

PEM5116 — Mecânica Quântica

Lista de Exercícios no. 1

10 de abril de 2019

1. Em geral, a mecânica quântica é relevante quando o comprimento de onda de de Broglie ($\lambda = h/p$) da partícula em questão é maior do que o tamanho característico do sistema (d). Em equilíbrio térmico à temperatura absoluta T , a energia cinética média de uma partícula é

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{3}{2}k_B T$$

($k_B = 1,38 \times 10^{-23}$ J/K é a constante de Boltzmann) e, portanto, o comprimento de onda típico de de Broglie é

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{3mk_B T}}.$$

O objetivo deste problema é antecipar quais sistemas terão que ser tratados quanticamente e quais podem tranquilamente ser descritos classicamente.

- (a) **Sólidos.** O parâmetro de rede de um sólido típico é de cerca de $d = 0,3$ nm. Encontre a temperatura abaixo da qual os elétrons livres¹ desse sólido são quânticos. E um núcleo (use o sódio como exemplo)? **Conclusão:** em sólidos, os elétrons livres são sempre quânticos; os núcleos quase nunca o são. O mesmo vale para líquidos (onde o espaçamento atômico é quase o mesmo), com exceção do hélio abaixo de 4 K.
- (b) **Gases.** Para quais temperaturas os átomos de um gás ideal monoatômico à pressão P são quânticos? **Dica:** use a equação do gás ideal, $PV = Nk_B T$, para deduzir o espaçamento interatômico médio. R.: $T < (1/k_B)(h^2/3m)^{3/5}P^{2/5}$. Para o gás mostrar comportamento quântico, é preciso que m seja o menor possível, e P tão grande quanto possível. Faça o cálculo para o hélio à pressão atmosférica. O hidrogênio no espaço sideral (onde o espaçamento intermolecular é de cerca de 1 cm e a temperatura é de 3 K) é quântico?
2. Uma partícula, sob a influência do potencial do oscilador harmônico, é preparada no seguinte estado inicial já normalizado:

$$\Psi(x, 0) = \sum_{n=1}^{\infty} 2^{-n/2} \psi_n(x) \quad (1)$$

(repare que a soma começa em $n = 1$), com $\psi_n(x)$ as soluções normalizadas da equação de Schrödinger independente do tempo (ESIT) com energias E_n dadas por

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots).$$

- (a) Qual é a probabilidade de uma medida da energia resultar num valor maior que $3\hbar\omega$?
- (b) Encontre o valor esperado da energia (hamiltoniano) no instante inicial. Lembre que

$$\langle H \rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |C_n|^2 E_n$$

e use as seguintes relações:

$$\sum_{n=1}^{\infty} 2^{-n} = 1, \quad \sum_{n=1}^{\infty} n 2^{-n} = 2.$$

- (c) No instante $t = \omega^{-1}$, qual é o valor esperado da energia?

¹nos sólidos, os elétrons das camadas mais internas estão ligados aos núcleos; para eles, o comprimento característico é o raio atômico. Mas os elétrons mais externos estão apenas fracamente ligados; para eles, a distância relevante é o parâmetro de rede. Tais elétrons são chamados de elétrons de valência. Em alguns metais, são chamados também de elétrons livres.

3. Considere os estados estacionários de uma partícula no poço infinito unidimensional, dados por

$$\Psi_n(x, t) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) e^{-iE_n t/\hbar}, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & x < 0 \text{ ou } x > a \end{cases}$$

sendo

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{2ma^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots).$$

Se a partícula está no estado estacionário $\Psi_n(x, t)$, o valor esperado da posição, $\langle x \rangle_n$, é

$$\langle x \rangle_n = \frac{a}{2}.$$

- (a) Explique fisicamente porque $\langle x \rangle_n$ é independente de n .
 (b) Usando o postulado de Ehrenfest (valores esperados obedecem leis clássicas), calcule o valor esperado da velocidade, $\langle v \rangle_n$, quando a partícula está no n -ésimo estado estacionário. Explique fisicamente o resultado.
 (c) Se a partícula está no estado

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t)],$$

o valor esperado da posição é

$$\langle x \rangle = \frac{a}{2} - \frac{16a}{9\pi^2} \cos \frac{3\hbar t}{2ma^2}.$$

Calcule o valor esperado do momento, $\langle p \rangle$.

