

Mecânica Quântica – Série 8

Curso de Engenharia Biomédica – 2008/2009

(Versão de 31 de Outubro de 2008)

* 8.1 Gasirowicz 8.1

8.2 Este problema destina-se a ganhar intuição com as funções radiais do átomo de Hidrogénio. Estas funções, correctamente normalizadas, são dadas por (por simplicidade fizémos $Z = 1$, o caso $Z > 1$ pode ser facilmente obtido fazendo $a_0 \rightarrow a_0/Z$),

$$R_{nl}(r) = \left(\frac{2}{na_0}\right)^{3/2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]}} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}(2r/na_0) e^{-r/na_0}$$

onde

$$a_0 = \frac{\hbar}{\mu c \alpha}$$

é o raio de Bohr, e os polinómios associados de Laguerre são definidos por

$$L_n^\alpha(\rho) = \sum_{k=0}^n \binom{n+\alpha}{n-k} \frac{(-\rho)^k}{k!}$$

a) Use estas definições para encontrar as funções R_{10} , R_{20} e R_{21} . Compare os resultados com o livro e com o **Mathematica** que tem o comando `LaguerreL[n,m,r]`. Para isso use a seguinte função no **Mathematica**

$$R = \text{Function}[\{n,l,r\}, (2/(n a_0))^{3/2} \text{Sqrt}[(n-l-1)!/(2 n)/((n+l)!)] \\ (2 r/(n a_0))^{l-1} \text{LaguerreL}[n-l-1, 2 l+1, 2 r/(n a_0)] E^{-r/(n a_0)}]$$

b) Use o **Mathematica** para fazer gráficos das funções R_{10} , R_{20} e R_{21} e das respectivas distribuições de probabilidade radiais definidas por

$$P_{nl}(r) = r^2 R_{nl}^2(r)$$

Observe os máximos e nodos. Experimente para outros valores de $n > 2$.

c) Usando o **Mathematica** verifique que as funções estão normalizadas, isto é,

$$\int_0^\infty dr r^2 [R_{nl}(r)]^2 = 1$$

d) Usando o **Mathematica** verifique que as funções são ortogonais para $n \neq n'$ e $l = l'$ mas em geral não são ortogonais para $n = n'$ e $l \neq l'$, isto é,

$$\int_0^\infty dr r^2 R_{nl}(r) R_{n'l}(r) = \delta_{nn'} \quad \text{mas} \quad \int_0^\infty dr r^2 R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) \neq 0 \quad l \neq l'.$$

Explique como é possível este resultado.

* 8.3 Gasirowicz 8.6

8.4 Veja no site do livro, nos suplementos para o capítulo 8, a demonstração do teorema seguinte, devido a Pauli:

Seja um sistema do qual conhecemos as funções de onda e os valores próprios do Hamiltoniano. Considere que esses valores próprios dependem dum parâmetro α (uma massa, uma constante, enfim, qualquer parâmetro). Então a equação aos valores próprios escreve-se

$$H(\alpha)u_n(\vec{r}) = E_n(\alpha)u_n(\vec{r})$$

e

$$\frac{\partial E_n}{\partial \alpha} = \left\langle \frac{\partial H(\alpha)}{\partial \alpha} \right\rangle$$

Use este resultado para mostrar que

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nl} = \frac{Z}{a_0 n^2}$$

* 8.5 Gasiorowicz 8.9

* 8.6 Gasiorowicz 8.10

* 8.7 Gasiorowicz 8.11

8.8 Os estados próprios do átomo de hidrogénio apresentam um elevado grau de degenerescência. Em mecânica quântica, isto quer normalmente dizer que haverá outro operador que comuta com o conjunto completo de operadores já considerado. No átomo de hidrogénio deverá assim existir um operador escondido que comute com H . Esse operador é o *vector de Laplace-Runge-Lenz* ou *vector de Runge-Lenz* que aparece para problemas com potenciais centrais cuja força varie com o inverso do quadrado da distância. Vamos aqui começar por explicar o seu papel em física clássica, no problema de Kepler, e depois em mecânica quântica, no átomo de hidrogénio. Para bibliografia sobre este assunto consulte os *links* indicados na página alternativa da disciplina. Vamos considerar então que temos um potencial central da forma

$$V(r) = -\frac{\hat{\alpha}}{r}$$

sendo, para o problema de Kepler, $\hat{\alpha} = G_N M m$, e para o átomo de hidrogénio, $\hat{\alpha} = \alpha \hbar c$.

