Mecânica Quântica: 2014-2015

5ª Série

1. Considere o movimento de uma partícula, no caso unidimensional, em que esta é sujeita a um potencial que é nulo na região $|x| \leq a$ e infinito em $|x| > a$. Num determinado instante, a sua função de onda é dada por

$$\psi = (5a)^{-1/2}\cos(\pi x/2a) + 2(5a)^{-1/2}\sin(\pi x/a)\,. \tag{1}$$

(*vide* **Rae, Exs. 4.2–4.4, pág. 92**)

1.1. Quais são os resultados possíveis de uma medição da energia deste sistema, e quais são as suas probablidades relativas? (Recorde que a energia deste sistema é dada por $E_n = \hbar^2\pi^2 n^2/8ma^2$).

1.2. Quais são as possíveis formas das funções de onda imediatamente após uma determinada medição?

1.3. Considere que a energia da partícula é medida e que se obtém um valor correspondente ao valor próprio da energia mais baixa. Demonstre que a probabilidade de uma subsequente medição do momento do electrão fornece um resultado entre $\hbar k$ e $\hbar(k+dk)$ dado por $P(k)\,dk$, em que

$$P(k) = \frac{\pi}{2a^3}\,\frac{\cos^2(ka)}{(\pi^2/4a^2 - k^2)^2}\,. \tag{2}$$

1.4. Demonstre que, se a partícula se encontra num estado próprio de energia bastante elevado, com um valor próprio de E, é muito provável que a medição do momento resulte num valor de $\pm(2mE)^{1/2}$. Compare este resultado com as previsões da mecância clássica.

2. Calcule o valor médio (expectável) das seguintes quantidades para um electrão que se encontra no estado fundamental de um átomo de hidrogénio, antes de se efectuarem as respectivas medições: (i) A distância r a que um electrão se encontra do núcleo; (ii) r^2; (iii) A energia potencial; (iv) A energia cinética. Demonstre que a adição de (iii) e (iv) iguala a energia total.

[Dados: A função de onda associada ao estado fundamental do átomo de hidrogénio é $u_{100} = 1/(\pi a_0^3)^{1/2}\exp(-r/a_0)$; os níveis de energia discretos são dados por $E_n = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2 n^2}$; e a constante a_0 é definida por $a_0 = 4\pi\varepsilon_0\hbar^2/(m_e e^2)$].

(*vide* **Rae, Ex. 4.7, pág. 92**)

3. Considere raios X, com um comprimento de onda de 1.00×10^{-10}m, incidentes num alvo que contém electrões livres. Verifica-se que um fotão de raio X sujeito à dispersão de Compton, de comprimento de onda 1.02×10^{-10}m, é detectado a um ângulo de 90º relativamente à direcção de incidência. Obtenha a máxima informação possível acerca do momento do electrão de dispersão, antes e após ao processo de dispersão.

(*vide* **Rae, Ex. 4.11, pág. 93**)

4. Considere um potencial unidimensional, que contém uma componente com uma "função step", dado por

$$V(x) = V_0\,\Theta(x) \qquad \text{com} \qquad V_0 > 0\,. \tag{3}$$

Calcule os coeficientes de reflexão e de transmissão para partículas incidentes, pela esquerda, com energia: (i) $E > V$; (ii) $E < V$.

(*vide* **CT, complemento $B_{III}.1, 2$, págs. 280-281**)

5. Representações de Schrödinger e de Heisenberg.

Uma das vantagens da representação de Heisenberg é que esta fornece expressões que são formalmente análogas às da Mecânica Clássica. Neste contexto, demonstre as seguintes relações, na representação de Heisenberg:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}X_H(t) = \frac{1}{m}P_H(t)\,, \tag{4}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}P_H(t) = -\frac{\partial V}{\partial X}(X_H, t)\,. \tag{5}$$

(*vide* **CT, complemento G_{III}, pág. 314**)

6. Teorema Virial.

(*vide* **CT, complemento L_{III}, ex. 10, pág. 344**)

6.1. No contexto de um problema unidimensional, considere uma partícula com o seguinte Hamiltoniano:

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(X)\,, \tag{6}$$

em que $V(X) = \lambda X^n$. Calcule o comutador $[H, XP]$.

Se existe um ou vários estados estacionários $|\varphi\rangle$ no potencial V, demonstre que os valores médios $\langle T\rangle$ e $\langle V\rangle$ das energias cinética e potencial nestes estados satisfazem a seguinte relação: $2\,\langle T\rangle = n\,\langle V\rangle$.

6.2. Considere agora, o caso tri-dimensional, em que o Hamiltoniano é dado por:

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R})\,. \tag{7}$$

Calcule o comutador $[H, \mathbf{R} \cdot \mathbf{P}]$.

Seja $V(\mathbf{R})$ uma função homogénea de n-ésima ordem das variáveis X, Y e Z. Qual a relação que existe entre o valor médio da energia cinética e o valor médio da energia potencial da partícula, num estado estacionário?

