Mec.Quântica/ Fís.Quântica II, 2023/2024, António Amorim, Luís Bento, Jorge Sampaio e Edgar Cravo

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

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

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

- $\hbar = 1.054571 \times 10^{-34}$ J.s
- $\hbar = 6.58120\ldots \times 10^{-16}$ eV.s
- $m_e = 9.109383\ldots \times 10^{-31}$ kg
- $c = 2.99792 \times 10^8$ m/s
- 1 eV$\approx 1.6 \times 10^{-19}$ J
- $m_e c^2 \approx 511 \times 10^3$ eV
- $e = 1.60217\ldots \times 10^{-19} C$

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

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

Problemas: Série - 7

1. Sejam ψ_1 e ψ_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 Hamiltoneano 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,
$$\psi = \sin\alpha\,\psi_1 + \cos\alpha\,\psi_2$$
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 o valores de α onde acontece o mínimo ou máximo do valor médio. (Sugestão: simplifique a expressão utilizando $2\sin\alpha\cos\alpha = \sin 2\alpha$)

2. Um Hamiltoneano representado por uma matriz 2×2 tem vetores próprios
$$u_1 = \begin{pmatrix} \cos\beta \\ i\sin\beta \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad u_2 = \begin{pmatrix} i\sin\beta \\ \cos\beta \end{pmatrix}$$
associados aos valores próprios $E_1 = \hbar\omega_1$ e $E_2 = \hbar\omega_2$. Calcule os produtos internos $\langle u_1|u_1\rangle$, $\langle u_1|u_2\rangle$ e $\langle u_2|u_2\rangle$. Um estado tem uma função de onda no instante inicial dada por,
$$\psi(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} .$$
Encontre os coeficientes c_1, c_2 tais que
$$\psi(0) = c_1 u_1 + c_2 u_2$$
e obtenha a função de onda em função do tempo, $\psi(t)$. Calcule a sua normalização $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle$.

3. Considere o operador de rotação de um ângulo α em torno do eixo dos zz como $R(\alpha) = e^{-i\alpha L_z/\hbar}$. De que forma as rotações de 30 graus e 720 graus vão transformar a função harmónico esférico $Y_3^3(\theta,\varphi)$.

4. Considere um oscilador harmónico a uma dimensão que no instante inicial está no estado
$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{i\alpha}h_0(x) + h_1(x)\right)$$
onde α é uma constante real e $h_0(x)$ e $h_1(x)$ são as funções próprias da energia para $n = 0$ e $n = 1$. Escreva a expressão da evolução temporal desta função de onda $\psi(x,t)$. Considere que, como deduzido nas aulas,
$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{\langle p\rangle}{m}$$
e que o valor médio do momento é zero tanto para os estados h_0 como h_1. Por fim considere que $\int h_1(\mathrm{x})\frac{\partial h_0(x)}{\partial x}\,\mathrm{dx}$=-$\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}$. Escreva a equação do movimento de $\frac{d\langle x\rangle}{dt}$ em função do tempo.

5. Sejam $\psi_1(\vec{r})$, $\psi_2(\vec{r})$ duas funções próprias normalizadas do Hamiltoneano com valores próprios E_1 , E_2 respetivamente. No instante inicial a função de onda é dada por
$$\psi(\vec{r},0) = \alpha\psi_1(\vec{r}) + \beta\psi_2(\vec{r}) \quad .$$
Calcule $H\psi(\vec{r},0)$ e obtenha a função de onda em função do tempo $\psi(\vec{r},t)$. Calcule também o produto interno $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle$ e o valor de $\langle\psi(t)|H\psi(t)\rangle$.

6. Aplique o operador de momento linear $\hat{p}_x$ e o operador de translação $U(a) = e^{-ia\hat{p}_x/\hbar}$ (a real) às funções
$$\psi_k(x) = c\,e^{ikx} \qquad \psi(x) = \sum_i c_i\,e^{ik_ix}\,,$$
onde k, k_i são reais, isto é, determine as funções $\hat{p}_x\psi_k(x)$, $\hat{p}_x\psi(x)$, $U(a)\psi_k(x)$, $U(a)\psi(x)$. Verifique $U(a)\psi(x) = \psi(x')$ explicitando x' em termos de x e a.

7. Seja o Hamiltoneano de um sistema dado por,

$$H = \hbar\Omega \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

com Ω real. Obtenha os vetores próprios normalizados de H, u_1, u_2 e os respetivos valores próprios, E_1, E_2. Determine a evolução no tempo de $\psi(t)$ dada a condição inicial $\psi(0) = u_1 - u_2$ e calcule $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle$.

8. Se uma função de onda a uma dimensão depende do tempo de acordo com a expressão

$$\psi(x,t) = \psi(x,0) + i\hbar \int_0^t \frac{\partial^2\psi(x,t')}{\partial x^2}\, dt' - \frac{i}{\hbar}\frac{\omega^2}{2}\int_0^t \frac{x^2}{2}\psi(x,t')\, dt$$

qual é o Hamiltoneano do sistema e qual a massa da partícula.