a) Classicamente, para o problema de Kepler, o vector de Runge-Lenz é definido por

$$\vec{A} = \frac{1}{m\hat{\alpha}} \vec{p} \times \vec{L} - \frac{\vec{r}}{r}$$

Verifique que é adimensional. Mostre que é conservado, isto é,

$$\frac{d\vec{A}}{dt} = 0$$

b) Mostre que a direcção constante de \vec{A} , é a do periélio da órbita conforme indicado na Fig. 1

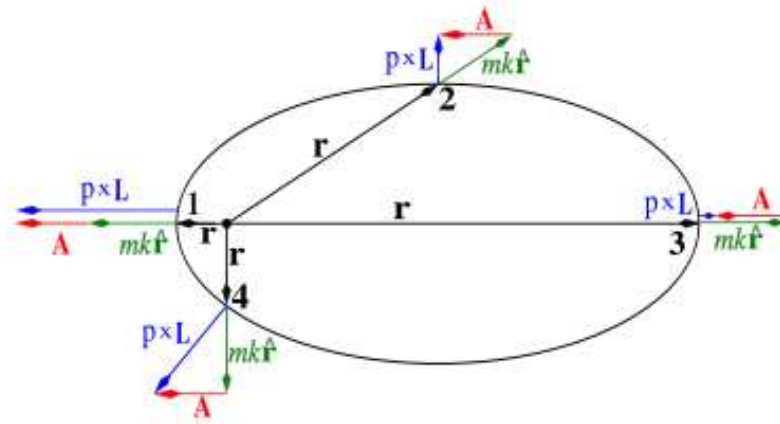


Figura 1: Vector Runge-Lenz. Nesta figura, tirada da Wikipedia, $k = \hat{\alpha}$.

e que a excentricidade da órbita é dada por

$$e = \frac{|\vec{A}|}{m\hat{\alpha}}$$

c) Verifique explicitamente que o vector \vec{A} se anula para uma órbita circular ($e = 0$).

d) Em mecânica quântica é preciso redefinir \vec{A} pois \vec{p} e \vec{L} não comutam. A definição correcta é

$$\vec{A} = \frac{1}{2m\hat{\alpha}} \left(\vec{p} \times \vec{L} - \vec{L} \times \vec{p} \right) - \frac{\vec{r}}{r} \quad (1)$$

Verifique que esta definição coincide com a definição anterior no limite clássico.

e) Use a Eq. (1) para mostrar que

$$[H, \vec{A}] = 0.$$

f) Mostre que

$$[L_i, A_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}A_k, \quad [A_i, A_j] = \frac{\hbar}{i} \frac{2}{m\hat{\alpha}^2} H \epsilon_{ijk}L_k.$$

e

$$\vec{L} \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot \vec{L} = 0, \quad (A^2 - 1) = \frac{2}{m\hat{\alpha}^2} H (L^2 + \hbar^2)$$

Verifique que $[L^2, \vec{A}] \neq 0$ e que portanto encontrar o conjunto completo de operadores que comuta com H é menos óbvio. Veja a referência *M. Bander, C. Itzykson, Rev. Mod. Physics* **38**, (1966), 330, para uma discussão mais aprofundada.

g) Estude a Secção IIA da referência da alínea anterior. Verifique que as relações de comutação anteriores podem ser usadas para encontrar a quantização das energias do átomo de hidrogénio, sem nunca referir as funções de onda. Isto foi feito por Pauli ainda antes da descoberta da equação de Schrödinger!