Quinta Lista de Mecânica Quântica: 30/Outubro/2023

1. A Eq. de Schrödinger para uma partícula num potencial separável do tipo $V(x,y,z) = V_1(x) + V_2(y) + V_3(z)$ pode ser escrita da seguinte maneira:
$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2})\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \ .$$
Proponha como solução o produto $\psi(x,y,z) = \phi_1(x) \cdot \phi_2(y) \cdot \phi_3(z)$ e mostre que a energia da partícula é dada pela soma $E = E_1 + E_2 + E_3$, sendo que cada componente obedece
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \phi_i(x_i)}{\partial x_i^2} + V_i(x_i)\phi_i(x_i) = E_i\phi_i(x_i) \ , \quad \text{onde } x_i \text{ pode ser } x, y \text{ ou } z \ .$$

2. Baseado no resultado anterior, obtenha os níveis de energia e respectivas autofunções de uma partícula confinada numa "caixa de potencial", onde $V(x,y,z) = 0$ para $0 \leq x, y, x \leq L$ e infinito fora. Observe que as autofunções são degeneradas.

3. Ainda baseado no item (1), expresse os autoestados do oscilador harmônico tridimensional, onde $V(x,y,z) = (k_1x^2 + k_2y^2 + k_3z^2)/2$. A resolução deste exercício demanda duas linhas apenas! Observe degenerescências nos casos (a) $k_1 = k_2 \neq k_3$, ou (b) $k_1 = k_2 = k_3$.

4. Mostre que:
   (a) $[H, L^2]f = 0$, qquer que seja f, logo, $[H, L^2] = 0$;
   (b) $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ (e demais relações cíclicas em xyz) utilizando apenas a definição $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$.
   (c) $[L^2, L_i] = 0$, sendo $i \equiv x, y$ ou z.
   (d) $L_z = xp_y - yp_x$ em coordenadas esféricas é escrito como $L_z = -i\hbar\partial/\partial\phi$.

   Sendo assim, H, L^2 e L_z tem em comum um conjunto completo de autofunções. Mas cuidado, note que as componentes não comutam entre si.

5. Sendo $L_\pm = L_x \pm iL_y$, mostre as seguintes relações:
$[L_+, L_-] = 2\hbar L_z$, $\quad [L_z, L_\pm] = \pm\hbar L_\pm$, $\quad [L^2, L_\pm] = 0$, $\quad L^2 = L_\pm L_\mp + L_z^2 \mp \hbar L_z$.

6. O Hamiltoniano de um disco em rotação livre ao redor de um eixo fixo é dado por (recorde o caso clássico: $E = I\omega^2/2 = L_z^2/2I$)
$$H = \frac{L_z^2}{2I} = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \ , \text{ onde } I \text{ é o momento de inércia do disco e } 0 \leq \phi \leq 2\pi \ .$$
Encontre as autofunções e imponha que elas sejam periódicas em ϕ para achar os autovalores. Resposta: $\psi_m(\phi) = Ae^{im\phi}$ e $E_m = \hbar^2 m^2/2I$, com $m = 0, \pm1, \pm2, ...$ Normalize as ψ_m. Observe que o espectro é degenerado.

7. Na teoria de Bohr, as órbitas foram consideradas circulares. Na nova mecânica quântica isso corresponde a tomar o maior valor do momento angular, isto é, $l = n - 1$ (os outros valores correspondem a órbitas elíticas; o valor $l = 0$ corresponde a que órbita?). Para esses valores de l, a densidade radial de probabilidade $r^2|R(r)_{n,l}|^2$, isto é, a probabilidade entre r e $r + dr$, para quaisquer direções, toma a forma
$$P(r) = (r/a_0)^{2n} \ e^{-2r/na_0} \ .$$
Mostre, então, que essa probabilidade radial tem um máximo em $r_n = n^2 a_0$, justamente o raio calculado na teoria de Bohr para o n-ésimo nível de energia.

