Programa de Pós-Graduação em Ensino de Física - UFRJ

Mecânica Quântica – Prova Única – 2009/1

Questão 1

A molécula de monóxido de carbono (CO) pode ser imaginada como um átomo de oxigênio e um de carbono ligados por uma "mola" de constante elástica *k*, como está na figura 1.1

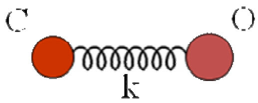

Figura 1.1. Modelo "massa-mola" para a molécula de CO.

a) Usando esse modelo, calcule o espectro de energias da molécula de CO em termos de *k* e das massas dos átomos, m_C e m_O. Não leve em consideração o movimento de rotação.

b) Em um experimento (G. J. Schulz, *Vibrational Excitation of N_2, CO, and H_2 by Electron Impact*, Phys. Rev. 135, A988, 1964), elétrons de energia 2 eV colidem com moléculas de CO. A figura 1.2 mostra que os elétrons tendem a perder apenas certas quantidades de energia nessas colisões. Em outras palavras, as moléculas não ganham qualquer energia numa colisão, somente alguns valores determinados. Obtenha esses valores da figura 1.2 e compare o resultado com o previsto pelo modelo do item (a). Que valor para a constante *k* da ligação C-O resulta dessa comparação? As massas molares do carbono e oxigênio são, respectivamente, 12 g/mol e 16 g/mol.

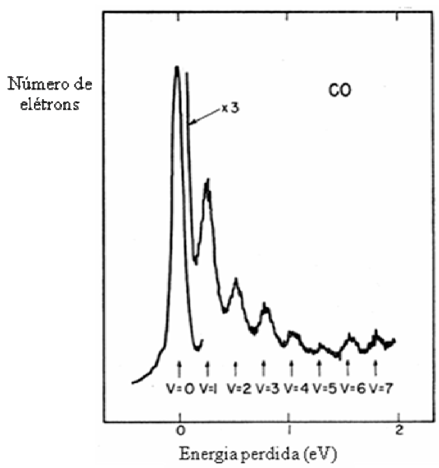

Figura 2.1. Energia perdida pelos elétrons em colisões e + CO.

Questão 2

Considere o oscilador harmônico bidimensional mostrado na figura 2.1, onde uma partícula de massa *m* move-se sob a ação da força elástica $\vec{F} = -k\,\vec{r}$.

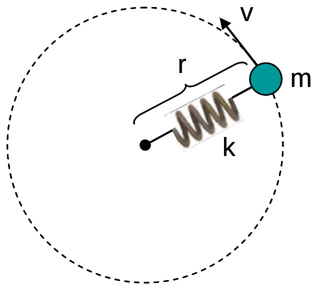

Figura 2.1. Oscilador harmônico bidimensional.

a) Calcule o raio das órbitas *circulares* permitidas pela regra de Bohr para quantização do momento angular, $L=n\hbar$. Encontre também a velocidade da partícula nessas órbitas.

b) Calcule a energia das órbitas obtidas no item (a).

Questão 3

Considere um elétron que só pode ocupar duas posições, de coordenadas $x = \pm a$ (veja a figura 3.1).

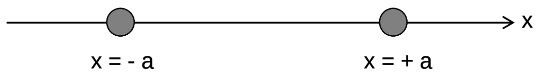

Figura 3.1. As duas posições do elétron.

O estado quântico correspondente ao elétron na posição $x = +a$ é

$$|+a\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} ,$$

e na posição $x = -a$,

$$|-a\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} .$$

a) Escreva a matriz que representa, na base $|\pm a\rangle$, o operador posição *X*.

b) Suponha que, nessa mesma base, o operador energia (o hamiltoniano) seja dado pela matriz

$$H = \begin{pmatrix} 0 & -\varepsilon \\ -\varepsilon & 0 \end{pmatrix} .$$

Mostre que os autovalores de *H* são $E = \pm\varepsilon$.

c) Mostre que os autovetores $|\pm\varepsilon\rangle$ correspondentes às energias calculadas no item (b) são

$$|+\varepsilon\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad |-\varepsilon\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} .$$

d) A figura 3.2 mostra os vetores $|\pm a\rangle$ no espaço de estados do sistema. Represente graficamente os autoestados $|\pm\varepsilon\rangle$ nesse diagrama.

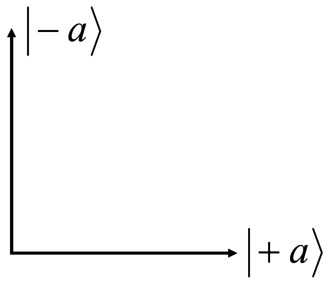

Figura 3.2. A base de autovetores da posição *X*.

e) Existem estados onde os valores de *X* e *H* estejam *simultaneamente* bem definidos? Ou seja, a posição e energia do elétron são observáveis compatíveis? Justifique sua resposta com base nos resultados dos itens (c) e (d).

f) Calcule o comutador [*X*, *H*]. O que o resultado mostra sobre a compatibilidade dos observáveis posição e energia?

g) Suponha que no instante $t = 0$ o elétron esteja no estado $|\varphi(0)\rangle = |+a\rangle$. Mostre que a evolução temporal desse estado é dada por

$$|\varphi(t)\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\frac{1}{2}\omega t) \\ i\, sen(\frac{1}{2}\omega t) \end{pmatrix}$$

onde $\omega = 2\varepsilon/\hbar$.

h) Qual é a probabilidade do elétron no estado $|\varphi(t)\rangle$ ser encontrado na posição $x = +a$? E em $x = -a$? Discuta esses resultados.

i) Calcule o valor médio da posição do elétron no estado $|\varphi(t)\rangle$. Discuta o resultado.

j) Qual é a probabilidade do elétron no estado $|\varphi(t)\rangle$ ser encontrado com energia $E = -\varepsilon$? E com energia $E = +\varepsilon$? Qual é o valor médio da energia $\langle E\rangle$? Esses valores dependem do tempo? Discuta esse último aspecto à luz da conservação da energia.

k) Ainda para o estado $|\varphi(t)\rangle$, obtenha as incertezas ΔX e ΔE .

l) Mostre que as incertezas ΔX e ΔE obedecem ao princípio da incerteza

$$\Delta X\,\Delta E \geq \frac{1}{2}\left|\langle [X,H]\rangle\right| \ .$$