(1-x^2)\,\frac{dy}{dx}\right] + \left(\lambda_2 - \frac{m^2}{1-x^2}\right) y = 0\,, \tag{12}$$

com $m \neq 0$. Para $m = 0$, a eq. (12) é a equação de Legendre e se as soluções tiverem que ser limitadas em $[-1, 1]$, temos $\lambda_2 = l(l+1)$. Prove o seguinte lema:

LEMA: As soluções da eq. (12) são da forma $(1-x^2)^{m/2}\frac{d^m}{dx^m}u(x)$, com $u(x)$ solução da equação de Legendre.

13. Considere a equação de Schrödinger, independente do tempo, para uma partícula de massa m num potencial esfericamente simétrico $V(r)$.

13.1. Mostre que a equação radial corresponde a um problema unidimensional com potencial efectivo $V(r) + l(l+1)\hbar^2/2mr^2$, onde l é um inteiro não negativo que indexa as solucoes da parte angular.

13.2. Compare com o caso clássico e interprete fisicamente $l(l+1)\hbar^2$.

14. Considere a equação radial para o átomo de hidrogénio.

14.1. Calcule os dois maiores comprimentos de onda da série de Lyman, que é a série espectral associada a transições para o nível de energia fundamental.

14.2. Represente graficamente as três soluções da equação radial correspondentes às escolhas $n = l + 1$ e $n = 1, 2, 3$.

14.3. Calcule em termos do raio de Bohr o valor médio de r para a solução da equação de Schrödinger independente do tempo associada a cada uma das três soluções da alínea anterior.