Mecânica Quântica I

LEFT, 3º ano 2021-2022
Filipe Joaquim, Bernardo Gonçalves, João Penedo

Série 1 - Origens da Mecânica Quântica, função de onda, equação de Schrödinger

NOTA: Os problemas 1.1-1.9 focam-se em aspetos que provavelmente já foram abordados noutras UCs e que não serão avaliados na UC de MQI. Convém, no entanto, que os resolvam.

Problema 1.1. Equivalente massa/energia (Unidades e dimensões)

Usando a relação de Einstein para a massa em repouso $E_0 = mc^2$ de um corpo de massa m, determine o valor da massa do eletrão e do protão em MeV/c^2.
Respostas: $m_e \simeq 0.511\,\text{MeV}/c^2$, $m_p \simeq 938.2\,\text{MeV}/c^2$.

Problema 1.2. Unidades de Planck (Unidades e dimensões)

Em 1899, Max Planck introduziu o que hoje se chamam as unidades de Planck. Esta hipótese baseia-se em assumir que existem essencialmente três constantes universais e fundamentais, nomeadamente a velocidade da luz c, a constante gravitacional de Newton G e a constante de Planck $h = 2\pi\hbar$. Usando análise dimensional, Planck definiu aquilo que ele pensou poderem ser as unidades fundamentais de massa, comprimento, energia e tempo (m_P, ℓ_P, E_P e t_P, respetivamente). Determine em função de c, G e $\hbar$ as expressões para estas unidades fundamentais, e os seus valores no sistema de unidades SI.

Respostas: $M_P = \sqrt{\hbar c/G} = 2.176434 \times 10^{-8}$ kg, $\ell_P = \sqrt{\hbar G/c^3} = 1.616255 \times 10^{-35}$ m, $E_P = \sqrt{\hbar c^5/G} = 1.95608 \times 10^{9}$ J, $t_P = \sqrt{\hbar G/c^5} = 5.39125 \times 10^{-44}$ s.

Problema 1.3. Criação de pares (Propriedades ondulatórias da matéria)

Na presença de um núcleo, a energia de um fotão γ pode ser convertida num par eletrão-positrão (o positrão é a anti-partícula do eletrão. Estas duas partículas têm a mesma massa e carga oposta).

i) Determine a energia mínima do fotão em MeV para que esta *criação de par* ocorra.

ii) Qual a frequência de um fotão correspondente à energia calculada em i).

Respostas: i) 1.022 MeV ii) $\nu = 2.47 \times 10^{20}$ Hz.

Problema 1.4. Laser He-Ne (Propriedades ondulatórias da matéria)

Um laser He-Ne emite radiação com um comoprimento de onda $\lambda = 633$ nm. Quantos fotões são emitidos por segundo por um laser de potêcnia igual a 1 mW.

Resposta: 3.19×10^{15}

Problema 1.5. Coeficientes de Einstein (Radiação de Planck)

Em 1916, Einstein propôs que a radiação electromagnética pode ser absorvida/emitida pelos átomos segundo três processos: absorção, emissão estimulada e emissão espontânea – pode ver o artigo original de Einstein aqui). Estes fenómenos foram mais tarde entendidos de uma forma rigorosa quando Dirac procedeu à quantização do campo electromagnético em 1927 (pode ver o artigo original de Dirac aqui). No entanto, recorrendo a argumentos de termodinâmica e usando os resultados de Planck sobre a radiação, Einstein conseguiu relacionar os três processos acima referidos uma década antes de Dirac.

Pretende-se neste problema reproduzir os resultados de Einstein. Para isso, considere um conjunto de átomos com energias E_n com $n = 1, 2, 3, ...$, imersos num fundo de radiação à temperatura T. Os átomos podem sofrer as seguintes transições:

- Emissão espontânea $n \to m$ com $E_n > E_m$
- Emissão estimulada $n \to m$ com $E_n > E_m$
- Absorção $m \to n$ com $E_n > E_m$