9. Considere um sistema com um operador Hamiltoneano, H, que não depende explicitamente do tempo.
a) Mostre que a função, $\psi(\vec{r},t) = U(t;t_0)\psi(\vec{r},t_0)$, considerando t_0 um tempo constante e o operador $U(t;t_0)$ definido por $U(t;t_0) = Ae^{-i\frac{H}{\hbar}t}$, é solução da equação de Schrödinger.
b) Considerando o caso particular de $t = t_0$ diga qual a expressão do operador A e simplifique $U(t;t_0)$.
c) Considerando o inverso $U(t_0;t) = U^{-1}(t;t_0)$ que evolui os estados de t para t_0 , relacione com o hermítico conjugado de U.
d) Calcule o produto interno $\langle\psi(t)|\chi(t)\rangle$ com $|\psi(t)\rangle = U(t;t_0)\,|\psi(t_0)\rangle$ e $|\chi(t)\rangle = U(t;t_0)\,|\chi(t_0)\rangle$

10. Considere uma função própria do operador momento segundo o eixo dos xx como

$$\psi_p(x) = \mathcal{N}(x)e^{i\frac{p}{\hbar}x}$$

onde $\mathcal{N}(x)$ é uma função real que depende tão lentamente de x que podemos considerar $\frac{d\mathcal{N}(x)}{dx} \approx 0$, $\int \mathcal{N}^2(x)\,dx = 1$ e $\int \mathcal{N}^2(x)\cos(kx)\,dx = 0$. Confirme que, nestas condições, $\psi_p(x)$ está normalizada e é um função própria do operador momento com valor próprio p. Para um Hamiltoneano de uma partícula livre de massa m, diga como esta função evolui no tempo, $\psi_p(x,t)$, e qual é a densidade de probabilidade $\rho(x,t)$. Considere também a função de onda para o momento vizinho $\psi_{p+\epsilon}(x) = \mathcal{N}(x)e^{i\frac{(p+\epsilon)}{\hbar}x}$. e deduza uma equação da coordenada $x(t)$ para a qual a densidade de probabilidade do estado

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_p(x,t) + \psi_{p+\epsilon}(x,t)\right)$$

é máxima, assumindo nestes cálculos que $\mathcal{N}(x)$ é constante e que $E(p+\epsilon) = E(p) + \frac{dE}{dp}\epsilon$. (Sugestão: leve em conta que um máximo de $1 + \cos(\theta)$ acontece quando $\theta = 0$)

11. Aplique o teorema do Virial (Eq. A75 pag 943) ao oscilador harmónico a 3 dimensões e ao átomo de hidrogénio. Neste caso calcule o valor médio $<1/r>$ para um estado ψ_{nlm}.

12. Num oscilador a uma dimensão, os valores próprios da energia são dados por $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$. Calcule a evolução no tempo do estado próprio associado uma destas energias e relacione o tempo necessário para que esse estado se repita com o período clássico $T = \frac{2\pi}{\omega}$.

13. Escreva a função de onda $\psi(x,t)$ para um oscilador harmónico a uma dimensão.

14. Considere o espaço tridimensional de um sistema quântico e a base $|u_1\rangle\,,|u_2\rangle\,,|u_3\rangle$. Nesta base o Hamiltoneano tem a representação matricial

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 2i & 1 \\ -2i & 2 & -2i \\ 1 & 2i & 1 \end{bmatrix}$$

a) Calcule os valores próprios de H.
b) Em $t = 0$ o estado do sistema é $\psi(0) = |u_1\rangle$. Calcule o estado quântico num instante arbitrário t, $\psi(t)$.

15. Demonstre que a função de onda dada por

$$\psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r},0) + \frac{1}{i\hbar}\int_0^t H\,\psi(\vec{r},t')\,dt' \tag{1}$$

é solução da equação de Schrödinger,

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\vec{r},t)}{\partial t} = H\psi(\vec{r},t).$$

Para um Hamiltoneano que não depende explicitamente do tempo, considere um método iterativo onde na Eq. 1, no termo do integral, consideramos uma função de onda aproximada em que $\psi_0(\vec{r},t) = \psi(\vec{r},0)$ e calcule a função resultante $\psi_1(\vec{r},t)$. Substitua de novo essa função no integrado da Eq. 1 e calcule $\psi_2(\vec{r},t)$ e assim sucessivamente. Mostre que, até ao termo em t^2 a solução coincide com

$$\psi(\vec{r},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}\,\psi(\vec{r},0).$$

16. Defina o operador da translação a ao longo do eixo xx , $U(a)$, por,

$$U(a)\psi(x) = \psi(x-a)\,.$$

Relacione a derivada $\frac{\partial U(a)}{\partial a}$ com o operador quântico de momento linear $p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ e $U(a)$. Resolva a equação diferencial resultante para $U(a)$.

17. Mostre que $U(a)$ obtido é unitário, ou seja, $\langle\psi|U(a)\phi\rangle = \langle U^{-1}(a)\psi|\phi\rangle$ e relacione $\langle U\psi|U\phi\rangle$ com $\langle\psi|\phi\rangle$ de modo genérico.

18. Defina o operador da rotação α ao longo do eixo zz , $R(\alpha)$, por,

$$R(\alpha)\psi(r,\theta,\varphi) = \psi(r,\theta,\varphi-\alpha)\,.$$

Relacione a derivada $\frac{\partial R(\alpha)}{\partial\alpha}$ com o operador quântico de momento angular $L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$ e $R(\alpha)$. Resolva a equação diferencial resultante para $R(\alpha)$.

19. Mostre que $R(\alpha)$ obtido é unitário e relacione $\langle R\psi|R\phi\rangle$ com $\langle\psi|\phi\rangle$ de modo genérico.

20. Das seguintes simetrias diga quais as que mudam o tipo de partícula descrita pelo estado (simetrias internas):

    (a) Translação
    (b) Rotação
    (c) Translação no tempo
    (d) Rotação de cor nos quarks
    (e) Paridade
    (f) Rotação de isospin fraco
    (g) Inversão no tempo
    (h) Conjugação de Carga