Universidade Federal do Rio de Janeiro

Instituto de Física

MECÂNICA QUÂNTICA I – 2005-2

Lista de exercícios

1.

(a) Mostre que os autovalores de um operador hermitiano O ($O = O^\dagger$) são reais.

(b) Mostre que os autovetores de um operador hermitiano O associados a autovalores diferentes são ortogonais. Forneça um exemplo de um operador hermitiano associado a um observável quântico e de dois de seus auto-vetores associados a autovalores distintos.

(c) Dentre os operadores: XP_x; $XP_y - YP_x$ e $L_x + iL_y$, quais são hermitianos? Justifique.

(d) Responda se a seguinte afirmação é falsa ou verdadeira: 'se dois operadores A e B possuem um auto-vetor comum, então eles comutam.' Se verdadeiro, demonstre; se falso, exiba um contra-exemplo com dois operadores relevantes na Mecânica Quântica.

2.

(a) Mostre que o valor médio do momento de uma partícula que se encontra em um estado ligado é zero.

(b) (3,0 pontos) Uma partícula propaga-se da esquerda para a direita sobre o eixo Ox, com energia $E > 0$, atinge, em $x = 0$, uma barreira de potencial que pode ser aproximada por uma "delta" $V(x) = \lambda\delta(x)$, com $\lambda > 0$.

(i) Mostre que a função de onda da partícula deve satisfazer à condição de contorno:

$$\left.\frac{d\phi}{dx}\right|_{0+} - \left.\frac{d\phi}{dx}\right|_{0-} = \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\phi(0)\,.$$

(ii) Mostre que os estados estacionário desta partícula são dados por

$$\phi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + Ae^{-ikx}\,, & \text{se } x < 0\,, \\ Be^{ikx}\,, & \text{se } x > 0\,, \end{cases}$$

e calcule as constantes k, A e B em função da energia E, da massa m da partícula e de λ.

(iii) Calcule os coeficientes de reflexão e transmissão da barreira, R e T, mostrando que $R + T = 1$. Esboce um gráfico de T como função da energia E da partícula.

3.

(a) Uma partícula de massa m move-se no espaço tri-dimensional sujeita a um potencial complexo $V(\vec{r}) = R(\vec{r}) + iI(\vec{r})$, onde $R(\vec{r})$ e $I(\vec{r})$ são funções reais (este potencial é usado às vezes para descrever fenomenologicamente o processo de criação e destruição de partículas). Mostre a partir da equação de Schrödinger que nesse caso a equação de continuidade é dada por

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = \frac{2I(\vec{r})}{\hbar}\rho \, ,$$

onde $\rho = |\psi|^2$ e

$$\vec{j}(\vec{r}) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right) \, .$$

(b) Mostre que se $I(\vec{r}) < 0$ então

$$\frac{d}{dt}\int d^3r \, |\psi(\vec{r}, t)|^2 < 0 \, ,$$

indicando que a probabilidade total de encontrar a partícula em algum lugar do espaço diminui com o tempo (o que simula um processo de absorção de partículas). Mostre ainda que, se $I(\vec{r}) = 0$, a probabilidade total é conservada.

4. Uma partícula de massa m está sujeita ao potencial unidimensional $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. No instante $t = 0$ prepara-se o estado:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\phi_0\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}}|\phi_1\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|\phi_2\rangle,$$

onde $|\phi_n\rangle$ representa um auto estado de $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$ associado ao auto valor $\hbar\omega(n + 1/2)$.

(a) Escreva a expressão para o estado $|\psi(t_0)\rangle$ para $t_0 > 0$;

(b) Qual é a probabilidade de encontrarmos a partícula com energia $\frac{5}{2}\hbar\omega$ no instante t_0?

(c) Qual é valor médio do operador energia H nos instantes i) $t = 0$ e ii) $t = t_0$?

(d) Quais são os valores médios do operador posição, x, da partícula nos tempos $t = 0$ e $t = t_0$?

(e) É feita uma medida da energia no tempo $t_1 > t_0$ e encontra-se o valor $\frac{3}{2}\hbar\omega$. Posteriormente, em $t = t_2$, é feita nova medida da energia. Qual é a probabilidade de obter-se o valor $\frac{5}{2}\hbar\omega$?

Sugestão: Utilize os operadores $a = (X/x_0 + iPx_0/\hbar)$ e $a^\dagger = (X/x_0 - iPx_0/\hbar)$, $x_0 = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}$, para calcular elementos de matriz.

5. [2.5] Considere uma partícula de massa m no potencial harmônico uni-dimensional $V(x) = m\omega^2 x^2/2$. Os estados estacionários são representados por $|n\rangle$, com $n = 0, 1, 2, ...$

a) O operador abaixamento atua sobre os estados estacionários da seguinte forma: $a|n\rangle = C|n-1\rangle$. $|n\rangle$ é um auto-estado de a ? Caso negativo justifique, caso afirmativo determine o autovalor. Determine a constante de normalização C.

b) Calcule o valor médio da energia potencial quando a partícula se encontra no estado estacionário $|n\rangle$. Sugestão: use o resultado $X = \sqrt{\hbar/(2m\omega)}\,(a + a^\dagger)$.
c) A partir do resultado do item (b), determine o valor médio da energia cinética quando a partícula se encontra no estado estacionário $|n\rangle$.