Considere que a densidade de radiação com uma certa frequência ν é dada pela lei de Planck $\rho(\nu) = \frac{8\pi}{c^3}\frac{h\nu^3}{e^{h\nu/k_BT}-1}$, onde $h\nu = E_n - E_m$. O número de átomos nos estados n e m é dado por N_n e N_m, respetivamente. Em equilíbrio à temperatura T, as probabilidades de emissão e absorção por unidade de tempo são dadas por:

$$\begin{aligned}&\text{Emissão:}\quad P_{mn} = B_{mn}\rho(\nu) + A_{mn}\\ &\text{Absorção:}\ P_{nm} = B_{nm}\rho(\nu)\end{aligned}$$

onde B_{mn}, A_{mn} e B_{nm} são, respetivamente, os coeficientes de Einstein para emissão estumulada, emissão espontânea, e absorção.

i) Tendo em conta o que aprendeu sobre os processos de emissão e absorção, analise as expressões de P_{mn} e P_{nm} e verifique que fazem, de facto, sentido.

ii) Usando as equações acima e a expressão de $\rho(\nu)$ mostre que $B_{mn} = B_{nm}$ e $A_{mn} = \frac{8\pi}{c^3}h\nu^3 B_{mn}$. Tenha em conta que, em equilibrio térmico, a taxa de ocupação relativa de dois estados é $N_m/N_n = e^{(E_n-E_m)/k_BT}$ (N_j é o número de átomos no estado j) e que as transições $n \to m$ balançam as $m \to n$.

Problema 1.6. Estimativa da constante de Planck (Efeito fotoelétrico)

Quando dois feixes de radiação UV com comprimentos de onda $\lambda_1 = 80$ nm e $\lambda_2 = 110$ nm incidem sobre uma superfície de chumbo são emitidos fotoeletrões com energia máxima $K_1 = 11.390$ eV e K_2 =7.154 eV, respetivamente.

i) Estime o valor da constante de Planck h, e apresente o resultado em Js e MeVs.

ii) Determine a função trabalho W do chumbo, e a respetiva frequência de corte.

Respostas: i) $h = 6.627 \times 10^{-34}$ Js **ii)** 10^{15} Hz .

Problema 1.7. Fotocélulas (Efeito fotoelétrico)

As funções trabalho do Bário e do Tungsténio são, respetivamente, 2.5 eV e 4.2 eV. Verifique se estes materiais são apropriados para a construção de fotocélulas capazes de detetar luz visível ($\lambda = 4000 - 7000$ Å)

Respostas: O intervalo de comprimentos de onda $\lambda = 4000 - 7000$ Å corresponde ao intervalo de energias a energias $E = 3.106 - 1.77$ eV . Logo, o Tungsténio não pode ser usado.

Problema 1.8. Comprimentos de onda de De Broglie (Propriedades ondulatórias da matéria)

Determine o comprimento de onda de De Broglie para:

i) um protão com energia cinética igual a 70 MeV.

ii) uma bala de 100 g que se move a uma velocidade de 900 m/s.

Respostas: i) 3.4×10^{-15} m, ii) 7.4×10^{-36} m.

Problema 1.9. Difração de neutrões (Propriedades ondulatórias da matéria)

A estrutura de cristais pode ser estudada recorrendo à difração de neutrões. Usando a lei de Bragg $n\lambda = 2d\sin\theta$, onde λ é o comprimentos de onda dos neutrões, d é a distância entre os planos atómicos do cristal, θ é o ângulo de incidência e n é um número inteiro:

i) Estime um valor apropriado para a velocidade dos neutrões para que se observe difração (considere que distância inter-atómica nos cristais é da ordem de 0.2 nm).

ii) Determine a energia cinética dos neutrões em MeV para a velocidade determinada em i).

iii) Se pretender usar para esta experiência neutrões provenientes de um gás de neutrões a uma temperatura T, estime o valor de T nas condições da alínea anterior.

Respostas: i) $v = 2.0$ km/s **ii)** 20.5 meV **iii)** $T = 237.7$ K.

