Mecânica Quântica I - 4302403

6$^{\underline{a}}$ lista

1) Usando a expansão de uma onda plana em harmônicos esféricos

$$e^{i\vec{k}.\vec{r}} = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} i^l j_l(kr)[Y_l^m(\theta_k, \varphi_k)]^* Y_l^m(\theta, \varphi),$$

onde (θ_k, φ_k) são os ângulos em coordenadas esféricas do vetor $\vec{k}$, junto com a representação da $\delta^3(\vec{r} - \vec{r}')$ em coordenadas esféricas:

$$\delta^3(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int k^2 dk d\Omega_k e^{i\vec{k}.(\vec{r}-\vec{r}')},$$

onde $d\Omega_k = \sin\theta_k d\theta_k d\varphi_k$

a) Obtenha a condição de ortogonalidade:

$$\delta^3(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{2}{\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} (-1)^l [Y_l^m(\theta', \varphi')]^* Y_l^m(\theta, \varphi) \int_0^{\infty} dk k^2 j_l(kr) j_l(kr')$$

b) Mostre que se $\vec{k}.\vec{r} = kz$, ou seja, se $\vec{k} // \mathcal{O}z$, entao

$$e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) j_l(kr) P_l(\cos\theta)$$

que é conhecido como a fórmula de Rayleigh.

2) Sabendo que

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r}(k_n r)^{l+1} e^{-k_n r} v_{nl}(k_n r)$$

onde $k_n = 1/na$, $a = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2}\frac{\hbar^2}{m}$ é o raio de Bohr e

$$v_{nl}(x) = \sum_{j=0}^{n-l-1} c_j x^j, \text{ com } c_{j+1} = \frac{2(j+l+1) - 2n}{(j+1)(j+2l+2)} c_j,$$

a) determine $R_{21}(r)$ normalizando-a e monte as funções $\Psi_{211},\ \Psi_{210},\ \Psi_{21-1}$.

b) Determine $R_{30}(r)$, $R_{31}(r)$ e $R_{32}(r)$. Não é necessário normalizá-las.

3) a) Mostre que no estado fundamental do átomo de hidrogênio obtemos: $\langle r \rangle = 3a/2$ e $\langle r^2 \rangle = 3a^2$, onde a é o raio de Bohr.

b) Mostre que no estado fundamental do átomo de hidrogênio obtemos: $\langle x \rangle = 0$ e $\langle x^2 \rangle = a^2$. Dica: esses cálculos não requerem novas integrações . Observe que $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$ e explore a simetria espacial do estado fundamental.

c) Mostre que no estado $n = 2,\ l = 1,\ m = 1$ obtemos: $\langle x^2 \rangle = 12a^2$.

4) Mostre que o valor mais provável de r no estado fundamental do átomo de hidrogênio é: $r = a$. Dica: defina a probabilidade do elétron ser encontrado entre r e $r + dr$ como $P(r) = p(r)dr$, e maximize $p(r)$.

5) O estado inicial de um elétron no átomo de hidrogênio é dado por:

$$\Psi(\vec{r},0) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{211} + \psi_{21-1}).$$

a) Determine $\Psi(\vec{r},t)$ na forma mais simplificada possível.
b) Mostre que, nesse estado,

$$\langle V \rangle = -\frac{\hbar^2}{4ma^2} = \frac{E_1}{2}$$

6) Em $t = 0$ o elétron no átomo de hidrogênio encontra-se no estado

$$\Psi(\vec{r},0) = \frac{1}{\sqrt{10}}(2\psi_{200} + \psi_{210} + \sqrt{2}\psi_{211} + \sqrt{3}\psi_{21-1}).$$

a) Qual o valor esperado da energia desse elétron?
b) Numa medida de L^2 que valores podem ser obtidos e com quais probabilidades?
c) Qual a probabilidade de encontrar o elétron com $l = 1$ e $m = 1$ como função do tempo?

7) Sabendo que o elétron no átomo de hidrogênio se encontra no estado

$$\psi_{321}(r,\theta,\varphi) = \frac{4}{81\sqrt{30a^3}}\left(\frac{r}{a}\right)^2 e^{-r/3a} Y_2^1(\theta,\varphi) = -\frac{1}{\sqrt{\pi a}}\frac{r^2}{81a^3}e^{-r/3a}\sin\theta\cos\theta e^{i\varphi},$$

a) mostre que o valor esperado de r^s é

$$\langle r^s \rangle = \frac{(s+6)!}{6!}\left(\frac{3a}{2}\right)^s.$$

Qual o menor valor de s para que $\langle r^s \rangle$ seja finito?
b) Mostre que se voce pudesse de alguma maneira medir o observável $L_x^2 + L_y^2$ o único valor possível dessa medida seria $5\hbar^2$.

8) Supondo que o raio do próton seja b, e supondo que a função de onda do estado fundamental do átomo de hidrogênio valha para $r \leq b$, mostre que
a) a probabilidade de encontrar o elétron dentro do núcleo é:

$$P = 1 - \left(1 + \frac{2b}{a} + \frac{2b^2}{a^2}\right)e^{-2b/a}$$

onde a é o raio de Bohr.
b) Supondo que $2b/a << 1$ mostre que

$$P \sim \frac{1}{6}\left(\frac{2b}{a}\right)^3.$$

c) Use $b = 10^{-15}m$ e $a = 5 \times 10^{-11}m$ e o resultado do ítem b) para estimar a probabilidade de encontrar o elétron dentro do núcleo.

9) Usando o **teorema do virial** tridimensional para estados estacionários:

$$2\langle T \rangle = \langle \vec{r}.\vec{\nabla}V \rangle,$$

mostre que nos auto-estados do átomo de hidrogênio, $|\psi_{nlm}\rangle$, se obtem $2\langle T\rangle = -\langle V\rangle = -2E_n$. Com esse resultado determine $\langle 1/r\rangle$.

10) Partindo da parte radial da hamiltoniana do átomo de hidrogênio:

$$H_r = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r},$$

use o **teorema de Feynman-Hellmann**

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \left\langle \psi_n \left| \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right| \psi_n \right\rangle,$$

para mostrar que nos auto-estados do átomo de hidrogênio:

$$\text{a)}\ \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{n^2 a}, \qquad \text{b)}\ \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{1}{n^3(l+1/2)a^2},$$

onde a é o raio de Bohr:

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2}\frac{\hbar^2}{m}.$$

11) Um átomo hidrogenóide é um átomo com um único elétron, mas com Z prótons. Isso significa que o potencial ao qual o elétron está submetido é Z vezes o potencial do átomo de hidrogênio. Assim, todos os resultados obtidos para o átomo de hidrogênio valem para o átomo hidrogenóide com a substituição $e^2 \to Ze^2$. Determine as auto-energias ($E_n(Z)$), a energia de ligação ($E_1(Z)$), o raio de Bohr ($a(Z)$), e a constante de Rydberg ($R(Z)$), para o átomo hidrogenóide. Onde, no espectro eletromagnético, se situa a série de Lyman para $Z = 2$ e $Z = 3$?