Recorde que uma função homogénea V de n-ésima ordem das variáveis x, y e z, por definição, satisfaz a seguinte relação: $V(\alpha x, \alpha y, \alpha z) = \alpha^n V(x, y, z)$ bem como a identidade de Euler:

$$x\frac{\partial V}{\partial x} + y\frac{\partial V}{\partial y} + z\frac{\partial V}{\partial z} = nV(x, y, z)\,. \tag{8}$$

7. Poço potencial unidimensional e infinito. Considere uma partícula de massa m sujeita ao seguinte potencial:

$$\begin{array}{rcl} V(x) = 0, & \text{se} & 0 \leq x \leq a\,, \\ V(x) = +\infty, & \text{se} & x < 0 \quad \text{e} \quad x > a\,. \end{array}$$

Considere que $|\varphi_n\rangle$ são os estados próprios do Hamiltoniano do sistema, e que os seus valores próprios são $E_n = n^2\pi^2\hbar^2/(2ma^2)$. O estado da partícula no instante $t = 0$ é dado por:

$$|\psi(0)\rangle = a_1\,|\varphi_1\rangle + a_2\,|\varphi_2\rangle + a_3\,|\varphi_3\rangle + a_4\,|\varphi_4\rangle\ . \tag{9}$$

(*vide* **CT, complemento L_{III}, ex. 12, pág. 345**)

7.1. Ao medir a energia da partícula no estado $|\psi(0)\rangle$, qual a probabilidade de encontrar um valor inferior a $3\pi^2\hbar^2/(ma^2)$?

7.2. Qual o desvio do valor quadrático médio ("root-mean-square deviation") da energia da partícula no estado $|\psi(0)\rangle$?

7.3. Calcule o vector de estado $|\psi(t)\rangle$ num instante t. Será que os resultados encontrados nas alíneas 7.1 e 7.2 no instante $t = 0$, se mantêm válidos para um instante arbitrário?

7.4. Ao efectuar uma medição da energia, encontra-se o valor $8\pi^2\hbar^2/(ma^2)$. Após a medição, qual o estado do sistema? Qual o valor da energia, após uma nova medição?

8. Prove as seguintes relações:

- $[a, a^+] = 1$;
- $[N, a] = -a$;
- $[N, a^+] = a^+$.

(*vide* **CT, Cap.**V**.B, págs. 489-490**)

9. Lemas.
(*vide* **CT, Cap.**V**.B, págs. 491-492**)

9.1. *Lema 1 (Propriedades dos valores próprios de N).* Demonstre que os valores próprios, ν, do operador N, são positivos ou nulos.

9.2. *Lema 2 (Propriedades do vetor $a\,|\varphi_\nu^i\rangle$).* Seja $|\varphi_\nu^i\rangle$ um vetor próprio (não nulo) de N, com um valor próprio ν. Prove que:

- se $\nu = 0$, logo o ket $a\,|\varphi_{\nu=0}^i\rangle$ é nulo;
- se $\nu > 0$, logo o ket $a\,|\varphi_\nu^i\rangle$ é um vector próprio não-nulo de N, com um valor próprio $\nu - 1$.

9.3. *Lema 3 (Propriedades do vetor $a^+\,|\varphi_\nu^i\rangle$).* Seja $|\varphi_\nu^i\rangle$ um vetor próprio (não nulo) de N, com um valor próprio ν. Prove que:

- $a^+\,|\varphi_\nu^i\rangle$ é sempre não nulo;
- $a^+\,|\varphi_\nu^i\rangle$ é um vetor próprio de N, com um valor próprio $\nu + 1$.

10. Demonstre que o estado fundamental $E_0 = \hbar\omega/2$ do oscilador harmónico simples é *não-degenerado* (Sugestão: Note que os estados próprios do Hamiltoniano H associados ao valor próprio $E_0 = \hbar\omega/2$, i.e., os estados próprios de N associados ao valor próprio $n = 0$, satisfazem a equação $a\,|\varphi_0^i\rangle = 0$).
(*vide* **CT, Cap.**V**.B.3.a, págs. 494-495**)

11. Estados próprios do Hamiltoniano.
(*vide* **CT, Cap.**V**.C.1, págs. 496-499**)

11.1. Demonstre que um estado próprio arbitrário $|\varphi_n\rangle$ pode ser obtido em função do estado fundamental, pela seguinte relação $|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n\,|\varphi_0\rangle$.

11.2. Demonstre as seguintes relações:

$$
\begin{aligned}
a^{+} \, |\varphi_n\rangle &= \sqrt{n+1} \, |\varphi_{n+1}\rangle \, , & (10)\\
a \, |\varphi_n\rangle &= \sqrt{n} \, |\varphi_{n-1}\rangle \, . & (11)
\end{aligned}
$$

11.3. Prove as seguintes relações:

$$
X \, |\varphi_n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left[\sqrt{n+1} \, |\varphi_{n+1}\rangle + \sqrt{n} \, |\varphi_{n-1}\rangle \right] , \tag{12}
$$

$$
P \, |\varphi_n\rangle = i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \left[\sqrt{n+1} \, |\varphi_{n+1}\rangle - \sqrt{n} \, |\varphi_{n-1}\rangle \right] . \tag{13}
$$

11.4. Encontre as expressões para os elementos de matriz de $\langle\varphi_{n'}| \, \hat{Q} \, |\varphi_n\rangle$, para os seguintes operadores $\hat{Q}$: (i) a; (ii) a^{+}; (iii) X; e (iv) P.

12. Funções de onda associadas aos estados estacionários.
(*vide* **CT, Cap.**V**.C.2, págs. 500-501**)

Considere a representação $\{|x\rangle\}$, em que as funções $\varphi_n(x) = \langle x \,|\, \varphi_n\rangle$ representam os estados próprios do Hamiltoniano. Prove que $\varphi_n(x)$ é dada pela seguinte relação:

$$
\varphi_n(x) = \left[\frac{1}{2^n n!} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^n \right]^{1/2} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \left[\frac{m\omega}{\hbar} \, x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \right]^n e^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2} . \tag{14}
$$

Determine as expressões para as duas primeiras funções de $\varphi_n(x)$, i.e, $\varphi_1(x)$ e $\varphi_2(x)$.