Problema 1.10. Uma experiência de dupla fenda (Propriedades ondulatórias da matéria)

Numa experiência de dupla fenda onde se usam eletrões monoenergéticos, são colocados detetores ao longo de um ecran vertical paralelo ao eixo dos yy de modo a observar o padrão de difração dos eletrões. Quando apenas uma fenda está aberta a amplitude dos eletrões é $\psi_1(y,t) = Ae^{-i(ky-\omega t)}/\sqrt{1+y^2}$, e quando só a outra está aberta tem-se $\psi_2(y,t) = Ae^{-i(ky+\pi y-\omega t)}/\sqrt{1+y^2}$. Determine a intensidade detetada no ecran quando:

i) ambas as fendas estão abertas e é utilizada uma fonte de luz junto às fendas para determinar por que fenda passam os eletrões.

ii) ambas as fendas estão abertas e não se pretende saber por que fenda passam os eletrões – expresse o resultado em função de A.

Respostas: i) $I(y) = \dfrac{2}{\pi(1+y^2)}$ **ii)** $I(y) = \dfrac{4|A|^2}{(1+y^2)}\cos^2(\pi y/2)$.

Problema 1.11. Energias e raios de Bohr (Modelo de Bohr para o átomo de H)

Em 1913, Bohr propôs um modelo para o átomo de Hidrogénio onde o eletrão realiza órbitas circulares em torno do protão sob efeito da interação de Coulomb. Estas órbitas seriam tais que o momento angular orbital do eletrão é quantizado de tal modo que $L = n\hbar$. Estas orbitas estacionárias seriam as únicas segundo as quais os eletrões se poderiam mover em torno do protão. Dadas estas hipóteses, e considerando a massa do protão como sendo infinitamente grande de tal modo que se possa considerar em repouso em relação ao centro de massa do sistema eletrão-protão, mostre que:

i) Os raios das órbitas de Bohr são dados por $r_n = \left(\dfrac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2}\right)n^2 \equiv n^2 a_0$, onde $a_0 = 0.053$ nm é o chamado raio de Bohr.

ii) A velocidade do eletrão quando se move na órbita de raio r_n é $v_n = \left(\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)\dfrac{1}{n\hbar}$. Use este resultado para mostrar que a constante de estrutura fina $\alpha = \dfrac{1}{4\pi\varepsilon_0}\dfrac{e^2}{\hbar c} = v_1/c = 1/137$.

iii) Mostre que $r_n = \dfrac{\hbar n^2}{\alpha m_e c} = \dfrac{\lambda_e n^2}{2\pi\alpha}$, onde $\lambda_e = \dfrac{h}{m_e c}$ é o comprimento de onda de Compton.

iv) A energia do eletrão quando se move na órbita de raio r_n é $E_n = -\dfrac{\mathcal{R}}{n^2} = -m_e c^2\alpha^2\dfrac{1}{2n^2}$ onde $\mathcal{R}$ é a constante de Rydberg dada por $\mathcal{R} = \dfrac{m_e}{2\hbar^2}\left(\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right)^2 \simeq 13.6$ eV.

v) A condição de quantização de Bohr em termos do comprimento de onda do eletrão λ corresponde a $2\pi r = n\lambda$.

vi) Quando se considera a massa do protão m_p finita, tem-se $r_n = \left(1 + \dfrac{m_e}{m_p}\right)a_0 n^2$ e $E_n = -\dfrac{1}{1+m_e/m_p}\dfrac{\mathcal{R}}{n^2}$.

vii) O resultado da alínea anterior quando generalizado para o caso de um átomo hidrogenóide de número atómico Z e número de massa A fica $r_n = \left(1+\dfrac{m_e}{M}\right)\dfrac{a_0}{Z}n^2$ e $E_n = -\dfrac{Z^2}{1+m_e/M}\dfrac{\mathcal{R}}{n^2}$ onde $M = Zm_p + (A - Z)m_n$ (m_n é a massa do neutrão).

Problema 1.12. O positrónio (Modelo de Bohr para o átomo de H)

O positrónio é um estado ligado de um electrão (e^-) e um positrão (e^+), a anti-partícula do e^-. Na prática, pode ser considerado como sendo um átomo hidrogenóide onde o protão é substítuido por um e^+. Tendo em conta que $m_{e^+} = m_e$, e tendo apenas em conta a interação de Coulomb entre as duas partículas (use os resultados do problema anterior):

i) Determine r_n e E_n, e relacione-os com os do átomo de H.

ii) Calcule os valores de r_n e E_n para o estado fundamental do positrónio.

iii) Determine a frequência minima da radiação capaz de ionizar o positrónio quando este se encontra no primeiro estado excitado.

