

# Mecânica Quântica – Exame – 26/1/2009

Curso de Engenharia Biomédica – 2008/2009

Duração 3h

1. Escreva sempre a expressão literal final do que deseja calcular numericamente em termos das variáveis a utilizar e não dos valores numéricos destas. Justifique todas as afirmações que fizer. Seja sucinto.
2. Para quem já fez o 1º teste e quiser fazer só o 2º teste, terá que responder às perguntas IV, V, VI e VII, que valerão o dobro para esse caso e a duração será de 1h30m.

## I (2 valores)

Para cada uma das questões seguintes diga se são verdadeiras ou falsas. Justifique numa linha a sua resposta, isto é, indique a *razão* sem fazer contas.

1. As funções próprias do operador Hamiltoniano para o problema da partícula na caixa ( $V = 0$ , para  $0 < x < a$  e  $V = \infty$  para  $x > a \wedge x < 0$ ), são funções próprias simultâneas dos operadores Hamiltoniano e Paridade.
2. Se  $A$  e  $B$  forem operadores hermíticos, então  $AB$  também é um operador hermítico.
3. No oscilador harmónico, a uma dimensão, tem-se sempre

$$\langle n | x^2 | n + 4 \rangle = 0$$

4. Num poço de potencial a uma dimensão, isto é,  $V = -V_0$ ,  $-a < x < a$  e  $V = 0$ ,  $x > |a|$ , existe sempre pelo menos um estado ligado.

## II (4 valores)

Uma partícula de massa  $m$  no potencial do oscilador harmónico, no instante inicial é descrita pela função de onda

$$\psi(x, 0) = A \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \left( 1 - \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

com  $A$  real e positivo.

1. Determine  $A$ . (**Sugestão:** Antes de começar a fazer integrais use o postulado da expansão  $\psi(x, 0) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n u_n(x)$ , onde  $u_n(x)$  são as funções próprias normalizadas do oscilador harmónico dadas no formulário).
2. Qual a probabilidade duma medida da energia dar o valor  $E_2 = 5/2 \hbar\omega$ ?
3. Qual o valor médio da energia?
4. Num dado instante de tempo,  $T$ , a função de onda é dada por

$$\psi(x, T) = B \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \left( 1 + \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

onde  $B$  é uma constante complexa tal que  $|B| = A$ . Qual o valor mínimo de  $T$ ?

### III (4 valores)

Considere o potencial dado por

$$V_\delta = -\beta \frac{\hbar^2}{m} \delta(x)$$

onde a constante  $\beta > 0$  tem as dimensões dum inverso de comprimento.

1. Explique porque é que não há soluções ímpares para estados ligados, ( $E < 0$ ), neste potencial. **Sugestão:** Mostre que a única função ímpar com as condições fronteiras apropriadas é identicamente nula.
2. Determine a condição para os estados ligados neste potencial para as funções pares. Há sempre estados ligados? Em caso afirmativo quantos estados ligados há?
3. Considere agora o problema dos estados de difusão ( $E > 0$ ) neste potencial. Considere que as funções de onda são dadas por

$$\begin{cases} u(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx} & x < 0 \\ u(x) = Te^{ikx} & x > 0 \end{cases}$$

onde, como habitualmente,  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ . Determine  $R$  e  $T$  e verifique que  $|R|^2 + |T|^2 = 1$ .

4. A função  $\delta$  pode ser considerada como o limite duma função rectangular em que a largura tende para zero e a altura para infinito, desde que a área seja mantida constante e igual a 1. Use este facto e os resultados do poço finito de largura  $2a$  e profundidade  $-V_0$ :

- *Condição dos estados ligados para soluções pares.*

$$\kappa a = qa \tan(qa), \quad \text{onde} \quad \kappa^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2}, \quad q^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E|) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} - \kappa^2$$

- *Coefficientes  $R$  e  $T$*

$$R = ie^{-2ika} \frac{(q^2 - k^2) \sin(2qa)}{2kq \cos(2qa) - i(q^2 + k^2) \sin(2qa)}, \quad T = e^{-2ika} \frac{2kq}{2kq \cos(2qa) - i(q^2 + k^2) \sin(2qa)}$$

para reencontrar os resultados das alíneas anteriores. **Sugestão:** Comece por mostrar que

$$\lim_{a \rightarrow 0} (2aV_0) = \beta \frac{\hbar^2}{m},$$

e portanto quando  $a \rightarrow 0$ , temos

$$(qa)^2 \rightarrow \beta a + \mathcal{O}(a^2), \quad (ka)^2 \rightarrow k^2 a^2$$

---

### IV (2 valores)

Para cada uma das questões seguintes diga se são verdadeiras ou falsas. Justifique numa linha a sua resposta, isto é, indique a *razão* sem fazer contas.

