Mecânica Quântica I – Quadrimestre 2021.1

Folha de Problemas 2

Propriedades quânticas fundamentais

Convenção: Os exercícios são classificados de acordo com os seguintes símbolos: † indica que o exercício testa conceitos discutidos nas aulas; ‡ indica que o exercício complementa a matéria dada nas aulas teóricas. São exercícios relevantes para a vossa formação, mas que não tivemos tempo de abordar nas aulas; □ indica que o exercício é avançado. Note que um exercício pode ter mais do que um símbolo.

1 Radiação do Corpo Negro[‡]

Considere uma cavidade de radiação à temperatura T. Seja $\rho_T(\nu)$ a densidade espectral de energia da radiação, i.e. a energia electromagnética por unidade de volume, no intervalo de frequência $[\nu, \nu + d\nu]$.

- (a) Mostre que a equação para as dimensões de ρ_T é $[\rho_T] = ML^{-1}T^{-1}$.
- (b) Considere a cavidade como sendo uma caixa cúbica de lado a, feita de material condutor. Considere uma onda electromagnética com vector de onda \vec{k} (comprimento de onda λ). Projecte este vector nas direcções x, y, z, e deduza uma relação entre λ e λ_x , λ_y , λ_z . Imponha para as componentes x, y, z das ondas electromagnéticas as seguintes condições:

$$n_x = \frac{2a}{\lambda_x}, \qquad n_y = \frac{2a}{\lambda_y}, \quad n_z = \frac{2a}{\lambda_z},$$
 (1)

onde $n_i \in \mathbb{N}$. Deduza então que

$$\frac{2a}{\lambda} = \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} \,. \tag{2}$$

Qual o significado das expressões nas Eqs. (1) e (2)?

(c) Considere um espaço 3D onde está definida uma rede cúbica de pontos $\vec{r}=(n_x,n_y,n_z)$. Cada um destes pontos corresponde a uma onda estacionária dentro da caixa com $\lambda_i=\frac{2a}{n_i}$ onde i=x,y,z. Comece por notar que a distância de cada um destes pontos à origem do referencial é dada por $r=\sqrt{n_x^2+n_y^2+n_z^2}$. Da alínea anterior sabemos então que todos os pontos à distância $r=\frac{2a}{\lambda}$ da origem correspondem a todas as (diferentes) ondas estacionárias (dentro da caixa condutora) com comprimento de onda $\lambda=\frac{2a}{r}$.

Comece por mostrar que a densidade de pontos numa casca esférica entre [r, r+dr] é dada por $4\pi r^2 dr$. Como na alínea anterior definimos que $n_i \in \mathbb{N}$, mostre que o número de modos de vibração com frequência entre ν e $\nu + d\nu$ é dado por

$$dN = \frac{4\pi V}{c^3} \nu^2 d\nu, \qquad (3)$$

onde $V \equiv a^3$ é o volume da cavidade/caixa.

(d) Dado que as ondas electromagnéticas têm duas polarizações independentes, e que cada grau de liberdade tem energia média K_BT , onde K_B é a constante de Boltzmann, mostre que em Física Clássica teremos que a densidade espectral de energia do corpo negro é dada por

$$\rho_T(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} K_B T. \tag{4}$$

 $^{^1}$ As ondas estacionárias dentro da caixa são essencialmente osciladores harmónicos (mesma equação do movimento). Do teorema da equipartição de energia temos que cada grau de liberdade tem uma energia média $k_BT/2$. Podemos

(e) Mostre que a expressão anterior é fisicamente absurda, para isso calculando a energia total por unidade de volume (integre sobre todas as frequências da radiação)

$$\rho_T = \int_0^\infty \rho_T(\nu) d\nu \,. \tag{5}$$

A divergência ocorre para altas ou baixas frequências?

(f) Max Planck notou que a expressão

$$\rho_T(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \frac{h\nu}{e^{h\nu/K_B T} - 1},$$
(6)

não só não diverge quando $\nu \to \infty$, como também descreve perfeitamente as observações experimentais se fixarmos a constante h em $h = 6.626 \times 10^{-34}$ J.s. Mostre que se assumirmos que a energia dos modos de vibração dentro da cavidade/caixa está discretizada (como $E_n = nh\nu$ onde $n \in \mathbb{N}_0$), então obtemos o resultado da Eq. (6).

- (g) Mostre que a densidade de energia à temperatura T tem um máximo para um comprimento de onda $\lambda_{max} = C/T$ (lei experimental de Wien) e exprima a constante de Wien, C, em termos de \hbar e de K_B . Estime o valor numérico de C. Calcule a frequência e o comprimento de onda do máximo da densidade de energia para a temperatura de 1000 K. Localize o máximo no espectro electromagnético. Como se desloca este máximo quando a temperatura aumenta?
- (h) Mostre que a energia total por unidade de volume dada por

$$\rho(T) = \int_0^\infty \rho_T(\nu) d\nu \tag{7}$$

é dada por

$$\rho(T) = \sigma T^4, \tag{8}$$

que é a lei experimental de Stefan (1874). Exprima a constante de Stefan, σ , em termos de \hbar , K_B e c. Estime o valor numérico desta constante.

