Universidade Federal de Pelotas
IFM – Departamento de Física
Mecânica Quântica I – UNIDADE II – Lista de Problemas

1. Resolver as questões e problemas do capítulo 7 do Eisberg e Resnick.
2. Uma partícula é confinada a uma caixa tridimensional de lados $l_x = a$, $l_y = 2l_x$ e $l_z = 3l_x$. Determine os números quânticos n_1, n_2 e n_3 para os 5 primeiros estados de menor energia da partícula.
3. Para $l = 2$, (a) qual é o menor e o maior valor possível de $L_x^2 + L_y^2$? (b) Qual é o valor de $L_x^2 + L_y^2$ para $m = 1$? É possível determinar o valor de L_x ou L_y a partir destes dados?
4. Mostre que a distância mais provável entre um elétron e o núcleo no estado $n = 2, l = 1$ do hidrogênio é $r = 4a_0$.
5. Considere uma partícula de massa m em uma caixa circular bidimensional de raio R com paredes perfeitamente rígidas. O potencial é então $V(r,\theta) = 0, r < R; V(r,\theta) = \infty, r \geqslant R$. (a) Obtenha a equação de Schröedinger bidimensional independente do tempo em coordenadas polares (r,θ). Qual é a condição de contorno sobre a autofunção? Dica: o Laplaciano em coordenadas polares é

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \theta^2}$$

(b) Use o método de separação de variáveis para obter equações independentes para r e θ. (c) Resolva a equação em θ. Use a condição de univocidade. Normalize a solução. Dica: o elemento de área em coordenadas polares é $dA = rdrd\theta$. (d) Faça uma transformação de variáveis $\rho = \kappa r$, onde $\kappa = \sqrt{2mE}/\hbar$ na equação radial e encontre uma equação para $R(\rho)$. (e) Se você conseguir identificar a equação do item anterior com uma equação de uma função especial conhecida, escreva-a e aplique as condições de contorno. Escreva a solução particular e a condição de normalização. Explique como calculamos os níveis de energia neste caso.
6. Considere um átomo de hidrogênio descrito pela seguinte função de onda (superposição linear de autoestados):

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \sqrt{\frac{2}{3}}\psi_{100}(\mathbf{r})e^{-iE_1t/\hbar} + \sqrt{\frac{1}{3}}\psi_{211}(\mathbf{r})e^{-iE_2t/\hbar}$$

(a) Qual é a probabilidade que medidas nesse estado apresentem como resultados $E = E_2$, $L^2 = 2\hbar^2$ e $L_z = \hbar$? (b) Qual é o valor esperado de E, de L^2 e de L_z?
7. Uma partícula de massa *m* está sob ação de um potencial "fio infinito",

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} V_0 & , \quad \rho \leqslant a, \\ 0 & , \quad \rho > 0, \end{cases} \quad \forall z$$

onde $\rho^2 = x^2 + y^2$. A partir da equação de Schrödinger independente do tempo e do laplaciano em coordenadas cilíndricas,

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial \rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial \rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

encontre as equações nas variáveis ρ, φ e z pelo método de separação de variáveis. Escreva as condições de contorno e resolva para φ e z. Usando a substituição $R(\rho) = u(\rho)/\rho$ reescreva a equação em ρ.
8. O momento de inércia de um CD é aproximadamente $3{,}0 \times 10^{-5}\,\mathrm{kg\cdot m^2}$. (a) Determine o momento angular $L = I\omega$ quando o disco está girando com uma velocidade angular de $\omega/2\pi = 735\,\mathrm{rpm}$. (b) determine o valor aproximado do número quântico l.
9. O elétron do átomo de hidrogênio está no estado fundamental. Determine: (a) a probabilidade de que o elétron esteja no interior do próton ($r \sim 10^{-15}$ m). (b) a distância mais provável entre o elétron e o próton. (c) os valores médios $\langle r\rangle$, $\langle r^2\rangle$, $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$. Dica: $x = r\sin\theta\cos\phi$.
10. Dado os operadores de momento angular,

$$\hat{L}_x = i\hbar\left[\sin\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\cos\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right], \quad (1)$$

$$\hat{L}_y = i\hbar\left[-\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta\sin\phi\frac{\partial}{\partial\phi}\right], \quad (2)$$

$$\hat{L}_z = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\phi}, \quad (3)$$

