

Teste 1

Disciplina: Mecânica Quântica
Professores António Amorim, Luís Bento

30 de Outubro de 2023

Número e Nome: _____

Esta secção é reservada ao avaliador:

| | | | | | |
|-----------|---|---|---|---|-------|
| Question: | 1 | 2 | 3 | 4 | Total |
| Points: | 5 | 5 | 5 | 5 | 20 |
| Score: | | | | | |

Assinatura: _____

O exame tem a duração de 2h acrescidas de 1 h de tolerância, num total de 3h. Se for pedida uma justificação, esta deverá ser resumida e a sua avaliação corresponde tipicamente a metade da cotação.

É expressamente proibido a utilização do telemóvel. O seu uso incorre na anulação imediata da prova.

Pode utilizar o verso das folhas como rascunho.

| | | |
|--|---|---|
| <ul style="list-style-type: none"> • $e^{i\theta} = \cos(\theta) + i \sin(\theta)$ • $\sin(\alpha + \beta) = \sin(\alpha) \cos(\beta) + \cos(\alpha) \sin(\beta)$ • $\cos(\alpha + \beta) = \cos(\alpha) \cos(\beta) - \sin(\alpha) \sin(\beta)$ • 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. $\langle \phi A\psi \rangle = \langle A\phi \psi \rangle$ | <ul style="list-style-type: none"> • $A \psi_\lambda\rangle = \lambda \psi_\lambda\rangle$ • $\psi\rangle = \sum_\lambda c_\lambda \psi_\lambda\rangle$ • $\rho(\lambda) = \langle \psi_\lambda \psi \rangle ^2 / \langle \psi \psi \rangle$ • $\langle A \rangle = \int \psi(x)^* A \psi(x) dx$ • $\sigma_A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}$ • $\sigma_x \sigma_p \geq \hbar/2$ • $\sigma_A \sigma_B \geq \frac{ \langle [A, B] \rangle }{2}$ • $\sigma_E \sigma_t \geq \frac{\hbar}{2}$ | <ul style="list-style-type: none"> • De Broglie $\lambda_B = 2\pi\hbar/p$ • $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ • $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$ • $\vec{p} = \hbar \vec{k}$ • $\psi_{\vec{k}}\rangle = \mathcal{N} e^{-i\vec{k}\vec{r}}$ • $H = \frac{p^2}{2m} + V(x, p)$ • $H \psi_E(\dots) = E \psi_E(\dots)$ • $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$ |
| <ul style="list-style-type: none"> • Caixa: • $\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(n\pi \frac{x}{l}\right)$ • $E_n = n^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2} \quad n = 1, \dots$ • Osc. Har. $V(x) = cx^2/2$ • $\omega = \sqrt{\frac{c}{m}} \quad l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ • $h_0(x) = \frac{1}{(\pi l^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2l^2}}$ • $h_1(x) = \frac{2x/l}{(4\pi l^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2l^2}}$ • $h_2(x) = \frac{2(x/l)^2 - 1}{(4\pi l^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2l^2}}$ • $h_3(x) = \frac{2(x/l)^3 - 3x/l}{(9\pi l^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2l^2}}$ • $E_n = \frac{1+2n}{2} \hbar\omega \quad n = 0, \dots$ | <ul style="list-style-type: none"> • $\vec{L} = -i\hbar \vec{r} \times \vec{\nabla}$ • $L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}; L_\pm = L_x \pm iL_y$ • $L_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m \quad m = -l \dots l$ • $L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m$ • $L_\pm Y_l^m = \sqrt{l(l+1) - m(m\pm 1)} \hbar Y_l^{m\pm 1}$ • $Y_0^0 = \sqrt{\frac{1}{4\pi}}$ • $rY_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} z$ • $rY_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (x \pm iy)$ • $r^2 Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (2z^2 - x^2 - y^2)$ • $r^2 Y_2^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{5}{8\pi}} z(x \pm iy)$ • $r^2 Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} (x \pm iy)^2$ | <ul style="list-style-type: none"> • $x = r \sin(\theta) \cos(\varphi)$ $y = r \sin(\theta) \sin(\varphi)$ $z = r \cos(\theta)$ • $V(r) = -\frac{e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 r}$ • $\psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$ • $E_n = -\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2 n^2} = -\frac{13.6\text{eV}}{n^2}$ • $R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$ • $R_{20} = \frac{2-r/a_0}{2\sqrt{2a_0^3}} e^{-\frac{r}{2a_0}}$ • $R_{21} = \frac{r/a_0}{2\sqrt{6a_0^3}} e^{-\frac{r}{2a_0}}$ • $V_Y = -C_Y \frac{e^{-\frac{m_B c^2}{\hbar c} r}}{r}$ Yukawa • $\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{i}{\hbar} \langle [H, A] \rangle + \langle \frac{\partial A}{\partial t} \rangle$ • $a^+ i\rangle = \sqrt{i+1} i+1\rangle$ |
| <ul style="list-style-type: none"> • $\hbar = 1.054571 \times 10^{-34}$ J.s • $\hbar = 6.58120 \dots \times 10^{-16}$ eV.s • $m_e = 9.109383 \dots \times 10^{-31}$ kg • $c = 2.99792 \times 10^8$ m/s • $1 \text{ eV} \approx 1.6 \times 10^{-19}$ J • $m_e c^2 \approx 511 \times 10^3$ eV • $e = 1.60217 \dots \times 10^{-19}$ C | <ul style="list-style-type: none"> • $m_p c^2 = 938 \times 10^6$ eV • $\epsilon_0 = 8.8541 \times 10^{-12}$ C²/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 • $\text{Å} = 10^{-10}$ m ; Fm = 10^{-15} m • $k_B = 8.617 \times 10^{-5}$ eV/K | <ul style="list-style-type: none"> • $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx = a \sqrt{\pi}$ • $\int_{-\infty}^{+\infty} x^{2n+1} e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx = 0$ • $\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\frac{x^2}{a^2}} dx = \frac{a^3}{2} \sqrt{\pi}$ • $\int_0^\infty r^n e^{-\frac{r}{a}} dr = n! a^{n+1} \quad a > 0$ • $1 \text{ eV} \cdot \text{nm} = 1 \text{ MeV} \cdot \text{Fm}$ • $E_\gamma = \hbar\omega, \omega = 2\pi f \text{ e } c = \lambda f$ |