2 Efeito Fotoeléctrico[‡]

As figuras seguintes reproduzem os resultados de uma experiência que estuda o efeito fotoeléctrico.

- (a) Das observações experimentais representadas nos gráficos da Fig. 1, indique, justificando, qual ou quais são as observações incompatíveis com a teoria clássica da radiação. Mostre que todos os resultados experimentais estão de acordo com a hipótese de quantificação da radiação electromagnética.
- (b) Uma onda electromagnética de intensidade $\mathbb{I}=10^{-2}Wm^{-2}$ incide perpendicularmente numa célula fotoeléctrica (com um barreira de extracção de electrões de $\phi=2$ eV) com uma área de 2 cm². Determine a frequência limiar.
- (c) Considerando as mesmas condições da alínea (b), calcule a corrente de saturação e o potencial de paragem, sabendo que a frequência da radiação incidente é $\nu = \frac{10^{16}}{2\pi}$ Hz.

demonstrar isso calculando a energia média do oscilador harmónico:

$$\begin{split} \langle E \rangle & = & \frac{1}{Z} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p E e^{-\beta E} \,, \\ Z & = & \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p e^{-\beta E} \,, \end{split}$$

onde a energia do oscilador harmónico (1D) é dada por $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{k}{2}q^2$). Efectuando os integrais em cima obtemos $\langle E \rangle = k_B T$, compatível com o teorema da equipartição de energia, pois temos um grau de liberdade de posição e um grau de liberdade de momento.

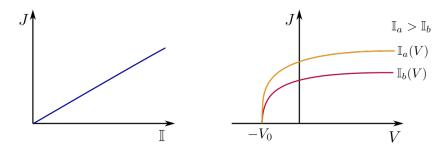


Figura 1: Esquerda: Corrente eléctrica observada em função da intensidade da radiação incidente no cátodo. Direita: Intensidade da corrente observada em termos da voltagem aplicada à região cátodo-ánodo.

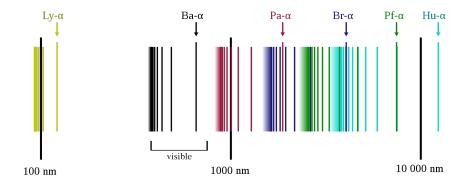


Figura 2: Espectro do átomo de Hidrogénio. Ly- α identifica a série de Lyman, Ba- α identifica a série de Balmer, Pa- α identifica a série de Paschen.

3 Modelo atómico de Bohr[‡]

Em 1913 Niels Bohr apresentou um modelo atómico que apesar de estar assente num fundo clássico, integrava algumas idéias quânticas.

- (a) Tal como Bohr fez, assumamos por simplicidade que os electrões descrevem órbitas circulares em torno do núcleo. Assuma que a carga nuclear é dada por +Ze, sendo a carga do electrão dada por -e. Escreva a condição que determina o raio de uma órbita (i.e. igualdade da força centrífuga e da força centrípeta).
- (b) Use a expressão da alínea (a) para reescrever a energia total do sistema, $E = E_{\text{cin}} + E_{\text{pot}}$, como função apenas do raio da trajectória (sendo tudo o resto constantes).
- (c) Quando excitado (ex. termicamente) o átomo de Hidrogénio (Z=1) emite luz em pequenas riscas/bandas de comprimento de onda ver Fig. 2. A regularidade clara nas riscas da Fig. 2 levou a que se chegasse à regra simples para os comprimentos de onda do espectro de emissão do Hidrogénio,

$$\frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \tag{9}$$

onde $R_H = (10967757.6 \pm 1.2) m^{-1}$ é a constante de Rydberg, sendo n > m números inteiros maiores do que zero.

Bohr compreendeu que poderia explicar este fenómeno se assumisse que os níveis de energia do átomo de Hidrogénio eram discretos, e que estas riscas resultavam de transições de um nível de energia mais alto para um nível de energia mais baixo, $E_m \to E_n = \Delta E$. A conservação da energia total em tal transição poderia ser obedecida se essa (diferença de) energia fosse emitida como radiação electromagnética de comprimento de onda dado por $\Delta E = h\nu = hc/\lambda$.

Usando a Eq. (9) indique qual a forma geral dos níveis de energia do átomo de Hidrogénio.

