UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA – UDESC
CENTRO DE CIÊNCIAS TECNOLÓGICAS – CCT
DEPARTAMENTO DE FÍSICA – DFIS
MECÂNICA QUÂNTICA – I

Aluno(a): Rodrigo Ribamar Silva do Nascimento

Professor(a): Bruno Duarte da Silva Moreira **Capítulo(s) Ref.:** IV

Lista de Exercícios: 003 **Data:** 05/07/2023 **Fase:** LEF102-08U

TERCEIRA AVALIAÇÃO

Sumário

Problema 1. Encontre as autofunções ($\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z)$) e os auto valores de energia para o oscilador harmônico quântico isotrópico 3D:

$$V(x, y, z) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 z^2 \tag{1}$$

Para isso,utilize os resultados do oscilador quântico 1D, estudado no módulo I *(não é necessário resolver quase nada!).*

Obs.: As autofunções podem ser escritas em termos de uma constante de normalização $A_{n_x n_y n_z}$ Não é necessário encontrar essa constante!

Solução 1. Escrevendo o operador Hamiltoniano para o oscilador 3D, em termo do operador momento $\vec{p} = -i\hbar\nabla$

$$H_{x,y,z} = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2 + y^2 + z^2\right) = H_x + H_y + H_z \tag{2}$$

Uma vez que o Hamiltoniano é separável, podemos escrevê-lo em termos de um sistema de três Hamiltonianos unidimensionais correspondendo ao movimento nas direções x, y e z, além disso, considerando a equação de autovalor para o operador Hamiltoniano

$$H_{x,y,z}\psi_{n_{x,y,z}}(x, y, z) = E_{n_{x,y,z}}\psi_{n_{x,y,z}}(x, y, z), \quad \text{com } E_{n_i} = \sum_{i=1}^{3}\left(n_i + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{3}$$

tem-se então que

$$H_x\psi_{n_x(x)} = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega x^2 = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{4a}$$

$$H_y\psi_{n_y(y)} = \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega y^2 = \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{4b}$$

$$H_z\psi_{n_z(z)} = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega z^2 = \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \tag{4c}$$

Os autovalores de energia sai direto de

$$\begin{aligned} E_{n_{x,y,z}} &= \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \\ &= \boxed{\left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega, \quad \text{com } n_{x,y,z} = 0, 1, 2, ...} \end{aligned} \tag{5}$$

Para as auto funções, tem-se que

$$\psi_{n_{x,y,z}(x,,y,z)} = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z) \tag{6}$$

em que ψ_{n_i} é a *i-ésima* autofunção do oscilado harmônico unidimensional, por exemplo, a solução geral da eq. (4a) é dada por

$$\psi_{n_x}(x) = A_{n_x}\mathcal{H}_n(x)\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2}, \quad \text{com } \mathcal{H}_n(x) = (-1)^n \mathrm{e}^{x^2}\left(\frac{d}{dx}\right)^n \mathrm{e}^{-x^2} \tag{7}$$

portanto, levando (7) em (6) obtemos

$$\boxed{\psi_{n_{x,y,z}}(x,y,z) = A_{n_{x,y,z}}\mathcal{H}_n(x)\mathcal{H}_n(y)\mathcal{H}_n(z)\mathrm{e}^{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x^2+y^2+z^2)}, \quad \text{com } n = 0,1,2...} \tag{8}$$

Problema 2. Partindo da equação radial

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[V(r) - E\right]R(r) = l\,(l+1)\,R(r) \tag{9}$$

e fazendo a troca de variáveis $u(r) = rR(r)$, obtenha a equação

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l\,(l+1)}{r^2}\right]u(r) = Eu(r) \tag{10}$$

Solução 2. Fazendo a substituição obtem-se

$$\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{d}{dr}\left(\frac{u(r)}{r}\right)\right] - \frac{2mr^2}{\hbar^2}\frac{u(r)}{r}\left[V(r) - E\right] = l\,(l+1)\,\frac{u(r)}{r} \tag{11}$$

Resolvendo primeiramente o termo das derivadas (*apenas por comodidade ocultaremos a denpência em r da função $u(r)$no tratamento a abaixo*)