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right], \quad (4)$$

verifique por cálculo direto quais obedecem uma equação de autovalores para o estado $n = 2$, $l = 1$ e $m = 1$ do átomo de hidrogênio.
11. A energia potencial de um oscilador harmônico anisiotrópico (frequências de oscilações diferentes em cada direção espacial) com simetria cilíndrica é dada por

$$V(x,y,z) = \frac{1}{2}\mu\left[\omega_a^2(x^2+y^2) + \omega_b^2 z^2\right] \quad (5)$$

com $\omega_a < \omega_b < 2\omega_a$. Use coordenadas cartesianas para determinar os autovalores de energia e as degenerescências dos três menores autoestados de energia resolvendo a equação de Schröedinger independente do tempo.
12. Calcule as autofunções e os autovalores de energia de um poço bidimensional infinito,

$$V(x,y) = \begin{cases} 0 & , 0 \le x \le a \text{ e } 0 \le y \le b \\ \infty & , \text{resto} \end{cases},$$

em termos de números quânticos apropriados. Há degenerescência nos autovalores de energia?
13. Para o estado $n = 2$, $l = 1$ e $m_l = 0$ do átomo de hidrogênio, calcule, para $r = 2a_0$, ψ, ψ^2, $|\psi|^2$ e $P_{nl}(r)\,dr$ em termos de a_0 e θ. Interprete os resultados.
14. Para $l = 4$, (a) faça um diagrama vetorial para o momento angular **L**; (b) qual é o menor e o maior valor possível de $L_x^2 + L_y^2$? (c) qual é o valor de $L_x^2 + L_y^2$ para $m = 2$? (d) é possível determinar o valor de L_x ou L_y ? Explique.
15. Dada a seguinte autofunção,

$$\psi(x,y,z) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\exp\left[-\frac{1}{a}\sqrt{x^2+y^2+z^2}\right],$$

aonde a é uma constante, mostre se ela obedece ou não uma equação de autovalores para os operadores de momento linear e angular, encontrando os autovalores correspondentes, se for o caso. Lembrete:

$$\hat{L}_x = \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \, \hat{L}_y = \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z, \, \hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$$

16. Uma partícula de massa *M* está em um potencial caixa cilíndrica,

$$V(\rho) = \begin{cases} 0 & , \quad \rho \leqslant a, \; -a/2 \leqslant z \leqslant a/2 \\ \infty & , \quad \rho > 0, z < -a/2, z > a/2. \end{cases}$$

A partir da equação de Schrödinger independente do tempo e do laplaciano em coordenadas cilíndricas,

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right) + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

encontre as equações nas variáveis ρ, φ e z. Escreva as condições de contorno e resolva para φ e z. Usando a substituição $R(\rho) = u(\rho)/\rho$ reescreva a equação em termos de ρ. Qual função especial é solução desta equação?

17. Desenhe um diagrama vetorial em três dimensões que mostre as possíveis orientações do vetor momento angular **L** para (a) $l = 1$, (b) $l = 2$ e (c) $l = 4$.

18. Uma partícula de massa m está localizada em um poço de potencial bidimensional quadrado com paredes impenetráveis. Calcule: (a) os valores permitidos de energia se os lados do poço são l_1 e l_2 e (b) os valores de energia dos quatro primeiros níveis se o poço for um quadrado de lado l.

19. Calcule a posição em que a densidade radial de probabilidade é máxima para o estado $n = 2$, $l = 1$ do átomo de hidrogênio. Calcule o valor esperado da coordenada radial neste estado. Interprete o significado físico da diferença nas respostas dos item anteriores.

20. Encontre os quatro primeiros autoestados de energia e suas correspondentes autofunções normalizadas para o potencial caixa quadrada bidimensional de lado *a*.

21. Dado um valor fixo de l (igual a 3, 4 e 5) para um átomo de hidrogênio, determine os valores possíveis p/ n e m_l. Quais são os menores valores de energia nos três casos anteriores?

22. A partir da equação de Schrödinger radial em coordenadas esféricas,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r)\right] R_{nl}(r) = ER_{nl}(r),$$

encontre a autofunção para o estado fundamental do potencial,

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & , \quad a < r < b \\ \infty & , \quad \text{resto} \end{cases},$$

usando

$$R(r) = \frac{u(r)}{r}, \, k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

23. A função de onda normalizada para um rotor rígido tridimensional é dada por

$$\psi(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}(-\sin\theta\cos\phi + i\cos\theta)$$

Mostre que ela é autofunção de

$$\hat{L}_y = \frac{\hbar}{i}\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta\sin\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\right)$$

e encontre o correspondente autovalor.

24. Calcule a distância mais provável entre um elétron e o núcleo no estado $n = 2, l = 1$ do hidrogênio.