8. Um elétron de um hidrogênio encontra-se num nível de energia que beira o contínuo, isto é, com o número quântico principal n muito grande. Obtenha a ordem de grandeza da frequência do fóton correspondente a uma transição para o estado fundamental (n=1); idem para os estados n=2 e n=3. Que faixa do espectro (visível, ...) caem cada uma dessas transições?

9. Calcule o valor da probabilidade do elétron, no estado fundamental do hidrogênio, ser encontrado dentro de uma esfera de raio R. Se R for igual ao raio de Bohr, que valor tem essa probabilidade? Para qual valor de R essa probabilidade alcança 50 % ?

10. Mostre que $\Delta L_x = \Delta L_y = \sqrt{l/2}\ \hbar$ quando calculada na autofunção $Y_{l,l}$ de L^2 e L_z. Qual o valor de ΔL_z nessa mesma autofunção?

11. Sabendo que $Y_{1,0}(\theta,\phi) = (3/4\pi)^{1/2}\cos\theta$, obtenha pela aplicação dos operadores $L_\pm$ os harmônicos esféricos $Y_{1,\pm}$.

12. Um sistema está num estado caracterizado pelo momento angular $l = 2$. Qual o módulo de $\vec{L}$? Quais são os possíveis valores da componente z desse operador? Qual o menor ângulo entre o vetor $\vec{L}$ e o eixo $\hat{z}$? Veja que jamais $\vec{L}$ aponta exatamente numa dada direção. Isso se deve ao princípio de incerteza, reflexo da não comutatividade entre as componentes L_x, L_y e L_z. Se $\vec{L}$ apontasse numa direção dada, eu saberia com exatidão as suas componentes!

13. Considere um sistema físico num autoestado de L^2 e de L_z, ou seja, com autofunção $Y_{lm}(\theta,\phi)$. Determine o valor médio dos observáveis: L_z, L_z^2 e L^2. Calcule a incerteza ΔL_z (pense na resposta; dá para saber sem álgebra!) Mostre que o valor médio de L_x se anula, mas o de L_x^2 não. Sendo assim, determine a incerteza ΔL_x. Repita para ΔL_y.

14. Dado que um elétron esteja num estado de spin 1/2 descrito pelo ket $|\chi\rangle = 3|1/2\rangle + 4i|-1/2\rangle$, determine (obs.: $|\pm 1/2\rangle$ denotam autovetores de S_z).

    (a) as probabilidades das possíveis medidas do observável S_z. Não esqueça de normalizar $|\chi\rangle$.

    (b) Idem para S_x. Sugestão: escreva $|\pm 1/2\rangle$ como combinação linear dos autovetores $|\pm 1/2\rangle_x$ de S_x (feito em classe). Use também que $S_x = (S_+ + S_-)/2$.

    (c) os valores médios dos observáveis S_z e S_x.

15. Ache os autoestados de S_y, denotados $|\uparrow\rangle_y$ e $|\downarrow\rangle_y$, para um spin 1/2 (escrito na forma matricial em classe). Expresse esses autovetores como combinação linear dos autovetores de S_z.

16. Se S_y for medido num estado geral $|\chi\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$, com a e b constantes complexas, que valores podem ser encontrados e com quais probabilidades? Sugestão: use o item anterior e reescreva $|\chi\rangle$ em termos dos autovetores de S_y.

17. Um elétron, descrito pelo ket (não normalizada) $|\chi\rangle = 3|1/2\rangle + 4i|-1/2\rangle$, tem sua componente $\hat{z}$ medida. Com qual probabilidade a medida $\hbar/2$ é observada? Suponha que logo em seguida a essa medida, a componente $\hat{x}$ é observada e resulta no valor $-\hbar/2$. Determine a probabilidade da medida conjunta $\hbar/2$ em $\hat{z}$ e $-\hbar/2$ em $\hat{x}$. Agora inverta a ordem das medidas, isto é, para o mesmo pacote de entrada, meça primeiro a componente $\hat{x}$ e logo em seguida a $\hat{z}$. Qual é a nova probabilidade conjunta de se obter $\hbar/2$ em $\hat{z}$ e $-\hbar x/2$ em $\hat{x}$? Elas serão diferentes, uma vez que os operadores S_z e S_x não comutam, certo?