Sexta Aula de Exercícios

Thaís Victa Trevisan – thaistre@ifi.unicamp.br

Problema 17 **do Capítulo** 3 **do livro "*Modern Quantum Mechanics*" – J.J Sakurai e Jim Napolitano.**

A função de onda de uma partícula sujeita a um potencial esfericamente simétrico $V(r)$ é dada por

$$\psi(\vec{r}) = \left(x + y + 3z\right) f(r) \ .$$

(a) ψ é autofunção de L^2? Se sim, qual é o autovalor associado a ela? Se não, quais são os possíveis valores de l que podemos obter ao medir L^2?

(b) Quais são os possíveis valores de m_l que podemos encontrar ao medir L_z? E com quais probabilidades?

(c) Suponha que $\psi(\vec{r})$ é uma autofunção do Hamiltoniano do sistema com autovalor E. Como podemos determinar $V(r)$?

Solução:

- **Item (a):**

Sabemos que os autoestados de L^2 são $|k, l, m\rangle$ com autovalores $l(l+1)\hbar^2$:

$$L^2 |k, l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2 |k, l, m\rangle \ . \tag{1}$$

Sabemos também que, na representação de coordenadas,

$$\langle \vec{r} \,|\, k, l, m\rangle = \left\langle r, \theta, \phi \,|\, k, l, m\right\rangle = \varphi_k(r) Y_l^m(\theta, \phi) \ , \tag{2}$$

lembrando que estamos usando coordenadas esféricas

$$\begin{cases} x = r\sin\theta\cos\phi \\ y = r\sin\theta\sin\phi \\ z = r\cos\theta \end{cases} \tag{3}$$

e que $Y_l^m(\theta,\phi)$ correspondem aos harmônicos esféricos,

$$\boxed{\begin{array}{c} Y_0^0(\theta,\phi)=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{\pi}} \\ Y_1^{-1}(\theta,\phi)=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta e^{-i\phi} \\ Y_1^0(\theta,\phi)=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{\pi}}\cos\theta \\ Y_1^1(\theta,\phi)=-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}}\sin\theta e^{i\phi} \\ Y_2^{-2}(\theta,\phi)=\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta e^{-2i\phi} \\ Y_2^{-1}(\theta,\phi)=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{-i\phi} \\ Y_2^0(\theta,\phi)=\frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}\left(3\cos^2\theta-1\right) \\ Y_2^1(\theta,\phi)=-\frac{1}{2}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin\theta\cos\theta e^{i\phi} \\ Y_2^2(\theta,\phi)=\frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta e^{2i\phi} \\ \vdots \end{array}} \; . \tag{4}$$

desse modo, para descobrirmos se $\psi(\vec{r})$ é autoestado de L^2, devemos escrevê-la em função dos harmônicos esféricos e, depois aplicar sobre ela o operador L^2, utilizando (1). Se o resultado for proporcional a $\psi(\vec{r})$, significa que a mesma é autoestado de L^2.

Levando (3) em $\psi(\vec{r})$, encontramos

$$\psi(r,\theta,\phi)=rf(r)\left(\sin\theta\sin\phi+\sin\theta\cos\phi+\cos\theta\right)\;. \tag{5}$$

Agora, de (4), podemos escrever

$$\sin\theta\sin\phi=i\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left[Y_1^1\left(\theta,\phi\right)+Y_1^{-1}(\theta,\phi)\right]\;, \tag{6}$$

$$\sin\theta\cos\phi=\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left[Y_1^{-1}\left(\theta,\phi\right)-Y_1^1(\theta,\phi)\right] \tag{7}$$

e

$$\cos\theta=2\sqrt{\frac{\pi}{3}}Y_1^0(\theta,\phi)\;. \tag{8}$$

Levando (6), (7) e (8) em (5), obtemos

$$\psi(r,\theta,\phi)=rf(r)\left[\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(i-1)\,Y_1^1(\theta,\phi)+\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(i+1)\,Y_1^{-1}(\theta,\phi)+6\sqrt{\frac{\pi}{3}}Y_1^0(\theta,\phi)\right]\;, \tag{9}$$