Pergunta 1 (5 Valores)

Através da difração por de uma grelha regular de átomos medimos o comprimento de De Broglie, λ_B , de um feixe de electrões livres como $\lambda_B = 0.02$ nm. Qual o momento do feixe de electrões em eV/c e a sua energia cinética em eV? Considerando as relações de incerteza de Heisenberg, qual o desvio padrão mínimo associado ao comprimento de De Broglie σ_{λ_B} se , o desvio padrão da medição da posição σ_x for de 1mm, segundo o eixo do momento? Justifique. Sugestão: considere a propagação de incertezas numa função $f(x)$ como dada por $\sigma_f = \left| \frac{df}{dx} \right| \sigma_x$.

Resposta:

$p = \dots\dots\dots$ eV/c $E_c = \dots\dots\dots$ eV $\sigma_{\lambda_B} \geq \dots\dots\dots$ nm

Solution: $\lambda_B = 2\pi\hbar/p$ pelo que $p = 2\pi\hbar/\lambda_B$ ou seja $p = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda_B} = \frac{2\pi \times 197.327 \text{ eV}}{0.02} = 61992$ eV/c

$E_c = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{p^2 c^2}{2m_e c^2} = \frac{61992^2}{2 \times 511 \times 10^3} = 3670$ eV

Consideremos as relações de incerteza de Heisenberg,

$$\sigma_p \sigma_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

onde relacionamos σ_p com σ_{λ_B} por (formulário $\lambda_B = 2\pi\hbar/p$),

$$\sigma_p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda_B^2} \sigma_{\lambda_B}$$

ou seja

$$\sigma_{\lambda_B} = \frac{\lambda_B^2}{2\pi\hbar} \sigma_p$$

mas

$$\sigma_p \geq \frac{\hbar}{2\sigma_x}$$

pelo que,

$$\sigma_{\lambda_B} \geq \frac{\lambda_B^2}{2\pi\hbar} \frac{\hbar}{2\sigma_x} = \frac{\lambda_B^2}{4\pi\sigma_x} = \frac{0.02^2 \text{ nm}^2}{4\pi \times 10^6 \text{ nm}} = 3.1 \times 10^{-11} \text{ nm}$$

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

Pergunta 2 (5 Valores)

Considere uma partícula confinada a um poço de potencial infinito a duas dimensões. Sabendo que este poço tem uma forma quadrada, ou seja $l_x = l_y = l$. Quais as funções de onda e as densidades de probabilidade da partícula estar no centro do quadrado para todos os estados $\psi_{n_x n_y}$ correspondentes às energias $E_a = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ml^2}$ e $E_b = \frac{5\hbar^2 \pi^2}{2ml^2}$?