1. Uma partícula num potencial central está num estado descrito pela expressão

$$|\psi\rangle = f(r) \left( \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 1\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} |1, 0\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} |1, -1\rangle \right)$$

onde os estados  $|l, m\rangle$  são os estados próprios de  $L^2$  e  $L_z$ . Faz-se uma medida de  $L_z$  e obtém-se 0. A probabilidade duma medida de  $L_z$ , feita **imediatamente a seguir** à medida anterior, de dar  $\hbar$  é  $2/3$ .

2. Uma partícula num potencial central está num estado descrito pela expressão

$$\psi(r, \theta, \varphi) = Ae^{-r^2/r_0^2} \sin^2 \theta \sin 2\varphi$$

A probabilidade duma medida de  $L_z$  dar  $L_z = \hbar$  é 0.

3. Os resultados duma medida do spin dum electrão segundo uma dada direcção são sempre  $\pm \frac{\hbar}{2}$ .

4. Considere um campo eléctrico aplicado  $\vec{E} = \mathcal{E}\vec{e}_z$  no átomo de hidrogénio. Sabendo que o Hamiltoniano perturbativo é  $H_1 = e\mathcal{E}z$ , então a correcção de 1ª ordem anula-se para o estado fundamental.

### V (2 valores)

Um electrão no potencial de Coulomb do átomo de hidrogénio encontra-se no estado seguinte

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R_{21}(r) [a Y_{1,1} + b Y_{1,0} + c Y_{1,-1}]$$

com as constantes  $a, b$  e  $c$  reais e positivas.

1. Qual o valor médio da energia neste estado?
2. Determine as constantes  $a, b$  e  $c$  sabendo que  $\langle L_z \rangle = 0, \langle L_x \rangle = \hbar$ .

### VI (3 valores)

A molécula de amónia,  $NH_3$ , pode ser considerada como um sistema com dois estados. A molécula forma uma pirâmide triangular com os três átomos de hidrogénio num plano e o átomo de azoto no vértice da pirâmide. Os dois estados correspondem ao átomo de azoto estar colocado acima ou abaixo do plano. Designamos por  $|1\rangle$  o estado em que o azoto está acima e  $|2\rangle$  o estado em que o azoto está abaixo. Nesta base, o Hamiltoniano é dado por

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -A \\ -A & E_0 \end{pmatrix}$$

com  $A > 0$ .

1. Encontre os valores próprios,  $E_I, E_{II}$  e os vectores próprios,  $|I\rangle, |II\rangle$ , do Hamiltoniano nesta base.
2. No instante  $t = 0$  a molécula de azoto encontra-se no estado  $|1\rangle$ , isto é o átomo de azoto em cima do plano. Qual a probabilidade de encontrar o sistema no estado  $|2\rangle$  no instante  $t$ ?
3. Verifique que o sistema oscila entre os dois estados. Determine o período de oscilação. Sabendo que a frequência medida experimentalmente é  $\nu = 24$  GHz determine a constante  $A$  em eV.

### VII (3 valores)

O Hamiltoniano para um electrão num campo  $\vec{B}$  é dado por

$$H = -\vec{M} \cdot \vec{B} = \frac{e}{m} \vec{S} \cdot \vec{B} = \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$$

onde  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$  é o magnetão de Bohr. Considere

$$B = B_0 \vec{e}_z + B_0 \eta \vec{e}_x$$

com  $\eta \ll 1$ .

1. Mostre que os valores próprios exactos da energia são,  $E_{1,2} = \mp \mu_B B_0 \sqrt{1 + \eta^2}$ .
2. Escreva  $H = H_0 + H_1$  e considere  $H_1 = \eta \mu_B B_0 \sigma_x$  como uma perturbação ao Hamiltoniano não perturbado,  $H_0 = \mu_B B_0 \sigma_z$ . Use teoria de perturbações, até à 2ª ordem em  $\eta$ , para calcular as correcções aos dois níveis de energia do Hamiltoniano não perturbado  $H_0$ .
3. Compare os resultados aproximados com os resultados exactos.