que é a representação no espaço de coordenadas do *ket* $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle=\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(i-1)\,|k11\rangle+\sqrt{\frac{2\pi}{3}}(i+1)\,|k1-1\rangle+6\sqrt{\frac{\pi}{3}}\,|k10\rangle\;, \tag{10}$$

onde usamos

$$\langle\vec{r}\mid klm\rangle=\left\langle r,\theta,\phi\mid klm\right\rangle=\langle r\mid k\rangle\left\langle\theta,\phi\mid lm\right\rangle=\langle r\mid k\rangle\,Y_l^m(\theta,\phi)$$

e $\langle r \mid k\rangle = r f(r)$. Assim, usando (1), obtemos

$$\begin{aligned} L^2 \left|\psi\right\rangle &= \sqrt{\frac{2\pi}{3}}\,(i-1)\,L^2\,|k11\rangle + \sqrt{\frac{2\pi}{3}}\,(i+1)\,L^2\,|k1-1\rangle + 6\sqrt{\frac{\pi}{3}}L^2\,|k10\rangle \\ &= 2\hbar^2\left[\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\,(i-1)\,|k11\rangle + \sqrt{\frac{2\pi}{3}}\,(i+1)\,|k1-1\rangle + 6\sqrt{\frac{\pi}{3}}\,|k10\rangle\right] . \end{aligned}$$

Ou seja,

$$\boxed{L^2 \left|\psi\right\rangle = 2\hbar^2 \left|\psi\right\rangle} \tag{11}$$

o que quer dizer que $\left|\psi\right\rangle$ é autoestado de L^2 com autovalor $\boxed{l(l+1)\hbar^2 = 2\hbar^2}$. Consequentemente se prepararmos nosso sistema no estado $\left|\psi\right\rangle$ e medirmos L^2, obteremos o resultado $l = 1$ com 100% de certeza.

- **Item (b):**

Ao medirmos L_z, os possíveis resultados que podemos obter são seus autovalores $m\hbar$. Pela maneira como o estado $\left|\psi\right\rangle$ do sistema foi preparado (equação (10)), os únicos valores de m que podemos obter com probabilidades não nulas são $m = -1$, $m = 0$ e $m = 1$. As probabilidades associadas a cada uma dessas medidas são:

(i) Probabilidade de medir $m = -1$:

Segundo o quarto postulado da Mecânica Quântica, a probabilidade de medir L_z e encontrar o resultado $m = -1$ é dada por

$$\mathscr{P}(m=-1) = \frac{\left\langle\psi\right|P_{m=-1}\left|\psi\right\rangle}{\left\langle\psi\mid\psi\right\rangle} , \tag{12}$$

onde

$$P_{m=-1} = \sum_k \sum_{l=1}^{\infty} |k,l,-1\rangle\,\langle k,l,-1| \tag{13}$$

é o projeto no autoestado de L_z correspondente ao autovalor $m\hbar = -\hbar$. Assim

$$\left\langle\psi\right|P_{m=-1}\left|\psi\right\rangle = \sum_k \sum_{l=1}^{\infty} \left|\left\langle k,l,-1\mid\psi\right\rangle\right|^2 = \left|\left\langle k,1,-1\mid\psi\right\rangle\right|^2 = \frac{4\pi}{3}$$

e

$$\left\langle\psi\mid\psi\right\rangle = \frac{2\pi}{3}(i-1)(-i-1) + \frac{2\pi}{3}(i+1)(-i+1) + \frac{36\pi}{3} = \frac{44\pi}{3} .$$

Desse modo (t6eq12) resulta em

$$\boxed{\mathscr{P}(m=-1) = \frac{4}{44}} . \tag{14}$$

(ii) Probabilidade de medir $m = 0$:

$$\mathscr{P}(m=0) = \frac{\left\langle\psi\right|P_{m=0}\left|\psi\right\rangle}{\left\langle\psi\mid\psi\right\rangle} = \frac{3}{44\pi}\left|\left\langle k,1,0\mid\psi\right\rangle\right|^2 = \boxed{\frac{36}{44}} , \tag{15}$$

onde

$$P_{m=0} = \sum_k \sum_{l=0}^{\infty} |k,l,0\rangle\,\langle k,l,0| . \tag{16}$$

é o projetor no(s) autoestado(s) de L_z correspondente ao autovalor $m\hbar = 0$.