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{d}{dr}\left(\frac{u}{r}\right)\right] &= \frac{d}{dr}\left[r^2\left(\frac{1}{r}\frac{du}{dr} - \frac{u}{r^2}\right)\right] \\
&= 2r\left(\frac{1}{r}\frac{du}{dr} - \frac{u}{r^2}\right) + r^2\left(-\frac{1}{r^2}\frac{du}{dr} + \frac{1}{r}\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{2u}{r^3} - \frac{1}{r^2}\frac{du}{dr}\right) \\
&= \cancel{2\frac{du}{dr}} - \cancel{\frac{2u}{r}} - \cancel{\frac{du}{dr}} + r\frac{d^2u}{dr^2} + \cancel{\frac{2u}{r}} - \cancel{\frac{du}{dr}} \\
&= r\frac{d^2u}{dr^2}
\end{aligned} \tag{12}$$

substituindo (12) em (11) e multiplicando tudo por $-\hbar^2/2mr$, obtêm-se

$$-\frac{\hbar^2}{2mr}\left(r\frac{d^2u(r)}{dr^2}\right) + u(r)V(r) - u(r)E = -\frac{\hbar^2}{2mr}l\,(l+1)\,\frac{u(r)}{r} \tag{13}$$

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m}\frac{l\,(l+1)}{r^2}\right]u(r) = u(r)E} \tag{14}$$

Problema 3. a) Partindo da equação para a parte radial da função de onda $R(r)$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dr(r)}{dr}\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[V(r) - E\right]R(r) = l(l+1)R(r) \tag{15}$$

mostre que, para o caso onde $l = 0$ e $E = -|E|$ (estado ligado), esta equação pode ser escrita como

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} - \frac{2m}{\hbar^2}V(r)R(r) = \frac{2m}{\hbar^2}|E|R(r) \tag{16}$$

e que, para o potencial coulombiano entre o próton e o elétron, temos ainda

$$\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{2}{ar}R(r) = K^2R(r) \tag{17}$$

sendo

$$a = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}, \quad \text{e } K^2 = \frac{2m|E|}{\hbar^2} \tag{18}$$

Na equação acima, a é o raio de Bohr (da órbita prevista pelo modelo atômico de Bohr).

b) Seguindo a solução assintótica (grande r) discutida na **seção 10.5 do Moysés vol. 4**, obtenha a parte radial da função de onda normalizada $R(r)$ e o módulo do autovalor de energia do estado fundamental.

c) Seguindo a mesma referência citada acima, calcule o valor de r para o qual a probabilidade radial é máxima e o valor médio de r. **Se necessário, utilize fórmula ou programa para a integral.**

Solução 3. a) Para $l = 0$ e $E = -|E|$, basta substituir na equação (15), calcular as derivadas e ajustar os termos, assim

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right) - \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[V(r) + |E|\right]R(r) = 0 \\ 2r\frac{dR(r)}{dr} + r^2\frac{d^2R(r)}{dr^2} - \frac{2mr^2}{\hbar^2}\left[V(r) + |E|\right]R(r) = 0 \end{aligned} \tag{19}$$

$$\boxed{\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} - \frac{2m}{\hbar^2}V(r)R(r) = \frac{2m}{\hbar^2}|E|R(r)} \tag{20}$$

Sendo o potencial coulombiano entre o próton e o elétron dado por

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \tag{21}$$

levando a eq. (21) em (20) obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)R(r) = K^2R(r) \\ \frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{me^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}\left(\frac{2R(r)}{r}\right) = K^2R(r) \end{aligned} \tag{22}$$

usando o raio de Bohr eq. (18) em (22), ficamos com

$$\boxed{\frac{d^2R(r)}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{2}{a}\frac{R(r)}{r} = K^2R(r)} \tag{23}$$

b) Obtendo a solução assintótica da parte radial da eq. (23)

$$\begin{aligned} \frac{d^2R(r)}{dr^2} + \overset{0}{\cancel{\frac{2}{r}}}\frac{dR(r)}{dr} + \frac{2}{a}\overset{0}{\cancel{\frac{1}{r}}}R(r) - K^2R(r) = 0 \\ \frac{d^2R(r)}{dr^2} - K^2 = 0 \end{aligned} \tag{24}$$

a solução geral da equação acima é conhecida e já eliminando a parte que diverge, ficamos com

$$R(r) = A\mathrm{e}^{-Kr} \tag{25}$$

Encontrando os valores possíveis para K na expressão acima é possível encontrar o autovalor de $|E|$, logo

$$\begin{aligned} \frac{dR(r)}{dr} &= -KA\mathrm{e}^{-Kr} \\ &= -KR(r) \end{aligned} \tag{26}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{d^2R(r)}{dr^2} &= K^2A\mathrm{e}^{-Kr} \\ &= K^2R(r) \end{aligned} \tag{27}$$

