Mecânica Quântica II

Lista 4

1. Considere um poço de potencial infinito unidimensional:

$$V(x) = \begin{cases} 0 \ , & 0 \leq x \leq a \ , \\ \\ \infty \ , & x < 0 \quad x > a \end{cases}$$

Utilize a função de onda de prova

$$\psi(x) = \begin{cases} Ax \ , & 0 \leq x \leq a/2 \ , \\ A(a-x) \ , & a/2 \leq x \leq a \ , \\ 0 \ , & x < 0 \quad x > a \end{cases}$$

onde A é uma constante de normalização, para obter um limite superior para a energia do estado fundamental.

Dica: Use o fato que o operador P^2 é hermitiano e portanto

$$\langle P^2 \rangle = \langle \psi | P P | \psi \rangle \ ,$$

e que

$$P = -i\hbar \frac{d\psi}{dx} \ .$$

2. Considere um oscilador harmônico undimensional, i.e.

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \ .$$

Obtenha o *mínimo* limite superior para a energia do estado fundamental de H, usando a função de onda de prova

$$\psi(x) = \frac{A}{x^2 + b^2} \ ,$$

onde A e b são constantes.

3. **Corolário do Princípio Variacional**:
Provar que se um estado $|\psi\rangle$ é ortogonal ao estado fundamental, então

$$E_{pee} \leq \langle \psi | H | \psi \rangle \ ,$$

onde E_{pee} é a energia do primeiro estado excitado.

4. **Princípio Variacional e Teoria de Perturbações**:
Use o princípio variacional para provar que

   (a) usando teoria de perturbações (caso *não degenerado*) para estimar a correção ao estado fundamental *sempre* resulta num valor maior que o verdadeiro, i.e.

$$E_{ef} \leq E^0_{ef} + E^1_{ef} \ ;$$

   (b) e que a correção de segunda ordem, E^2_{ef}, é sempre *negativa.*

5. Considere o estado fundamental do átomo de hélio. O hamiltoniano é dado por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\nabla_1^2 + \nabla_2^2\right) - 2e^2\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{e^2}{|\mathbf{r_1} - \mathbf{r_2}|} \ ,$$

onde o segundo termo corresponde às interações dos elétrons nas posições $\mathbf{r_1}$ e $\mathbf{r_2}$ com os dois prótons no núcleo (assumindo a distância entre eles desprezível), e o último termo é a repulsão Coulombiana entre os elétrons, V_{ee}.

   (a) Usando a função de onda de prova

$$\psi_0(\mathbf{r_1}, \mathbf{r_2}) = \psi_{100}(\mathbf{r_1})\psi_{100}(\mathbf{r_2}),$$

   onde ψ_{100} se refer ao estado fundamental do átomo de hidrogênio, mostre que o valor esperado de H é

$$\langle H \rangle = 8E_1 + \langle V_{ee} \rangle \ ,$$

   onde E_1 é a energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio, -13.6 eV .

   (b) Calcule $\langle V_{ee} \rangle$. Mostre que é dado por

$$\langle V_{ee} \rangle = -\frac{5}{2}E_1 \ .$$

   (c) Agora considere a carga nuclear como um parámetro livre, Z. A função de onda test é

$$\psi_Z(\mathbf{r_1}, \mathbf{r_2}) = \frac{Z^3}{\pi a^3} e^{-Z(r_1+r_2)/a} \ ,$$

   onde a é o raio de Bohr. Obtenha $\langle H \rangle$ como função de Z.

   (d) A partir do resultado do ponto anterior, obtenha o valor de Z que minimiza $\langle H \rangle$, portanto o valor que o deixa o mais perto de E_{ef}.

6. Considere o íon da molécula de hidrogênio, H_2^+. O hamiltoniano é dado por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - e^2\left(\frac{1}{r} + \frac{1}{r'}\right) \ ,$$

onde r e r' se referem às distâncias do elétron em relação a cada um dos prótons, entre eles separados por uma distância R. Usando a função de onda do átomo de hidrogênio $\psi_0(r)$ como função de prova, ela deve ser (ver notas de aula):

$$\psi(r, r') = A\left\{\psi_0(r) + \psi_0(r')\right\} \ ,$$

(a) Obtenha a normalização A em termos do parámetro R.

(b) Mostre que o valor esperado de H é dado por

$$\langle H \rangle = E_1 - 2|A|^2\frac{e^2}{a}\left(D + X\right) \ ,$$

onde E_1 é a energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio, a é o raio de Bohr, e definimos

$$D = a\langle\psi_0(r)|\frac{1}{r'}|\psi_0(r)\rangle; \qquad X = a\langle\psi_0(r)|\frac{1}{r}|\psi_0(r)\rangle.$$

(c) Calcule D e X.

(d) Se adicionamos o efeito da repulsão entre os prótons,

$$V_{pp} = \frac{e^2}{R} \ ,$$

mostre que

$$\langle H \rangle = \left(1 - \frac{2}{R} + 4|A|^2(D + X)\right) E_1 \ .$$