6. Uma partícula de massa m se encontra em um potencial harmnico anisotrópico descrito por

$$V(x,y,z) = \frac{m}{2}\{\omega_1^2(x^2+y^2) + \omega_2^2 z^2\}$$

a) Calcule os níveis de energia.
b) É possível encontrar auto estados simultâneos da energia e do quadrado do momento angular L^2? Justifique
c) É possível encontrar auto estados simultâneos da energia e da componente z do momento angular L_z? Justifique

7. Sejam L_x,L_y, e L_z, os operadores de momento angular orbital e $|l,m\rangle$ um auto estado simultâneo de $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ e L_z com autovalores $l(l+1)\hbar^2$ e $m\hbar$. Demonstre, a partir das regras de comutação dos operadores L_x, L_y, e L_z, que

$$\langle l,m|L_x|l,m\rangle = 0$$

8. [3.0] Sejam L_x,L_y, e L_z, operadores de momento angular e $|\ell,m\rangle$ um auto estado simultâneo de L^2 e L_z com autovalores $\ell(\ell+1)\hbar^2$ e $m\hbar$. Os operadores abaixamento e levantamento são definidos por $L_+ = L_x + iL_y$ e $L_- = L_x - iL_y$.
a) O vetor de estado $|0,0\rangle$ é autoestado de L_x ? Caso negativo, justifique, caso afirmativo determine o auto-valor.
b) É possível construir uma base de auto-vetores simultâneos de L^2, L_x e L_z ? Justifique e comente a sua resposta à luz do item (a).
c) Calcule um autovetor simultâneo de L^2 e L_x que tenha autovalores $2\hbar^2$ e 0, respectivamente, em função dos autovetores $|\ell,m\rangle$.

9. Uma partícula de massa m está confinada dentro de uma "sacola" esférica de raio a, com paredes impenetráveis.
a) Calcule os dois níveis de energia mais baixos nos casos em que a partícula tem momento angular nulo.
b) Prepara-se um estado inicial em que a densidade de probabilidade de encontrar a partícula dentro da sacola é constante dentro de uma esfera de raio $a/2$. Qual a probabilidade de ao se fazer uma medida de energia encontrarmos os valores obtidos no item a)?

10. Uma partícula sem spin, de massa m e carga q está sujeita a um campo magnético homogêneo e constante, B, paralelo ao eixo x. A hamiltoniana é então:

$$H = \frac{P^2}{2m} - \frac{q\hbar}{2m}BL_x$$

(a) Qual é a equação horária para $< \vec{L} >$?
(b) Se em $t = 0$ a função de onda é

$$\psi(x, y, z, 0) = \frac{e^{ikx}}{(2\pi)^{3/2}},$$

qual é a função de onda em um tempo $t_0 > 0$?

11.
Teorema do virial.
(a) A partir de

$$\frac{d}{dt} < \psi|\ \vec{R}.\vec{P}\ |\psi >= \frac{i}{\hbar} < \psi|\ [H, \vec{R}.\vec{P}]\ |\psi > \qquad \text{e} \quad H = \frac{P^2}{2m} + V(r),$$

demonstre que

$$< \psi|\ \frac{P^2}{2m}\ |\psi >= \frac{1}{2} < \psi|\ \vec{r}.\vec{\nabla}V(r)\ |\psi >,$$

se $|\psi >$ é um estado estacionário.
(b) Calcule os valores médios da energia cinética e da energia potencial quando o átomo de hidrogênio se encontra em um de seus auto estados de energia, associado ao auto valor $E_n = -\frac{e^2}{2a_0 n^2}$.

12. [4.5] Considere um elétron (carga $-q$, massa m) no campo Coulombiano de um núcleo de massa M e carga Zq, onde Z é o número atômico. O potencial de interação é

$$V(r) = -\frac{Z\,q^2}{4\pi\epsilon_0 r} \equiv -\frac{Ze^2}{r}.$$

Considere a função de onda do elétron

$$\psi(r) = \exp(-r/a).$$

a) Determine a condição sobre a constante a para que ψ corresponda a um estado estacionário.
b) Uma vez satisfeita a condição do item a), determine o valor de energia associado ao estado ψ.
c) Obtenha a partir do resultado do item a) a expressão para o raio de Bohr a_0, que é a escala de comprimento relevante para o problema do átomo de hidrogênio.
d) Em qual das duas situações a distância média entre o núcleo e o elétron é maior: $Z \gg 1$ ou $Z = 1$? Justifique cuidadosamente (não é cobrado o cálculo do valor médio).
e) Estando o elétron no estado ψ, é feita uma medida dos observáveis L^2 e L_z. Determine os resultados possíveis e respectivas probabilidades.

13. Em um certo instante prepara-se um estado de um elétron no campo coulombiano do próton :

$$\psi(r) = N e^{-r/(3a_0)} \cos^2\theta$$

onde r é a distância entre o elétron e o próton, $a_0 = \hbar^2/(\mu e^2)$ é o raio de Bohr e N é uma constante de normalização.

(a) Qual é a probabilidade de, ao se fazer uma medida neste instante, encontrar-se o valor $2\hbar^2$ para o quadrado do momento angular orbital?

(b) Qual é a probabilidade de, ao se fazer uma medida neste instante, encontrar-se o valor $E_1 = -\frac{e^2}{2a_0}$ para a energia?