

Mecânica Quântica

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

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

1.1. Quais são os resultados possíveis de uma medição da energia deste sistema, e quais são as suas probabilidades 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

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

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 mecânica 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 $E_n = -\frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2}$; e a constante a_0 é definida por $a_0 = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2 / (m_e e^2)$].

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

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

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

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

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:

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

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

6. Teorema Virial.

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

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

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:

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

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:

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

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

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

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:

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

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 5.1 e 5.2 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?