

Primeira Lista de Exercícios – Revisão de Mecânica Quântica

1) (a) Qual é a velocidade de um elétron cujo comprimento de onda é 3,00 cm? (b) Qual a velocidade de um próton com o mesmo comprimento de onda? (c) Qual a razão para obter velocidades que diferem por três ordens de grandeza, uma vez que os comprimentos de onda são iguais? (d) Considere que um elétron e um próton tenham a mesma velocidade $v = 1,00 \times 10^6$ m/s. Quais os respectivos comprimentos de onda? (e) Nessas condições, você esperaria que efeitos quânticos fossem mais importantes para o elétron ou para o próton? Justifique sua resposta.

2) Uma lâmpada de sódio emite luz amarela com comprimento de onda $\lambda = 550$ nm. Quantos fótons são emitidos por segundo, se a potência da lâmpada for de (a) 1,00W? e (b) 100W? (c) Qual o momento linear dos fótons emitidos pela lâmpada de sódio? (d) Sabendo que os fótons são emitidos por uma transição entre dois níveis eletrônicos do átomo de sódio, obtenha a diferença entre esses níveis de energia.

3) (a) Em um laboratório de física nuclear, deseja-se produzir um feixe de prótons com velocidade $v = 0,45 \times 10^6$ m/s e incerteza relativa no momento linear $(\Delta p/p) = 0,01$. Que incerteza deverá ser tolerada na determinação da posição de um desses prótons? (b) Uma ligação química confina um elétron a uma região com cerca de 1Å de comprimento (1Å = 0,1nm). Estime a incerteza na determinação da velocidade desse elétron.

4) Considere que a função de onda de um elétron confinado em uma caixa unidimensional de comprimento L seja dada por

$$\psi(x) = \cos(\pi x/L), \quad -L/2 \leq x \leq +L/2$$

$$\psi(x) = 0, \quad |x| > L/2$$

(a) Essa função de onda é quadraticamente integrável? (b) Essa função de onda é normalizada? (c) Em caso negativo, normalize-a. d) Qual a probabilidade de encontrar o elétron nos seguintes intervalos: $-L/2 < x < 0$, $0 < x < L/2$, e $-L/4 \leq x \leq +L/4$?

5) Em Mecânica Quântica, o valor esperado de uma grandeza física observável (energia, momento linear, momento angular, posição, velocidade, etc.) é dado por

$$\langle O \rangle = \int d\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}) \hat{O}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}),$$

sendo $\hat{O}(\mathbf{r})$ o *operador* que representa o *observável* físico, $\langle O \rangle$ o seu *valor esperado* e ψ a função de onda que descreve o estado da partícula. É importante que você tenha clareza sobre os seguintes aspectos: (i) A expressão acima corresponde a uma média da grandeza física representada pelo operador, ponderada pela *densidade de probabilidade* associada à função de onda. (ii) Por causa da natureza probabilística dos fenômenos quânticos, é necessário realizar um grande número de experimentos idênticos (com a partícula no mesmo estado ψ), a fim de obter o valor médio da grandeza física e seu respectivo desvio. Esse valor médio corresponde ao valor esperado $\langle O \rangle$, sendo o desvio dado por $\delta O = [\langle O^2 \rangle - \langle O \rangle^2]^{1/2}$ (o primeiro termo é o valor esperado do quadrado do operador e o segundo termo é o valor esperado ao quadrado). (iii) A integral em $d\mathbf{r}$ será unidimensional ($\int dx$) se a partícula estiver confinada a esse tipo de movimento, o mesmo valendo para os movimentos bidimensional ($\int dx dy$) e tridimensional ($\int dx dy dz$). (iv) Em todos os casos, a integral deverá ser realizada sobre todo o espaço, isto é, no intervalo $(-\infty, +\infty)$ em cada direção.

O problema de uma partícula confinada em uma caixa é muito importante do ponto de vista conceitual, pois um elétron sujeito a uma ligação química pode, em primeira aproximação, ser

entendido dessa maneira. Esse problema é resolvido/discutido na maioria dos textos introdutórios à Mecânica Quântica, sendo seu estudo fortemente recomendado. Considere um elétron confinada à região $0 < x < L$, de modo que a probabilidade de encontrá-lo fora desse intervalo (isto é, fora da caixa) seja nula, $\psi(x) = 0$. Sendo a função de onda no interior da caixa dada por

$$\psi(x) = (2/L)^{1/2} \sin(\pi x/L) ,$$

Obtenha o valor esperado dos seguintes operadores: (a) momento linear, $\hat{O} \equiv p = -i\hbar d/dx$; (b) posição, $\hat{O} \equiv x$; (c) velocidade $\hat{O} \equiv v = p/m$; (d) energia cinética $\hat{O} \equiv T = p^2/m = -(\hbar^2/m)d^2/dx^2$.

6) (a) Resolva o problema da partícula na caixa unidimensional para um potencial definido de forma simétrica; $V(x) = 0$ para $-a/2 \leq x \leq a/2$ e infinito para os outros valores. Usando argumentos de simetria do integrando, calcule os valores esperados da posição e do momento linear. (b) Os elétrons π das duplas ligações no butadieno podem ser modelados como se movendo numa caixa unidimensional de comprimento 5,5 Å. Calcule o comprimento de onda da radiação necessária para excitar um elétron no estado $n = 2$ para $n = 3$.

7) A utilização de coordenadas esféricas é recorrente no estudo de átomos e moléculas, pois o potencial de Coulomb

$$V(r) = (1/4\pi\epsilon_0) q_1 q_2 / r ,$$

depende apenas da coordenada radial (r), sendo independente das coordenadas angulares (θ, ϕ). É recomendável que você faça uma revisão sobre coordenadas esféricas. Em particular, lembre-se que o elemento diferencial de volume ($d\tau = dx dy dz$) assume a forma $d\tau = r^2 \sin\theta dr d\theta d\phi$, e que os intervalos de integração são $0 \leq r < \infty$, $0 \leq \theta < \pi$, e $0 \leq \phi < 2\pi$. Considere a função de onda do estado fundamental do átomo de hidrogênio (a_0 é o raio de Bohr),

$$\psi(r) = (1/\pi a_0^3)^{1/2} \exp(-r/a_0) ,$$

onde a origem é tomada sobre o próton e o vetor $\mathbf{r} = (r, \theta, \phi)$ localiza o elétron (em relação ao próton). (a) Mostre que a função de onda é normalizada. (b) Obtenha a probabilidade de encontrar o elétron nos intervalos $0 < r < a_0$, e $a_0 < r < 2a_0$. (c) Obtenha o valor esperado da coordenada radial (isto é, da distância r do elétron ao próton) e seu respectivo desvio. (d) Faça o mesmo para a velocidade do elétron.

8) O método de separação de variáveis é muito utilizado em Mecânica Quântica (por exemplo, no átomo de hidrogênio). Partindo da equação de Schrödinger dependente do tempo, obtenha, por esse método, a solução formal dessa equação para o caso em que o hamiltoniano não tem dependência temporal. (Esse problema é discutido/resolvido em textos introdutórios à MQ).