Formulário

- $e^{i\theta} = \cos(\theta) + i\sin(\theta)$
- $\sin(\alpha+\beta) = \sin(\alpha)\cos(\beta) + \cos(\alpha)\sin(\beta)$
- $\cos(\alpha+\beta) = \cos(\alpha)\cos(\beta) - \sin(\alpha)\sin(\beta)$
- Função de onda $\psi(x,y,x;t)$
- $\langle\phi\,|\,\psi\rangle = \int \phi^*\psi\,dx\,dy\,dz$
- $||\psi||^2 = \int \psi^*\psi\,dx\,dy\,dz$
- Hermit. $\langle\phi\,|\,A\psi\rangle = \langle A\phi\,|\,\psi\rangle$

- $A\,|\psi_\lambda\rangle = \lambda\,|\psi_\lambda\rangle$
- $|\psi\rangle = \sum_\lambda c_\lambda\,|\psi_\lambda\rangle$
- $\rho(\lambda) = |\langle\psi_\lambda\,|\,\psi\rangle|^2/\langle\psi\,|\,\psi\rangle$
- $\langle A\rangle = \int \psi(x)^* A\psi(x)\,dx$
- $\sigma_A = \sqrt{\langle(A-\langle A\rangle)^2\rangle}$
- $\sigma_x\,\sigma_p \geq \hbar/2$
- $\sigma_A\,\sigma_B \geq \frac{|\langle[A,B]\rangle|}{2}$
- $\sigma_E\,\sigma_t \geq \frac{\hbar}{2}$

- De Broglie $\lambda_B = 2\pi\hbar/p$
- $p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$
- $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$
- $\vec{p} = \hbar\vec{k}$
- $|\psi_{\vec{k}}\rangle = \mathcal{N}e^{-i\vec{k}\vec{r}}$
- $H = \frac{p^2}{2m} + V(x,p)$
- $H\,\psi_E(\ldots) = E\,\psi_E(\ldots)$
- $i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi$

- Caixa:
- $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l_x}}\sin\left(n\pi\frac{x}{l_x}\right)$
- $E_n = n^2\frac{\hbar^2\pi^2}{2ml_x^2} \quad n = 1,\ldots$
- Osc. Har. $V(x) = c\,x^2/2$
- $\omega = \sqrt{\frac{c}{m}} \qquad l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$
- $h_0(x) = \frac{1}{(\pi l^2)^{1/4}}e^{-\frac{x^2}{2l^2}}$
- $h_1(x) = \frac{2x/l}{(4\pi l^2)^{1/4}}e^{-\frac{x^2}{2l^2}}$
- $h_2(x) = \frac{2(x/l)^2-1}{(4\pi l^2)^{1/4}}e^{-\frac{x^2}{2l^2}}$
- $h_3(x) = \frac{2(x/l)^3-3x/l}{(9\pi l^2)^{1/4}}e^{-\frac{x^2}{2l^2}}$
- $E_n = \frac{1+2n}{2}\hbar\omega \quad n = 0,\ldots$

- $\vec{L} = -i\hbar\vec{r}\times\vec{\nabla}$
- $L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi};\ L_\pm = L_x \pm iL_y$
- $L_zY_l^m = m\hbar Y_l^m \quad m = -l\ldots l$
- $L^2Y_l^m = l(l+1)\hbar^2Y_l^m$
- $L_\pm Y_l^m = \sqrt{l(l+1)-m(m\pm1)}\hbar Y_l^{m\pm1}$
- $Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$
- $rY_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}z$
- $rY_1^{\pm1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(x\pm iy)$
- $r^2Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(2z^2-x^2-y^2)$
- $r^2Y_2^{\pm1} = \mp\sqrt{\frac{5}{8\pi}}z(x\pm iy)$
- $r^2Y_2^{\pm2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}(x\pm iy)^2$

- $x = r\sin(\theta)\cos(\varphi)$
  $y = r\sin(\theta)\sin(\varphi)$
  $z = r\cos(\theta)$
- $V(r) = -\frac{e^2Z}{4\pi\epsilon_0 r}$
- $\psi_{nlm} = R_{nl}(r)\,Y_l^m(\theta,\varphi)$
- $E_n = -\frac{\hbar^2}{2m_ea_0^2n^2} = -\frac{13.6eV}{n^2}$
- $R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}}e^{-\frac{r}{a_0}}$
- $R_{20} = \frac{2-r/a_0}{2\sqrt{2a_0^3}}e^{-\frac{r}{2a_0}}$
- $R_{21} = \frac{r/a_0}{2\sqrt{6a_0^3}}e^{-\frac{r}{2a_0}}$
- $V_Y = -C_Y\frac{e^{-\frac{m_Bc^2}{\hbar c}r}}{r}$ Yukawa
- $\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar}\langle[H,A]\rangle + \langle\frac{\partial A}{\partial t}\rangle$
- $a^+\,|i\rangle = \sqrt{i+1}\,|i+1\rangle$

- $\hbar = 1.054571\times10^{-34}$ J.s
- $\hbar = 6.58120\ldots\times10^{-16}$ eV.s
- $m_e = 9.109383\ldots\times10^{-31}$ kg
- $c = 2.99792\times10^8$ m/s
- 1 eV$\approx 1.6\times10^{-19}$ J
- $m_ec^2 \approx 511\times10^3$ eV
- $e = 1.60217\ldots\times10^{-19}C$