Resposta:

- a) ψ_{E_a} $\rho_a(\text{centro})$
 b) ψ_{E_b} $\rho_b(\text{centro})$

Solution: a) $E_a = \frac{\hbar^2 \pi^2}{ml^2}$ significa $E_a = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2}$ o que significa o estado fundamental $n_x = n_y = 1$.
 A função de onda é $\psi_{E_a} = \frac{2}{l} \sin\left(\pi \frac{x}{l}\right) \sin\left(\pi \frac{y}{l}\right)$
 O centro do quadrado está em $\left(\frac{l}{2}, \frac{l}{2}\right)$ onde a função de onda vale $\frac{2}{l} \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) = \frac{2}{l}$
 O módulo quadrado da função de onda no centro vale $\rho_a(\text{centro}) = 4/l^2$
 b) $E_b = \frac{5\hbar^2 \pi^2}{ml^2}$ significa $E_a = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2} + 2^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2}$ ou $E_a = 2^2 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ml^2}$ o que significa os estados $n_x = 1; n_y = 2$ ou $n_x = 2; n_y = 1$.
 A função de onda é $\psi_{E_b} = \frac{2}{l} \sin\left(2\pi \frac{x}{l}\right) \sin\left(\pi \frac{y}{l}\right)$ ou $\psi_{E_b} = \frac{2}{l} \sin\left(\pi \frac{x}{l}\right) \sin\left(2\pi \frac{y}{l}\right)$
 O centro do quadrado está em $\left(\frac{l}{2}, \frac{l}{2}\right)$ onde a função de onda vale $\frac{2}{l} \sin(\pi) \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0$ ou $\frac{2}{l} \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \sin(\pi) = 0$
 O módulo quadrado da função de onda no centro vale $\rho_b(\text{centro}) = 0$

.....

Pergunta 3 (5 Valores)

Considere um oscilador harmónico tridimensional isotrópico ($\omega_x = \omega_y = \omega_z = \omega$) com $l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} = 1$, que se encontra num estado estacionário com energia $E_n = \frac{5}{2}\hbar\omega$. a) Escreva todas as funções próprias $\psi_{n_x n_y n_z}$ associadas a essa energia. b) Por análise das expressões no formulário, escreva essas funções como combinações lineares das funções próprias de E, \vec{L}^2, L_z do tipo $\psi_{lm} = R_l(r)Y_l^m$ e c) diga qual a função $R_l(r)$ a menos de uma normalização $N(l)$. d) Quantas funções seriam a base para $E_n = \frac{7}{2}\hbar\omega$ (justifique)? Por contagem, diga se estes estados se podem escrever apenas como combinações de Y_2^m ou combinam também com Y_0^0 ?

Resposta:

- a) $\psi_{n_x n_y n_z} = \dots\dots\dots$ (várias funções)
- b) $\psi_{n_x n_y n_z} = \sum c_{lm} \psi_{lm} = \dots\dots\dots$ (várias funções)
- c) $R_l(r) = \dots\dots\dots$
- d) número = $\dots\dots\dots$, $l = \dots\dots\dots$

Solution: a) $\psi_{100} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/4}} x e^{-\frac{r^2}{2}}, \psi_{010} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/4}} y e^{-\frac{r^2}{2}}, \psi_{001} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/4}} z e^{-\frac{r^2}{2}}$
 b) como $rY_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} z, z = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} rY_1^0$ então $\psi_{001} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/4}} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r e^{-\frac{r^2}{2}} Y_1^0 = \sqrt{\frac{8}{3}} \frac{1}{\pi^{1/4}} r e^{-\frac{r^2}{2}} Y_1^0$
 como $rY_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (x \pm iy)$ então
 $x = \sqrt{\frac{2\pi}{3}} (rY_1^{-1} - rY_1^1)$ e $y = i\sqrt{\frac{2\pi}{3}} (rY_1^{-1} + rY_1^1)$
 pelo que $\psi_{100} = \frac{2}{\pi^{1/4}\sqrt{3}} (Y_1^{-1} - Y_1^1) r e^{-\frac{r^2}{2}}$
 e $\psi_{010} = i\frac{2}{\pi^{1/4}\sqrt{3}} (Y_1^{-1} + Y_1^1) r e^{-\frac{r^2}{2}}$
 c) $R_l(r) = N(l) r e^{-\frac{r^2}{2}}$
 d) $\psi_{200}, \psi_{020}, \psi_{002}, \psi_{110}, \psi_{101}, \psi_{011}$ sim têm combinação com Y_0^0

.....