Respostas: i) $r_n = 2a_0 n^2 = 2r_n^H$, $E_n = -\dfrac{\mathcal{R}}{2n^2} = E_n^H/2$ **ii)** $r_1 = 0.106$ nm, $E_1 = -6.8$ eV **iii)** 4.12×10^{14} Hz .

Problema 1.13. O ião C^{5+} (Modelo de Bohr para o átomo de H)

Considere o ião C^{5+} obtido retirando 5 electrões a um átomo de carbono ($Z = 6$). Use os resultados obtidos nos problemas anteriores (pode considerar neste caso a massa do núcleo como sendo infinita?) para determinar

i) As expressões para r_n e E_n.

ii) A energia de ionização para o primeiro estado excitado.

iii) O comprimento de onda correspondente à transição $3 \to 1$.

Respostas: i) $r_n = a_0 n^2/6 = r_n^H/6$, $E_n = -\dfrac{36\mathcal{R}}{n^2} = 36E_n^H$ **ii)** 122.4 eV **iii)** 2.85 nm .

Problema 1.14. Limite clássico do átomo de Bohr (Modelo de Bohr para o átomo de H)

Considere o modelo de Bohr para o átomo de H no limite em que $n \gg 1$ e em que se consideram transições quânticas *pequenas* com $\Delta n \ll n$. Mostre que nestas condições o comportamento do eletrão se aproxima do comportamento clássico (lembre-se do que aprendeu em electrodinâmica clássica sobre a radiação emitida por uma carga que realiza um movimento circular a uma certa frequência ω). Considere agora o limite $n \gg 1$ (que deveria corresponder ao limite clássico). O que conclui sobre as energias de Bohr? O resultado faz sentido quando o compara com o caso clássico? Investigue sobre o assunto (procure em *Classical limit of Quantum Mechanics* ou *Correspondence principle*)...

Problema 1.15. O número quântico da Terra (Modelo de Bohr para o átomo de H)

Determine o número quântico da Terra na sua órbita em torno do Sol. Qual é a diferença de energia entre dois níveis de energia consecutivos. Comente.

Respostas: $n \simeq 2.5 \times 10^{74}$, $\Delta E = 1.3 \times 10^{-22}$ eV .

Problema 1.16. Potenciais r^k - Gasio 1.15 (Relação de quantização de Bohr)

Use a relação de quantização de Bohr para determinar os níveis de energia de uma partícula sujeita a um potencial do tipo $V(r) = V_0 \left(\dfrac{r}{a}\right)^k$, $k \gg 1$ onde V_0 e a são constantes (considere órbitas circulares).

Resposta: $E_n = \ \simeq \dfrac{\hbar^2}{2ma^2}$ para $k \gg 1$.

Problema 1.17. Rotor clássico - Gasio 1.16 (Relação de quantização de Bohr)

A energia de um rotor clássico é dada por $E = L^2/(2I)$ onde L é o momento angular e I o momento de inércia.

i) Aplique a relação de quantização de Bohr para determinar os níveis de energia deste rotor.

ii) Determine as frequências ν_{12} das transições $n_1 \to n_2 < n_1$.

iii) Obtenha ν_{12} no limite de $\Delta_n = n_1 - n_2 \ll n_2$ com $n_2 \gg 1$. O princípio da correspondência verifica-se? Quais as transições possíveis.

Respostas: i) $E_n = \dfrac{n^2\hbar^2}{2I}$ **ii)** $\nu_{12} = \dfrac{\hbar}{4\pi I}(n_1^2 - n_2^2)$ **iii)** $\nu_{12} \to \dfrac{\hbar n_2}{2\pi I}\Delta n = \dfrac{L}{2\pi I}\Delta n.$ **iii)** A frequência clássica de rotação do rotor é $\nu_{\rm cl} = \dfrac{L}{2\pi I}$. Logo as transições possíveis são com $\Delta n = 1$.