- $m_pc^2 = 938\times10^6$ eV
- $\epsilon_0 = 8.8541\times10^{-12}$ C^2/Jm
- $\hbar c = 197.327$ eV·nm
- $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = \frac{\hbar c}{137.036}$
- $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_ee^2} = 0.0529$ nm
- Å $= 10^{-10}$m ; Fm $= 10^{-15}$m
- $k_B = 8.617\times10^{-5}$ eV/K

- $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{a^2}}\,dx = |a|\sqrt{\pi}$
- $\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n+1}e^{-\frac{x^2}{a^2}}\,dx = 0$
- $\int_{-\infty}^{+\infty} x^2e^{-\frac{x^2}{a^2}}\,dx = \frac{a^3}{2}\sqrt{\pi}$
- $\int_0^\infty r^ne^{-\frac{r}{a}}\,dr = n!a^{n+1} \quad a>0$
- 1 eV. nm = 1 MeV. Fm
- $E_\gamma = \hbar\omega$, $\omega = 2\pi f$ e $c = \lambda f$

Problemas: Série - 3

1. Utilize as tabelas do formulário e escreva para o átomo de hidrogénio, a função de onda $\psi_{nlm} = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi)$ para o estado fundamental ψ_{100} . Utilizando também os integrais no formulário verifique a normalização desta função de onda.

2. Utilize a expressão geral para a função de onda do átomo de hidrogénio,

$$\psi_{nlm} = -\frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!a_0]^3}}\left(\frac{2\rho}{n}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2\rho}{n}\right)e^{-\rho/n}Y_l^m(\theta,\phi)$$

para calcular a função de onda ψ_{100} . Nesta expressão, $\rho = r/a_0$ e a notação para o polinómio de Laguerre é, $L_n^p(x) = \left(\frac{d}{dx}\right)^p L_n(x)$ e

$$L_n(x) = \frac{e^x}{n!}\frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x}x^n\right)$$

3. A partir dos valores de $\hbar$, m_e e ϵ_0, ou, em alternativa $\hbar c$, $m_e c^2$ e da constante de estrutura fina $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} = \frac{1}{137.036}$, calcule a energia de ligação do estado fundamental a partir da expressão genérica,

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2}\frac{1}{n^2}$$

com $a_0 = 4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_e e^2$.

4. Se existe um número infinito de estados próprios do Hamiltoneano com energias $E_1, E_2 \ldots$porque não aparecem distintos no diagrama do espectro?

5. Quais os valores da energia E_2 e E_3 do átomo de hidrogénio?.

6. Qual a cor dos fotões produzidos na transição de E_3 para E_2? Note que $E_\gamma = \hbar\omega$ e $c = \lambda/T = \lambda/\frac{2\pi}{\omega}$. As cores da luz estão nos intervalos centrados em violeta ≈400 nm, índigo ≈445 nm, azul ≈475 nm, verde ≈510 nm, amarelo ≈570 nm, laranja ≈590 nm e vermelho ≈650 nm.

7. Qual a cor da luz produzida de uma transição de um nível de energia muito excitado $E_n$para o nível E_2(Série de Balmer)?

8. A que distância r do núcleo é que o quadrado da função de onda do estado fundamental do átomo de hidrogénio fica menos de 1% do seu valor no núcleo? Escreva o r em função do raio de Bohr a_0 e em Å.

9. Verifique que a condição

$$n > l \geq |m|$$

significa que os únicos estados próprios ψ_{nlm} com energia E_2 são os estados ψ_{200} , ψ_{211},ψ_{210},ψ_{21-1}. Como interpreta os estados $2p_x$e $2p_y$?

10. Verifique que os estados

$$2p_x = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\psi_{211} + \psi_{21-1}\right)$$

e

$$2p_y = \frac{i}{\sqrt{2}}\left(\psi_{211} + \psi_{21-1}\right)$$

estão normalizados.

11. Um átomo de hidrogénio emite um fotão ao transitar de um nível de energia $n = 4$ para $n = 2$. Uma vez que a energia de um fotão é dada por $E_\gamma = \hbar\omega$, qual é a expressão correta para o comprimento de onda, λ, e a frequência, f, da onda de luz emitida?Justifique.

12. Calcule o valor médio da energia potencial do átomo de hidrogénio se ele estiver no estado 1s ($n = 1$, l=0, m=0)? Tenha em consideração que o valor de expectação do operador A em coordenadas esféricas se pode escrever:$\langle A\rangle = \int\int\int \psi^* A\psi\, r^2 \sin(\theta)\, dr\, d\theta\, d\varphi$, bem como as expressões das funções de onda e dos integrais no formulário. Considere também que $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = \frac{\hbar^2}{m_e a_0}$.

13. Um átomo emite um fotão ao transitar de um nível de energia E_i para o estado fundamental de energia E_0 . Uma vez que a energia de um fotão é dada por $E_\gamma = \hbar\omega$, qual é a expressão correcta para o comprimento de onda, λ da luz emitida?

14. Um positrão é a anti-partícula do electrão que tem uma carga oposta ($+e$) e uma massa igual. Um positrão quando colide com um electrão pode formar, durante cerca de 0.12 ns, um estado ligado (positrónio). Relacione a massa reduzida do positrónio, μ_{pos} , e do Hidrogénio ($\mu_H \approx m_e$) e a a expressão da energia potencial do positrónio com a do átomo de hidrogénio. Qual a energia do estado fundamental do positrónio?

15. Um átomo de hidrogénio emite um fotão ao transitar do nível de energia $n = 3$ para o estado fundamental. Uma vez que a energia de um fotão é dada por $E_\gamma = \hbar\omega$, qual o comprimento de onda da luz emitida?