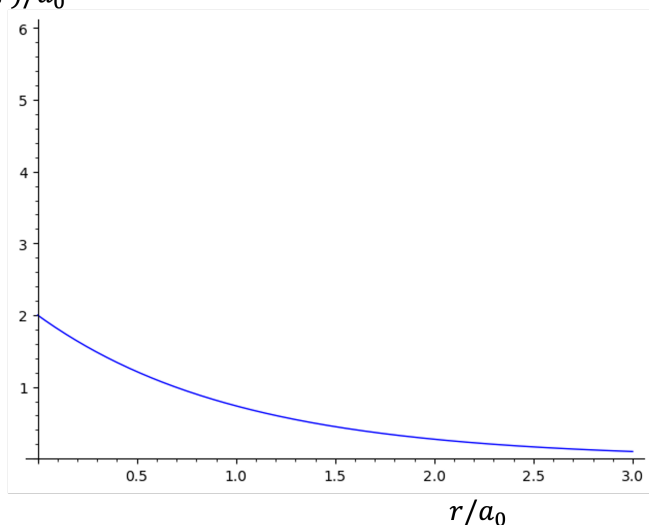
Pergunta 4 (5 Valores)

Num ião hidrogenoide um único electrão está ligado a um núcleo com Z prótons. Pode demonstrar-se que, para estes iões, as orbitais do electrão têm uma função de onda $\psi = Z^{3/2} R_{nl}(Zr) Y_l^m(\theta, \phi)$ onde a função radial do átomo de hidrogénio, $R_{nl}(r)$, está tabelada no formulário. Sabendo que, para $l = 0$, o hamiltoniano do ião é tal que $(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = \frac{\hbar^2}{m_e a_0})$,

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} (r\psi) + \frac{2Z}{a_0 r} \psi \right]$$

calcule a energia e o valor médio $\langle r^2 \rangle$ para o estado R_{10} do ião em função de a_0 e Z . (Note que a integração envolve $\int_r \dots r^2 dr$ e que estes integrais estão no formulário.) Represente na figura a função de onda radial R_{10} para o ião de Lítio com $Z=3$. A curva correspondente para o átomo de hidrogénio já esta representada. Justifique as respostas.

$R(r)/a_0^{3/2}$



Resposta: $E_1 = \dots\dots\dots$ e $\langle r \rangle = \dots\dots\dots$

Solution: $\psi = \frac{2Z^{3/2}}{\sqrt{a_0^3}} e^{-\frac{Zr}{a_0}} Y_0^0 = N e^{-\frac{Zr}{a_0}}$ ou seja

$$\begin{aligned} H\psi &= -N \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} \left(r e^{-\frac{Zr}{a_0}} \right) + \frac{2Z}{a_0 r} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \right] \\ &= -N \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(e^{-\frac{Zr}{a_0}} - \frac{Z}{a_0} r e^{-\frac{Zr}{a_0}} \right) + \frac{2Z}{a_0 r} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \right] \\ &= -N \frac{\hbar^2}{2m} \left[-\frac{2Z}{a_0 r} e^{-\frac{Zr}{a_0}} + \left(\frac{Z}{a_0} \right)^2 e^{-\frac{Zr}{a_0}} + \frac{2Z}{a_0 r} e^{-\frac{Zr}{a_0}} \right] \\ &= -\frac{\hbar^2 Z^2}{2m a_0^2} N e^{-\frac{Zr}{a_0}} \end{aligned}$$

peço que a energia é $E_1 = -\frac{\hbar^2 Z^2}{2m a_0^2}$

O valor médio é:

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\langle \psi | r^2 \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{|N|^2 \int_0^\infty r^4 e^{-\frac{r}{2Z}} dr}{|N|^2 \int_0^\infty r^2 e^{-\frac{r}{2Z}} dr}$$

(ou $|N|^2 = \frac{4Z^3}{a_0^3}$)

$$\langle r^2 \rangle = \frac{4!(a_0/2Z)^5}{2!(a_0/2Z)^3} = \frac{24a_0^2}{2 \cdot 2^2 Z^2} = 3 \frac{a_0^2}{Z^2}$$

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....

.....