Problema 1.18. Regras de quantização de Wilson-Sommerfeld

As ideias que levaram à explicação de fenómenos como a radiação do corpo negro, o efeito fotoelétrico, o espectro do átomo de H e a dualidade onda-partícula são essencialmente baseadas nas relações de quantização de Planck e de Bohr $E = nh\nu$ e $L = n\hbar$, respetivamente. Estas relações não foram, no entanto, suportadas por fundamentos teóricos sólidos, pelo que após a sua formulação várias tentativas foram levadas a cabo para interpretar estes resultados de uma forma mais fundamental. Em 1916, Wilson e Sommerfeld propuseram um formalismo em que as relações de quantização de Planck e Bohr surgem como casos particulares. Em poucas palavras, Wilson e Sommerfeld colocaram a hipótese de quantizar as variáveis *ação* clássicas, i.e.

$$J_k = \oint p_k dq_k = n_k h = 2\pi n_k \hbar\,,\ (n_k = 1, 2, 3, ...)$$

para sistemas descritos por coordenadas periódicas no tempo (p_k é o momento conjugado da variável periódica q_k e o integral é tomado num período desta variável). Lembre-se do que aprendeu na Mecânica Analítica sobre estas variáveis.

NOTA: Para mais detalhes sobre as regras de quantização de Wilson-Sommerfeld pode ler as secções 4.9 e 4.10 do livro "Quantum Physics" de Eisberg e Resnick disponíveis aqui ou então o artigo original de W. Wilson disponível no separador Material Extra da webpage de MQI.

Tendo em conta o que aprendeu sobre a proposta de Wilson e Sommerfeld, determine o espetro energético (níveis de energia) dos seguintes sistemas :

i) Partícula numa caixa de paredes rigidas colocadas em $x = 0$ e $x = L > 0$. O que pode concluir sobre a relação entre λ (o comprimento de onda da partícula) e L?

ii) Oscilador harmónico simples. Represente graficamente o espaço das fases e compare com o caso clássico.

Respostas: **i)** $E_n = \dfrac{h^2 n^2}{8ma^2}$. $n\lambda = 2L$, na largura da caixa cabem multiplos de $\lambda/2$. **ii)** $E_n = n\hbar\omega$ ou $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ se pensar um pouco mais...

Problema 1.19. Evolução de um pacote de onda (Pacotes de Onda)

Considere um pacote de ondas Gaussiano com $\omega(k) = \dfrac{k^2\hbar}{2m}$. Calcule a variação relativa da largura do pacote de ondas em $\Delta t = 1$s se o pacote de ondas representar

i) um eletrão de massa $m_e = 0.9 \times 10^{-30}$ kg e a largura inicial do pacote de ondas Δx_0 for igual a 10^{-6}m e 10^{-10}m.

ii) um objeto de massa $m = 10^{-3}$ kg e e a largura inicial do pacote de ondas Δx_0 for igual a 10^{-2}m.

Interprete os resultados.

Respostas: **i)** $\Delta x(1) = 5.8 \times 10^7 \Delta x_0 \simeq 58\,\text{m}\,,\ \Delta x(1) = 5.8 \times 10^{15} \Delta x_0 = 580\,\text{km}\,.$
ii) $\Delta x(1) = \sqrt{1 + 2.8 \times 10^{-55}}\Delta x_0 \simeq \Delta x_0 = 10^{-2}$ m.

Problema 1.20. Overlap de funções de onda (Função de onda)

Considere uma partícula e duas funções de onda normalizadas $\psi_{1,2}(\vec{r})$ às quais correspodem as energias $E_1 \neq E_2$. Assuma que ψ_1 e ψ_2 se anulam, respetivamente, fora de duas regiões do espaço Ω_1 e Ω_2 que não se sobrepõem. Mostre que

i) Se a partícula estiver inicialmente em Ω_1, então permanecerá aí para sempre.

ii) Se inicialmente

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1(\vec{r}) + \psi_2(\vec{r})]$$

mostre que a densidade de probabilidade é constante no tempo.

iii) Assuma agora que Ω_1 e Ω_2 se sobrepõem parcialmente. Nas condições iniciais da alínea anterior, mostre que a densidade de probabilidade é uma função periódica no tempo.

Problema 1.21. Funções de onda periódicas (Função de onda)

Considere um um sistema com um Hamiltoniano real que em $t = 0$ e $t_1 > 0$ é descrito por uma função de onda real. Mostre que este sistema é periódico, isto é, que existe um tempo T tal que $\psi(x, t) = \psi(x, t + T)$, e que as energias são multiplos de $2\pi\hbar/T$.