(iii) Probabilidade de medir $m = 1$:

$$\mathscr{P}(m=1) = \frac{\langle\psi|P_{m=1}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{3}{44\pi}\left|\langle k,1,1|\psi\rangle\right|^2 = \boxed{\frac{4}{44}}, \tag{17}$$

onde

$$P_{m=1} = \sum_k \sum_{l=1}^{\infty} |k,l,1\rangle\langle k,l,1| \; . \tag{18}$$

é o projetor no(s) autoestado(s) de L_z correspondente ao autovalor $m\hbar = \hbar$.

Note que, de fato, $\mathscr{P}(m=-1) + \mathscr{P}(m=0) + \mathscr{P}(m=1) = 1$.

- **Item (c):**

Se o estado $|\psi\rangle$ é uma autofunção do Hamiltoniano do sistema com autovalor de energia E, segue que

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \; , \tag{19}$$

ou, na representação de coordenadas,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(r)\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \; . \tag{20}$$

Em coordenadas esféricas,

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \; . \tag{21}$$

levando (21) em (20) e usando a seguinte notação para reescrever a função de onda (9),

$$\psi(r,\theta,\phi) = R(r)G(\theta,\phi) \; , \tag{22}$$

com

$$R(r) = rf(r) \quad \text{e} \quad G(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2\pi}{3}}\,(i-1)\,Y_1^1(\theta,\phi) + \sqrt{\frac{2\pi}{3}}\,(i+1)\,Y_1^{-1}(\theta,\phi) + 6\sqrt{\frac{\pi}{3}}\,Y_1^0(\theta,\phi) \; ,$$

encontramos

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\left[rR(r)G(\theta,\phi)\right] + \frac{L^2}{2mr^2}R(r)G(\theta,\phi) + V(r)R(r)G(\theta,\phi) = ER(r)G(\theta,\phi) \; , \tag{23}$$

pois, na representação de coordenadas[1],

$$L^2 = -\hbar^2\left(\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \frac{1}{\tan\theta}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right) \; . \tag{24}$$

Agora, lembrando que $\psi(r,\theta,\phi)$ é autoestado de L^2 com autovalor $2\hbar^2$, (24) fica

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\left[rR(r)G(\theta,\phi)\right] + \frac{\hbar^2}{mr^2}R(r)G(\theta,\phi) + V(r)R(r)G(\theta,\phi) = ER(r)G(\theta,\phi) \; ,$$

[1] Vide Cohen-Tannoudji, volume 1, página 662.

de modo que podemos cartar a dependência angular $G(\theta,\phi)$. Isto é,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\left[r^2 f(r)\right]+\frac{\hbar^2}{mr}f(r)+V(r)rf(r)=Erf(r)\;. \tag{25}$$

Como $f(r)$ e E são conhecidos, para determinar $V(r)$ basta isolá-lo em (25). Antes disso, vamos calcular explicitamente

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}=-\frac{\hbar^2}{2mr}\left[2f(r)+4rf'(r)+r^2f''(r)\right]\;, \tag{26}$$

com

$$f'(r)=\frac{\mathrm{d}f(r)}{\mathrm{d}r}\quad \text{e}\quad f''(r)=\frac{\mathrm{d}^2f(r)}{\mathrm{d}^2r}\;.$$

Levando (26) em (25) e isolando $V(r)$, encontramos:

$$\boxed{V(r)=E+\frac{\hbar^2}{2mrf(r)}\left[4f'(r)+rf''(r)\right]}\;. \tag{27}$$