(d) Mostre que a forma que Bohr obteve para os níveis de energia do átomo de Hidrogénio (alínea anterior), implicam que apenas alguns raios (da órbita circular do electrão em torno do núcleo) são

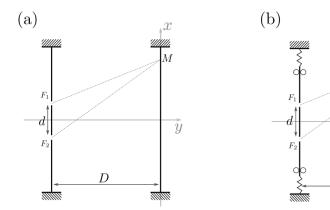


Figura 3: (a) Representação da experiência da dupla fenda de Young. (b) Representação da experiência da dupla fenda de Young modificada.

ŷ

admitidos. Usando a energia total obtida na alínea (b), encontre a expressão para a quantização do raio da órbita circular.

(e) Tendo em conta que a constante de Rydberg é dada pela expressão, $R_H = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} = 1.097 \times 10^7 m^{-1}$, mostre que esta quantização do raio da órbita circular do electrão implica a quantização do momento angular do electrão, $|\vec{L}| = |\vec{r} \times \vec{p}|$, em múltiplos inteiros de $\hbar = h/(2\pi)$.

4 Experiências de Young[‡]

Considere uma experiência de interferência produzida por um dispositivo de dupla fenda de Young onde d identifica a distância entre as fendas, D identifica a distância entre a placa contendo as fendas e o plano detector (sendo $d \ll D$) – veja Fig. 3(a). Assuma que um feixe de luz monocromático de comprimento de onda λ incide normalmente na placa das fendas.

- (a) Mostre que a distância entre dois máximos consecutivos do padrão de interferência é dado por $\lambda D/d$.
- (b) Considere que modificamos as condições experimentais, de forma que a placa das fendas pode agora mover-se ao longo da direcção Ox ver Fig. 3(b). Para além disso, introduzimos um dispositivo que consegue medir a componente segundo Ox de momento linear transferido para a placa das fendas sempre que um fotão passa por uma das fenda. (Esta transferência de momento linear dá-se sempre que o fotão colide com as bordas da fenda.) Designando por p_x^i a componente segundo Ox da quantidade de movimento cedida à placa quando o fotão passa pela fenda F_i , onde i=1,2, mostre que $\Delta p_x \equiv |p_x^1 p_x^2| \simeq pd/D$.
- (c) Calcule a incerteza máxima que poderá ter numa medição da quantidade de movimento do plano das fendas, Δp_{max} , caso queira distinguir por qual das fendas passou o fotão posteriormente detectado no ponto M. Compare este valor com a distância entre dois máximos consecutivos do padrão de interferência, calculado na alínea (a). O que conclui desta comparação?

5 Princípio da Incerteza de Heisenberg $^{\ddagger\Box}$

O Princípio da Incerteza de Heisenberg diz que o desvio padrão da posição da partícula, $\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$, multiplicado pelo desvio padrão do seu momento linear $\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2}$, em uma dimensão, tem um limite inferior dado por

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \,. \tag{10}$$

De seguida vamos ver que este princípio resulta, por um lado das propriedades das transformadas de Fourier, e por outro das relações de de Broglie.

Consideremos uma função genérica (de apenas uma variável) $\Psi(x)$ definida em $x \in \mathbb{R}$. Assumamos que esta função pertence ao espaço das funções de quadrado integrável, $\Psi \in L^2$. Isto é o mesmo que

dizer que esta é uma função cujo integral do seu módulo ao quadrado $|\Psi(x)|^2$ em todo o x é finito, $\int_{-\infty}^{\infty}|\hat{\Psi}(x)|^2\mathrm{d}x<\infty.$ Denotemos a transformada de Fourier de $\Psi(x)$ e a sua inversa como

$$F[\Psi(x);k] \equiv \widehat{\Psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(x)e^{ikx} dx, \qquad (11a)$$

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{\Psi}(k) e^{-ikx} dk.$$
 (11b)

(a) Comece por mostrar que substituindo a Eq. (11a) na Eq. (11b) obtém a identidade. Para isso use a definição da função delta de Dirac,

$$\delta(x-y) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-y)} dk.$$
 (12)

(b) Use estas igualdades para provar que

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} |\widehat{\Psi}(k)|^2 \mathrm{d}k, \qquad (13)$$

Note que se interpretarmos $\Psi(x)$ como a função de onda de uma partícula em uma dimensão, a densidade de probabilidade de encontrar essa partícula em [x, x + dx] é dada por $d\mathcal{P}(x) = \frac{|\Psi(x)|^2}{N_{\Psi}} dx$ onde $N_{\Psi} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x)|^2 dx$. De forma semelhante, podemos interpretar a $\widehat{\Psi}(k)$ como sendo a função de onda no espaço de Fourier, cujo quadrado do módulo nos dá uma densidade de probabilidade para a distribuição do vector de onda $k=2\pi/\lambda$. A densidade de probabilidade de uma partícula ter vector de onda em $[k,k+\mathrm{d}k]$ é dada por d $\widehat{\mathcal{P}}(k)=\frac{|\widehat{\Psi}(k)|^2}{N_{\widehat{\Psi}}}\mathrm{d}k$ onde $N_{\widehat{\Psi}}\equiv\int_{-\infty}^{\infty}|\widehat{\Psi}(k)|^2\mathrm{d}k$. Assim, a igualdade da Eq. (13) diz-nos que a probabilidade de encontrarmos a partícula em qualquer ponto do espaço $x \in [-\infty, \infty]$ é igual à probabilidade de esta ter qualquer vector de onda possível $k \in [-\infty, \infty]$.