Problema 1.22. Função de onda a partir de densidade de probabilidade (Função de onda)

Uma partícula encontra-se num estado descrito pela funcção de onda $\psi(x)$ a que está associada a densidade de probabilidade $\rho(x) = \dfrac{N^2}{(x^2+a^2)^2}$, onde N e a são constantes.

i) O estado da partícula pode ser unicamente determinado?

ii) É possível determinar os valores esperados $\langle p\rangle$, $\langle x\rangle$ e $\langle f(x)\rangle$ para o estado descrito pela função de onda $\psi(x)$?

Respostas: i) Não, porque $\psi(x) = e^{i\theta(x)}\sqrt{\rho(x)}$ onde $\theta(x)$ é uma função real arbitrária de x. **ii)** É possível calcular o valor médio de x ou qualquer função $f(x)$ visto $\langle f(x)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\rho(x)dx$. No caso de $\langle p\rangle$ tem-se que $\langle p\rangle \propto \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\dfrac{d\psi(x)}{dx}dx$, portanto é necessário conhecer $\theta(x)$.

Problema 1.23. Função de onda exponencial (Função de onda)

Uma partícula é descrita pela função de onda isotrópica

$$\psi(\vec{r}) = Ne^{-\alpha r}$$

onde N é um fator de normalização e α é um parâmetro real conhecido.

i) Determine N.

ii) Calcule os valores médios de $\vec{r}$, r e r^2.

iii) Determine as incertezas $(\Delta\vec{r})^2$ e $(\Delta r)^2$.

iv) Qual a probabilidade de encontrar a partícula na região $r > \Delta r$?

v) Qual é a função de onda no espaço dos momentos $\Phi(\vec{k})$.

vi) Determine $(\Delta\vec{p})^2$.

vii) Mostre que a função de onda é sempre isotrópica.

Respostas: i) $N = \sqrt{\alpha^3/\pi}$ **ii)** $\langle\vec{r}\rangle = \vec{0}\,,\ \langle r\rangle = 3/(2\alpha)\,,\ \langle r^2\rangle = 3/\alpha^2$ **iii)** $(\Delta\vec{r})^2 = 3/\alpha^2\,,\ (\Delta r)^2 = 3/(4\alpha^2)$ **iv)** $P(r > \Delta r) = (5+2\sqrt{3})e^{-\sqrt{3}}/2 \simeq 0.75$ **v)** $\Phi(\vec{k}) = \dfrac{4N}{\sqrt{2\pi}}\dfrac{1}{(\alpha^2+k^2)^2}$ **vi)** $(\Delta\vec{p})^2 = \hbar^2\alpha^2$

Problema 1.24. Função de onda exponencial quadrática (Função de onda/Eq. de Schrödinger)

Considere o movimento de uma partícula livre de massa m a uma dimensão cuja função de onda em $t = 0$ é dada por

$$\Psi(x,0) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{ik_0x-\alpha x^2/2}$$

onde α e k_0 são parâmetros reais. Determine (resolvendo todos os integrais no Mathematica):

i) A função de onda $\Phi(k,t)$ e a correspondente densidade de probabilidade no espaço dos momentos $\mathcal{P}(k)$. Qual é o momento mais provável da partícula?

ii) A função de onda $\Psi(x,t)$ para $t > 0$ e a densidade de probabilidade $\mathcal{P}(x,t)$ correspondente.

iii) $\langle x\rangle_t$ e $\langle p\rangle_t$. Mostre que obedecem às equações de movimento clássicas.

iv) $\langle x^2\rangle_t$ e $\langle p^2\rangle_t$ e as incertezas $(\Delta x)_t^2$ e $(\Delta p)_t^2$. Verifique a validade da relação da incerteza de Heisenberg.

v) Determine a incerteza na energia dada por $(\Delta E)^2 = \langle H^2\rangle - \langle H\rangle^2$.

vi) Considere a quantidade

$$\tau = \frac{(\Delta x)_t}{|d\langle x\rangle_t/dt|}\,.$$

Que dimensões tem esta quantidade e qual o seu significado físico?

