

## Formulário

<ul style="list-style-type: none"> <li>• <math>e^{i\theta} = \cos(\theta) + i \sin(\theta)</math></li> <li>• <math>\sin(\alpha + \beta) = \sin(\alpha) \cos(\beta) + \cos(\alpha) \sin(\beta)</math></li> <li>• <math>\cos(\alpha + \beta) = \cos(\alpha) \cos(\beta) - \sin(\alpha) \sin(\beta)</math></li> <li>• Função de onda <math>\psi(x, y, z; t)</math></li> <li>• <math>\langle \phi   \psi \rangle = \int \phi^* \psi \, dx \, dy \, dz</math></li> <li>• <math>\ \psi\ ^2 = \int \psi^* \psi \, dx \, dy \, dz</math></li> <li>• Hermit. <math>\langle \phi   A\psi \rangle = \langle A\phi   \psi \rangle</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <math>A  \psi_\lambda\rangle = \lambda  \psi_\lambda\rangle</math></li> <li>• <math> \psi\rangle = \sum_\lambda c_\lambda  \psi_\lambda\rangle</math></li> <li>• <math>\rho(\lambda) =  \langle \psi_\lambda   \psi \rangle ^2 / \langle \psi   \psi \rangle</math></li> <li>• <math>\langle A \rangle = \int \psi(x)^* A \psi(x) \, dx</math></li> <li>• <math>\sigma_A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}</math></li> <li>• <math>\sigma_x \sigma_p \geq \hbar/2</math></li> <li>• <math>\sigma_A \sigma_B \geq \frac{ \langle [A, B] \rangle }{2}</math></li> <li>• <math>\sigma_E \sigma_t \geq \frac{\hbar}{2}</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• De Broglie <math>\lambda_B = 2\pi\hbar/p</math></li> <li>• <math>p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}</math></li> <li>• <math>\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}</math></li> <li>• <math>\vec{p} = \hbar \vec{k}</math></li> <li>• <math> \psi_{\vec{k}}\rangle = \mathcal{N} e^{-i\vec{k}\vec{r}}</math></li> <li>• <math>H = \frac{p^2}{2m} + V(x, p)</math></li> <li>• <math>H \psi_E(\dots) = E \psi_E(\dots)</math></li> <li>• <math>i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi</math></li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Caixa:</li> <li>• <math>\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l_x}} \sin\left(n\pi \frac{x}{l_x}\right)</math></li> <li>• <math>E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml_x^2} \quad n = 1, \dots</math></li> <li>• Osc. Har. <math>V(x) = cx^2/2</math></li> <li>• <math>\omega = \sqrt{\frac{c}{m}} \quad l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}</math></li> <li>• <math>h_0(x) = \frac{1}{(\pi l^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2l^2}}</math></li> <li>• <math>h_1(x) = \frac{2x/l}{(4\pi l^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2l^2}}</math></li> <li>• <math>h_2(x) = \frac{2(x/l)^2 - 1}{(4\pi l^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2l^2}}</math></li> <li>• <math>h_3(x) = \frac{2(x/l)^3 - 3x/l}{(9\pi l^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2l^2}}</math></li> <li>• <math>E_n = \frac{1+2n}{2} \hbar\omega \quad n = 0, \dots</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <math>\vec{L} = -i\hbar \vec{r} \times \vec{\nabla}</math></li> <li>• <math>L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}; L_\pm = L_x \pm iL_y</math></li> <li>• <math>L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m \quad m = -l \dots l</math></li> <li>• <math>L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m</math></li> <li>• <math>L_\pm Y_l^m = \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} \hbar Y_l^{m \pm 1}</math></li> <li>• <math>Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}</math></li> <li>• <math>rY_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} z</math></li> <li>• <math>rY_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (x \pm iy)</math></li> <li>• <math>r^2 Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (2z^2 - x^2 - y^2)</math></li> <li>• <math>r^2 Y_2^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{5}{8\pi}} z(x \pm iy)</math></li> <li>• <math>r^2 Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} (x \pm iy)^2</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <math>x = r \sin(\theta) \cos(\varphi)</math> <math>y = r \sin(\theta) \sin(\varphi)</math> <math>z = r \cos(\theta)</math></li> <li>• <math>V(r) = -\frac{e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 r}</math></li> <li>• <math>\psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)</math></li> <li>• <math>E_n = -\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2 n^2} = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}</math></li> <li>• <math>R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}</math></li> <li>• <math>R_{20} = \frac{2-r/a_0}{2\sqrt{2a_0^3}} e^{-\frac{r}{2a_0}}</math></li> <li>• <math>R_{21} = \frac{r/a_0}{2\sqrt{6a_0^3}} e^{-\frac{r}{2a_0}}</math></li> <li>• <math>V_Y = -C_Y \frac{e^{-\frac{m_B e^2 r}{\hbar c}}}{r}</math> Yukawa</li> <li>• <math>\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle + \langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle</math></li> <li>• <math>a^+  i\rangle = \sqrt{i+1}  i+1\rangle</math></li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>• <math>\hbar = 1.054571 \times 10^{-34} \text{ J.s}</math></li> <li>• <math>\hbar = 6.58120 \dots \times 10^{-16} \text{ eV.s}</math></li> <li>• <math>m_e = 9.109383 \dots \times 10^{-31} \text{ kg}</math></li> <li>• <math>c = 2.99792 \times 10^8 \text{ m/s}</math></li> <li>• <math>1 \text{ eV} \approx 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}</math></li> <li>• <math>m_e c^2 \approx 511 \times 10^3 \text{ eV}</math></li> <li>• <math>e = 1.60217 \dots \times 10^{-19} \text{ C}</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <math>m_p c^2 = 938 \times 10^6 \text{ eV}</math></li> <li>• <math>\epsilon_0 = 8.8541 \times 10^{-12} \text{ C}^2/\text{Jm}</math></li> <li>• <math>\hbar c = 197.327 \text{ eV}\cdot\text{nm}</math></li> <li>• <math>\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = \frac{\hbar c}{137.036}</math></li> <li>• <math>a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = 0.0529 \text{ nm}</math></li> <li>• <math>\text{Å} = 10^{-10} \text{ m}; \text{Fm} = 10^{-15} \text{ m}</math></li> <li>• <math>k_B = 8.617 \times 10^{-5} \text{ eV/K}</math></li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• <math>\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx =  a  \sqrt{\pi}</math></li> <li>• <math>\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n+1} e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx = 0</math></li> <li>• <math>\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx = \frac{a^3}{2} \sqrt{\pi}</math></li> <li>• <math>\int_0^\infty r^n e^{-\frac{r}{a}} dr = n! a^{n+1} \quad a &gt; 0</math></li> <li>• <math>1 \text{ eV}\cdot\text{nm} = 1 \text{ MeV}\cdot\text{Fm}</math></li> <li>• <math>E_\gamma = \hbar\omega, \omega = 2\pi f \text{ e } c = \lambda f</math></li> </ul>