substituindo as eqs. (26) e (27) em (23), ficamos com

$$\begin{aligned} \cancel{K^2R(r)} - \frac{2}{r}KR(r) + \frac{2}{a}\frac{R(r)}{r} = \cancel{K^2R(r)} \\ K = \frac{1}{a} \end{aligned} \tag{28}$$

usando $K^2 = 1/a^2$ na eq. (18) obtemos o autovalor de energia

$$\frac{2m|E|}{\hbar^2} = \frac{1}{a^2} \tag{29}$$

$$\tag{30}$$

$$\boxed{|E| = \frac{\hbar^2}{2ma^2}} \tag{31}$$

precisamos normalizar a $R(r) = A\mathrm{e}^{2r/a}$, logo

$$\begin{aligned}
\int\limits_v |R(r)|^2 \, d^3r &= 1 \\
4\pi \int\limits_0^\infty A^2 \mathrm{e}^{-2r/a} r^2 \, dr &= 1 \\
4\pi A^2 \left[\underbrace{-r^2 \frac{\mathrm{e}^{-2r/a}}{2/a} \Bigg|_\infty^0}_{=0} + \frac{a}{\cancel{2}} \int\limits_0^\infty \mathrm{e}^{-2r/a} \cancel{2} r \, dr \right] &= 1 \\
4\pi A^2 a \left[\underbrace{r \left(-\frac{a}{2} \mathrm{e}^{-2r/a} \right) \Bigg|_\infty^0}_{=0} + \frac{a}{2} \int\limits_0^\infty \mathrm{e}^{-2r/a} \, dr \right] &= 1 \\
2\pi A^2 a^2 \left[-\frac{a}{2} \mathrm{e}^{-2r/a} \Bigg|_\infty^0 \right] &= 1 \\
2\pi A^2 a^2 \left[\frac{a}{2} \right] &= 1 \\
A &= \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}
\end{aligned} \tag{32}$$

ou seja

$$\boxed{R(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \mathrm{e}^{-r/a}} \tag{33}$$

[continua...]

Problema 4. Para a equação de v, do átomo de hidrogênio,

$$\rho v''(\rho) + 2(l + 1 - \rho) v'(\rho) + [\rho_0 - 2(l + 1)] \, v(\rho) = 0 \tag{34}$$

encontre a relação de recorrência

$$c_{j+1} = \frac{2(j + l + 1) - \rho_0}{j(j + 1) + 2(l + 1)(j + 1)} c_j \tag{35}$$

Solução 4. Dado que

$$v(\rho) = \sum_j c_j \rho^j \tag{36}$$

tem-se que

$$v'(\rho) = \sum_j j c_j \rho^{j-1} \tag{37a}$$

$$v''(\rho) = \sum_j j(j - 1) c_j \rho^{j-2} \tag{37b}$$

substituindo (37a) e (37b) em (34) ficamos com

$$\begin{aligned}\rho\sum_j j(j-1)c_j\rho^{j-2} + 2(l+1-\rho)\sum_j jc_j\rho^{j-1}+ \\ +[\rho_0 - 2(l+1)]\sum_j c_j\rho^j = 0 \\ \sum_j j(j-1)c_j\rho^{j-1} + 2(l+1)\sum_j jc_j\rho^{j-1} - 2\sum_j jc_j\rho^j + \\ +[\rho_0 - 2(l+1)]\sum_j c_j\rho^j = 0\end{aligned} \tag{38}$$

ajustando os índices dos dois primeiros somatórios acima, para $j-1=j'$

$$\begin{aligned}\sum_j (j+1)jc_{j+1}\rho^j + 2(l+1)\sum_j (j+1)c_{j+1}\rho^j + \\ -2\sum_j jc_j\rho^j + [\rho_0 - 2(l+1)]\sum_j c_j\rho^j = 0\end{aligned} \tag{39}$$

ocultando o somatório e igulando os coeficentes de ρ^j obtemos

$$\begin{aligned}c_{j+1}(j+1)j + c_{j+1}(j+1)2(l+1) = 2jc_j + 2(l+1)c_j - c_j\rho_0 \\ c_{j+1}\left[j(j+1) + 2(l+1)(j+1)\right] = \left[2j + 2(l+1) - \rho_0\right]c_j\end{aligned} \tag{40}$$

logo,

$$\boxed{c_{j+1} = \frac{2\,(j+l+1) - \rho_0}{j(j+1) + 2(l+1)(j+1)}} \tag{41}$$

[continua...]