Respostas: i) $\Phi(k,t) = \dfrac{1}{(\alpha\pi)^{1/4}} e^{-(k-k_0)^2/2\alpha} e^{-i\hbar k^2 t/2m}$, $\mathcal{P}(k) = |\Phi(k,t)|^2 = \dfrac{1}{(\alpha\pi)^{1/2}} e^{-(k-k_0)^2/\alpha}$, o momento mais prováevel é $\hbar k_0$ **ii)** $\Psi(x,t) = (\alpha/\pi)^{1/4} \dfrac{1}{z} \exp\left(-\dfrac{\alpha x^2}{2z} + i\dfrac{k_0 x}{2z} - i\dfrac{\hbar k_0 x^2 t}{2mz}\right)$, $z \equiv 1 + i\hbar\alpha t/m$, $\mathcal{P}(x,t) = \dfrac{1}{|z|}\sqrt{\alpha/\pi} \exp\left[-\dfrac{\alpha}{|z|^2}(x - \hbar k_0 t/m)^2\right]$, $\mathcal{P}_\infty = \sqrt{\alpha/\pi}\dfrac{m}{\hbar\alpha t} \exp(-k_0^2/\alpha)$ **iii)** $\langle x\rangle_t = \hbar k_0 t/m$, $\langle p\rangle_t = \hbar k_0$, é fácil de ver que $\langle p\rangle_t = m d\langle x\rangle_t/dt$ e $d\langle p\rangle_t/dt = 0$ **iv)** $\langle p^2\rangle_t = \hbar^2\alpha/2 + \hbar^2 k_0^2$, $\langle x^2\rangle_t = \dfrac{\hbar k_0 t}{m}^2 + \dfrac{1}{2\alpha}\left[1 + (\hbar\alpha t/m)^2\right]$, $(\Delta x)_t^2 = \dfrac{1}{2\alpha}\left[1 + (\hbar\alpha t/m)^2\right]$, $(\Delta p)_t^2 = \hbar^2\alpha/2$, $(\Delta x)_t^2(\Delta p)_t^2 = \dfrac{\hbar^2}{4}\left[1 + (\hbar\alpha t/m)^2\right] \geq \dfrac{\hbar^2}{4}$ **v)** $(\Delta E)^2 = \dfrac{\hbar^2\alpha}{8m^2}[\hbar^2\alpha + 4(\hbar k_0)^2]$ **vi)** $\tau = \dfrac{m}{\hbar k_0\sqrt{2\alpha}}\sqrt{1 + (\hbar\alpha t/m)^2}$. O significado físico é o tempo característico no qual a distribuição espacial da função de onda (ou o espalhamento do pacote de ondas) passa a ser comparável ao movimento global do seu centro. Da expressão de τ e do resultado da alínea anterior, tem-se que $\tau_0\Delta E = \dfrac{\hbar}{2}\sqrt{1 + \dfrac{\alpha}{4k_0^2}} > \dfrac{\hbar}{2}$.

Problema 1.25. Problema inverso (Função de onda/Eq. de Schrödinger)

Considere uma partícula de massa m cuja função de onda estacionária

$$\psi(x) = A\left(\frac{x}{x_0}\right)^n e^{-x/x_0}$$

onde A, x_0 e n são constantes. Use a equação de Schrödinger estacionária para determinar o potencial $V(x)$ e a energia E que corespondem a $\psi(x)$. Assuma que $V(x) \to 0$ quando $x \to \infty$.

Resposta: $E = -\dfrac{\hbar^2}{2mx_0^2}$, $V(x) = \dfrac{\hbar^2}{2m}\left[\dfrac{n(n-1)}{x^2} - \dfrac{2n}{xx_0}\right]$. Iremos ver mais à frente que o potencial efetivo para o átomo de H tem esta forma.

Problema 1.26. Potencial complexo (Função de onda/Eq. de Schrödinger)

Considere a equação de Schrödinger com um potencial complexo do tipo $V(x) = a(x) + b(x)\,i$.

i) Determine a equação da continuidade neste caso. O que pode concluir sobre o efeito de $b(x)$ quando comparado com o caso com $V(x)$ real, no que respeita à variação temporal de $\int_{-\infty}^{+\infty} P(x,t)dx$ onde $P(x,t) = |\psi(x,t)|^2$?

ii) Considere o caso em que $b(x)$ é constante. Repita a alínea anterior.