- (d) Explique fisicamente o motivo de $\langle x \rangle$ e $\langle p \rangle$ do item (c) variarem com o tempo. **Dica:** a função de onda $\Psi(x, t)$ do item (c) corresponde a um estado estacionário?

4. Uma partícula de massa m , sob a influência de um certo potencial $V(x)$, tem a seguinte função de onda:

$$\Psi(x, t) = A \exp \left[-\omega \left(\frac{mx^2}{\hbar} + it \right) \right]$$

com A e ω constantes reais positivas. É possível demonstrar que essa função de onda é solução da equação de Schrödinger para o potencial dado (que você não precisa conhecer).

- (a) Encontre o valor de A . Você vai precisar da seguinte integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-z^2} dz = \sqrt{\pi}$$

- (b) Essa função de onda representa um estado estacionário? Explique. Lembre que os estados estacionários são escritos como

$$\Psi_n(x, t) = \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}.$$

- (c) Determine o valor esperado da energia (ou seja, do hamiltoniano) da partícula. Por definição,

$$\langle H \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \hat{H} \Psi(x, t) dx, \quad (2)$$

sendo

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x).$$

Lembre que, para um estado estacionário $\psi_n(x)$,

$$\hat{H} \psi_n(x) = E_n \psi_n(x).$$

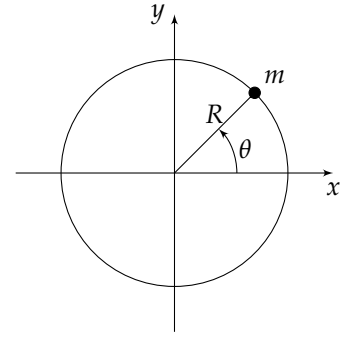
Evite calcular a integral da Eq. (2), já que você não conhece $V(x)$.

5. Uma partícula quântica de massa m está limitada a se mover sobre um anel circular de raio R constante, como na figura ao lado. A ESIT para esse problema é

$$-\frac{\hbar^2}{2mR^2}\psi''(\theta) + V(\theta)\psi(\theta) = E\psi(\theta) \quad (3)$$

sendo que $0 \leq \theta \leq 2\pi$ e o símbolo $'$ denota derivação em relação a θ . Além disso, precisamos impor condições de contorno periódicas,

$$\psi(2\pi) = \psi(0), \quad \psi'(2\pi) = \psi'(0).$$



Considere que o potencial é nulo, ou seja, $V(\theta) = 0$. Esse é o modelo de Hückel, que descreve qualitativamente elétrons livres em anéis aromáticos de moléculas orgânicas. A solução geral da Eq. (3) para esse caso é

$$\psi(\theta) = Ae^{ik\theta} + Be^{-ik\theta},$$

com A e B constantes de integração e

$$k = \sqrt{\frac{2mR^2E}{\hbar^2}}.$$

Impondo as condições de contorno, encontre as energias E_n dos estados estacionários do problema.

6. Uma partícula no potencial do oscilador harmônico está no estado

$$\Psi(x, 0) = A[3\psi_0(x) + 4\psi_1(x)]$$

- Calcule A .
- Ao medir a energia da partícula, quais valores você pode obter e com quais probabilidades?
- Monte $\Psi(x, t)$ e $|\Psi(x, t)|^2$.
- Calcule $\langle x \rangle$ e $\langle p \rangle$. Verifique se o Postulado de Ehrenfest é satisfeito:

$$\frac{d}{dt}\langle p \rangle = \left\langle -\frac{\partial V}{\partial x} \right\rangle$$