(c) Use integração por partes para mostrar que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(x \Psi^*(x) \Psi'(x) + x \Psi(x) \left[\Psi^*(x) \right]' \right) \mathrm{d}x = -1, \qquad (14)$$

onde $\Psi'(x) \equiv \frac{d\Psi}{dx}$.

(d) Mostre que

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\Psi'(x)|^2 \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{\infty} k^2 |\widehat{\Psi}(k)|^2 \mathrm{d}k.$$
 (15)

(e) Prove a desigualdade de Cauchy-Schwarz intergal

$$\left| \int_{-\infty}^{\infty} f(x)g(x) dx \right|^{2} \le \left(\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^{2} dx \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} |g(x)|^{2} dx \right), \tag{16}$$

onde f(x) e g(x) são duas funções de quadrado integrável definidas em todo o espaço real.

(f) Partindo da Eq. (14) use a desigualdade de Cauchy-Schwarz Eq. (16) identificando $f(x)=x\Psi(x)$ e $g(x)=\Psi'(x)$. Use então o resultado da Eq. (15) para transformar $\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi'(x)|^2\mathrm{d}x$ em $\int_{-\infty}^{\infty} k^2 |\widehat{\Psi}(k)|^2 dk$. Conclua por fim que

$$\sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} x^2 |\Psi(x)|^2 dx} \sqrt{\int_{-\infty}^{\infty} k^2 |\widehat{\Psi}(k)|^2 dk} \ge \frac{1}{2},$$
(17)

que nada mais é do que $\sqrt{\langle x^2 \rangle} \sqrt{\langle k^2 \rangle} \ge \frac{1}{2}$.

(g) Notando que podemos sempre redefinir a origem do nosso sistema de coordenadas de modo que $\langle x \rangle = 0$ e $\langle k \rangle = 0,$ use a relação de de Broglie $k = \frac{p}{\hbar}$ e obtenha

$$\Delta x \Delta p \ge \frac{\hbar}{2} \,. \tag{18}$$

Note que até este último passo, apenas trabalhamos uma relação matemática inerente às transformadas de Fourier. Todas as implicações físicas da desigualdade anterior resultam deste último passo.

6 Efeitos quânticos macroscópicos[†]

- (a) Suponha que pretende observar uma formiga. Calcule a variação do seu momento linear devido à incidência de um fotão. Indique se o efeito é observável.
- (b) Um automóvel de massa 100 kg move-se a uma velocidade de 90 km/h. Haverá algum perigo de o automóvel difractar ao atravessar um túnel de 3.3 m de largura?

7 Aplicabilidade da Mecânica Quântica[†]

Mostre que no problema de Larmor, dividindo a energia total pela frequência ciclotrónica, $w_c = \frac{qB}{m}$, podemos obter a seguinte expressão para a acção típica do sistema:

$$S_t = \frac{1}{2} m r^2 w_c. (19)$$

Assumindo que aplicamos um campo magnético de 10 T ao electrão e que ele descreve uma órbita ciclotrónica de 10 nm, estime a acção típica e conclua se o problema deve ser tratado clássica ou quanticamente.

8 Observação[†]

Um resultado fundamental de Óptica é que nenhum instrumento óptico pode analisar detalhes menores do que o comprimento de onda da luz utilizada na sua observação.

- (a) Considere que você pretende observar um vírus com um diâmetro de 200 Å. É impossível usar nesta observação um microcópio óptico (comprimento de onda típico 4000 7000 Å), mas pode usarse um microscópio electrónico. Calcule a diferença de potencial a que deve submeter os electrões, de forma a que o seu comprimento de onda de de Broglie seja mil vezes menor do que o diâmetro do vírus, e assim consiga obter uma imagem com boa resolução.
- (b) Consideremos que uma partícula pode ser classificada como sendo uma partícula elementar se for um objecto pontual (i.e. sem subestrutura). Sabendo que o acelerador mais potente hoje em dia é o LHC (Large Hadron Collider) do CERN, e que este opera a 13 GeV, determine a escala de comprimento a que é possível afirmar hoje em dia que um dado sistema é uma partícula elementar.