Respostas: i) $\dfrac{\partial\rho}{\partial t} + \nabla.\vec{j} = \dfrac{2}{\hbar}b(x)\rho$, $\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2$, $\vec{j}(x,t) = \dfrac{\hbar}{2im}[\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - (\vec{\nabla}\Psi)^*\Psi]$. Pode-se ver que $\dfrac{\partial}{\partial t}\int_{-\infty}^{+\infty} P(x,t)dx = \dfrac{2}{\hbar}\int_{-\infty}^{+\infty} b(x)|\Psi(x,t)|^2 dx$. Logo não se pode concluir nada sobre o sinal. Apenas se pode afirmar que $b(x)$ atua como sorvedouro ou fonte de probabilidade (absorção ou emissão de partículas?) **ii)** Neste caso se $b < 0$ ($b > 0$) o potencial atua como um(a) sorvedouro (fonte) de probabilidade.

Problema 1.27. Ondas *back and forward* (Função de onda/Eq. de Schrödinger)

Considere a função de onda

$$\Psi(x,t) = (Ae^{ikx} + Be^{-ikx})e^{i\omega t}$$

para uma partícula de massa m. Determine a corrente de probabilidade $\vec{j}$ correspondente e comente sobre o significado físico dos parâmetros A e B.

Resposta: $\vec{j} = \dfrac{\hbar k}{m}(|A|^2 - |B|^2)\vec{u}_x$. Esta corrente pode ser escrita como $\vec{j} = \vec{j}_+ + \vec{j}_-$ onde $\vec{j}_+ = \dfrac{\hbar k}{m}|A|^2\vec{u}_x$ e $\vec{j}_- = -\dfrac{\hbar k}{m}|B|^2\vec{u}_x$. Portanto, A e B podem ser vistos como a amplitude das correntes que se propagam para a frente e para trás, respetivamente.

Problema 1.28. Adicionando constantes (Função de onda/Eq. de Schrödinger)

Em mecânica clássica os valores referência de energia potencial são arbitrários. Determine o efeito de adicionar uma constante V_0 no Hamiltoniano de um sistema descrito pela equação de Schrödinger.

Resposta: A função de onda ganha uma fase, i.e. $\Psi'(x,t) = e^{-iV_0 t/\hbar}\Psi(x,t)$, e a constante V_0 é adicionada à energia do sistema.

Problema 1.29. Duas partículas foram à festa... (Eq. de Schrödinger)

Considere um sistema unidimensional de duas partículas de massas $m_{1,2}$ que interagem segundo um potencial que depende apenas da distância entre elas, isto é $V(x_1 - x_2)$.

i) Escreva o Hamiltoniano do sistema.

ii) Encontre a equação de Schrödinger em termos de $x = x_1 - x_2$ e a posição do centro de massa X.

iii) Use separação de variáveis para encontrar as equações que governam a evolução do sistema em x e X. Comente o resultado.

Respostas: i) $H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(x_1 - x_2)$ **ii)** $i\hbar\frac{\partial\Psi(x,X,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\Psi(x,X,t)}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2\Psi(x,X,t)}{\partial X^2} + V(x)\Psi(x,X,t)$, onde μ e M são a massa reduzida e a massa total do sistema, respetivamente. **iii)** Como H é independente do tempo e V depende apenas de x, podemos escrever $\Psi(x,X,t) = \xi(x)\eta(X)\phi(t)$ e mostrar que $-\frac{\hbar^2}{2M\eta(X)}\frac{\partial^2\eta(X)}{\partial X^2} = E_{\mathrm{CM}}\eta(X)$ e $-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{\partial^2\xi(x)}{\partial x^2} + V(x)\xi(x) = E_{\mathrm{Total}} - E_{\mathrm{CM}}$. A função de onda para o centro de massa comporta-se como a de uma partícula livre com mass M e energia E_{CM}, e a do movimento relativo corresponde à de uma partícula de massa μ e energia $E_{\mathrm{Total}} - E_{\mathrm{CM}}$ sujeita ao potencial $V(x)$. O resultado é análogo ao clássico.