

Mecânica Quântica – Série 8 – Soluções

Curso de Engenharia Física Tecnológica – 2014/2015

(Versão de 10 de Novembro de 2014)

*** 8.1 Resposta:**

$$\psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = u_{n_1}(x)u_{n_2}(y)u_{n_3}(z), \quad E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)$$

onde

$$u_{n_i} = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n_i \pi x}{a}\right)$$

8.2 a), b), c) Resposta no enunciado.

d) Não há nenhuma contradição com o facto de

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

De facto, as funções de onda $\psi_{nlm}(\vec{r})$ e $\psi_{n'l'm'}(\vec{r})$ são ortogonais devido à ortogonalidade das harmónicas esféricas. A ortogonalidade dos $R_{nl}(r)$, só é necessária para valores de n diferentes.

*** 8.3 Resposta:**

$$\lambda_H = 121.7 \text{ nm}, \quad \lambda_D \simeq \lambda_H = 121.7 \text{ nm}, \quad \lambda_P = 243.3 \text{ nm},$$

8.4 Resposta no enunciado.

*** 8.5 Resposta no enunciado.**

*** 8.6 Resposta:**

$$\text{a) } \langle H \rangle = E_1 \times \frac{7}{12} = -7.93 \text{ eV}, \quad \text{d) } \langle L^2 \rangle = \frac{10}{9} \hbar^2, \quad \text{c) } \langle L_z \rangle = -\frac{\hbar}{36}.$$

*** 8.7 Resposta:**

$$\text{Probabilidade} = |C|^2$$

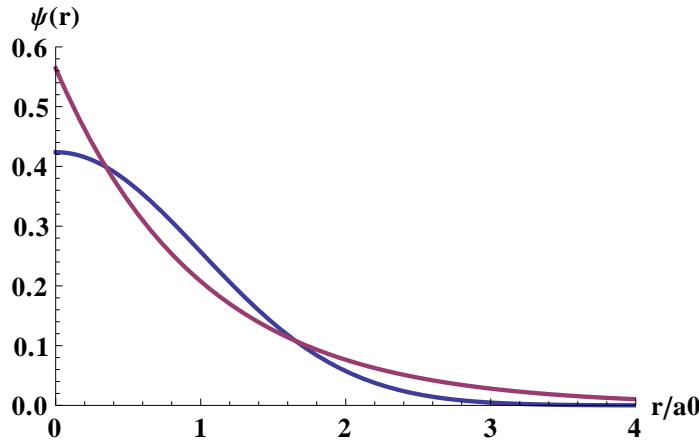
onde

$$\begin{aligned} C &= \int_0^\infty dr 4\pi r^2 R_{10}(r) Y_{00}^* \psi(\vec{r}) \\ &= \frac{8\sqrt{2}}{\pi^{1/4}} \left(\frac{1}{\alpha a_0}\right)^{3/2} e^{y_0^2} \left[\frac{1}{2} y_0 e^{-y_0^2} + \frac{\sqrt{\pi}}{4} \text{Erfc}(y_0) - y_0 e^{-y_0^2} + y_0^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \text{Erfc}(y_0) \right] \end{aligned}$$

onde

$$y_0 = \frac{1}{a_0 \alpha \sqrt{2}}, \quad \text{Erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^\infty dy e^{-y^2}$$

Para $\alpha = 1/a_0$ vem $|C|^2 = 0.875$. Para estes valores obtemos o gráfico seguinte,



Use o programa de *Mathematica* para ver outros valores de α .

8.8 Resposta no enunciado.

Comentário às alíneas f) e g):

Se redefinirmos o vector de *Runge-Lenz* para ter as dimensões do momento angular

$$D_i = \sqrt{\frac{-2E}{m\hat{\alpha}^2}} A_i$$

o que é válido para estados com $E < 0$, obtemos

$$[L_i, L_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k, \quad [L_i, D_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}D_k, \quad [D_i, D_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}L_k.$$

A partir destes vectores podemos definir os vectores

$$\vec{J}_1 = \frac{1}{2}(\vec{L} + \vec{D}), \quad \vec{J}_2 = \frac{1}{2}(\vec{L} - \vec{D})$$

que obedecem às relações de comutação

$$[J_{1i}, J_{1j}] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_{1k}, \quad [J_{2i}, J_{2j}] = i\hbar\epsilon_{ijk}J_{2k}, \quad [J_{1i}, J_{2j}] = 0$$

Portanto o conjunto de operadores H , J_1^2 , J_{1z} , J_2^2 e J_{2z} formam um conjunto de operadores que comutam para o átomo de hidrogénio. Além disso $\vec{L} \cdot \vec{A} = \vec{A} \cdot \vec{L} = 0$ implica que $J_1^2 = J_2^2$ e que portanto os seus valores próprios, $\hbar^2 j_1(j_1 + 1)$ e $\hbar^2 j_2(j_2 + 1)$ são iguais, isto é, $j_1 = j_2$. Além disso os valores próprios de J_{1z} e J_{2z} são

$$-j_1 \leq m_1 \leq j_1, \quad -j_2 \leq m_2 \leq j_2,$$

num total de $2j_1 + 1$ valores para J_{1z} e $2j_1 + 1 = 2j_2 + 1$ valores para J_{2z} . Como \vec{J}_i não representam momentos angulares orbitais, os valores possíveis para j_1, j_2 são

$$j_1 = j_2 = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$$

já que a única restrição é ser $2j_1 + 1$ inteiro. Usando as definições de \vec{J}_i e as expressões dadas no enunciado podemos escrever (para o átomo de hidrogénio $\hat{\alpha} = \hbar c \alpha$)

$$H = -\frac{1}{2} \frac{m c^2 \hbar^2 \alpha^2}{2 J_1^2 + 2 J_2^2 + \hbar^2}$$

Os estados próprios de H , J_1^2 , J_{1z} , J_2^2 serão então representados por $|j_1 = j_2, m_1, m_2\rangle$ e portanto obtemos

$$H |j_1 = j_2, m_1, m_2\rangle = -\frac{1}{2} \frac{m c^2 \alpha^2}{2 j_1(j_1 + 1) + 2 j_2(j_2 + 1) + 1} |j_1 = j_2, m_1, m_2\rangle$$

e usando $j_1 = j_2$ obtemos finalmente

$$E = -\frac{1}{2} \frac{m c^2 \alpha^2}{(2 j_1 + 1)^2} = -\frac{1}{2} \frac{m c^2 \alpha^2}{n^2}$$

onde definimos o número quântico principal

$$n = 2 j_1 + 1, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Encontrámos assim os níveis de energia do átomo de hidrogénio sem ter que resolver qualquer equação, tal como Pauli fez antes da equação de Schrödinger!

Estamos agora em posição de compreender a degenerescência dos níveis de energia do átomo de hidrogénio. De facto para cada valor de $j_1 = j_2$, há $2 j_1 + 1$ valores possíveis para m_1 e também $2 j_2 + 1$ valores para m_2 . Assim a degenerescência total é

$$d(n) = (2 j_1 + 1)(2 j_2 + 1) = (2 j_1 + 1)^2 = n^2$$

como tínhamos visto na aula!

*** 8.9 Resposta:**

a) $\langle r^k \rangle_{10} = \frac{a_0^k}{2^{k+1}} (k + 2)!$ para $k \geq -2$, b) $\langle x \rangle_{10} = 0$, $\langle x^2 \rangle = a_0^2$,

c) $\langle x \rangle_{211} = 0$, $\langle x^2 \rangle_{211} = 12 a_0^2$, d) O máximo ocorre para $r = a_0$.