## Problemas: Série - 5

- Revisão: Suponha que lançamos uma moeda ao ar um grande número de vezes e considere uma variável aleatória  $M$  com dois estados com valores caras - "1" e coroas - "2".
  - Se a moeda for equilibrada, qual a distribuição de probabilidades, o valor médio e a variância e o desvio padrão de  $M$ ?
  - Se a massa do lado "1" for muito superior de modo a que a moeda caia sempre com a "cara" para baixo, qual a distribuição de probabilidades, o valor médio e a variância de  $M$ ?

- O estado  $2p_x$  do átomo de hidrogénio é definido por,

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

em termos dos estados  $\psi_{nlm}$ . Calcule a probabilidade de cada um dos estados próprios de  $H$ , de  $\vec{L}^2$  e de  $L_z$ . Quais os valores de médios e os desvios padrão da energia  $E$ , de  $\vec{L}^2$  e de  $L_z$  para este estado?

- estado  $2p_x$  do átomo de hidrogénio é definido por,

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

em termos dos estados  $\psi_{nlm}$ . Calcule os valores de médios e os desvios padrão da energia  $H$ , de  $\vec{L}^2$  e de  $L_z$  para este estado a partir dos valores próprios e produtos internos ?

- Para o hamiltoneano do átomo de hidrogénio os operadores  $H, \vec{L}^2, L_z$  comutam. Verifique contudo que o estado  $\psi_{2p_x}$  não é um estado próprio simultaneamente dos 3 operadores.
- Utilizando a definição  $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ , calcule os comutadores  $[p_x, p_y]$ ,  $[x^2, p_x]$  e  $[x^2, p_y]$ . Calcule os mesmos comutadores utilizando as expressões,

$$[x_i, x_j] = [p_i, p_j] = 0 \quad [x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

- Dado um sistema de uma partícula com uma função de onda  $\psi(\vec{r}) = R(r) Y_1^{+1}(\theta, \phi)$ , determine os valores médios dos operadores  $\vec{L}^2, L_x^2, L_y^2, L_z^2, L_x, L_y, L_z$ . Sugestão: utilize os elementos de matriz de  $L_{\pm}$  no formulário.
- A função de onda que descreve o estado de um electrão tem a forma  $\psi(x) = \frac{1}{(\pi a^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2a^2}}$  com  $a$  constante positiva real. Qual o valor médio da posição  $x$  e o valor médio da energia cinética,  $E$ , para este estado, expresso em função de  $a, \hbar$  e  $m_e$  ?
- Sabendo que  $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ , diga qual a expressão da relação de Heisenberg para um estado próprio do momento angular com  $l=4, m=3$ .
- Sejam  $\psi_1$  e  $\psi_2$  duas funções de onda de norma 1 e produto interno  $S = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$  real e positivo. Considere que os produtos internos envolvendo o Hamiltoniano são:  $H_1 = \langle \psi_1 | H \psi_1 \rangle$ ,  $H_2 = \langle \psi_2 | H \psi_2 \rangle$  e  $H_{12} = \langle \psi_1 | H \psi_2 \rangle$  que assumem todos valores reais. Calcule para a função

$$\psi = \cos \alpha \psi_1 + \sin \alpha \psi_2$$

o valor médio

$$\langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

em função de  $\alpha, S, H_1, H_2, H_{12}$ . Para o caso de  $H_1 = H_2$  quais os valores de  $\alpha$  onde acontece o mínimo ou máximo do valor médio. (Sugestão: simplifique a expressão utilizando  $2 \sin \alpha \cos \alpha = \sin 2\alpha$ )