# Teste 1

Disciplina: Mecânica Quântica
Professores António Amorim, Jorge Sampaio, Edgar Cravo

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.

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

- 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. $V(x) = c\,x^2/2$
- $\omega = \sqrt{\frac{c}{m}} \qquad l = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$
- $h_0(x) = \frac{1}{(\pi l^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2l^2}}$
- $h_1(x) = \frac{2x/l}{(4\pi l^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2l^2}}$
- $h_2(x) = \frac{2(x/l)^2 - 1}{(4\pi l^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2l^2}}$
- $h_3(x) = \frac{2(x/l)^3 - 3x/l}{(9\pi l^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{2l^2}}$
- $E_n = \frac{1+2n}{2}\hbar\omega \quad n = 0, \ldots$

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

- $x = r\sin(\theta)\cos(\varphi)$
  $y = r\sin(\theta)\sin(\varphi)$
  $z = r\cos(\theta)$
- $V(r) = -\frac{e^2 Z}{4\pi\epsilon_0 r}$
- $\psi_{nlm} = R_{nl}(r)\, Y_l^m(\theta, \varphi)$
- $E_n = -\frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2 n^2} = -\frac{13.6eV}{n^2}$
- $R_{10} = \frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$
- $R_{20} = \frac{2 - r/a_0}{2\sqrt{2a_0^3}} e^{-\frac{r}{2a_0}}$
- $R_{21} = \frac{r/a_0}{2\sqrt{6a_0^3}} e^{-\frac{r}{2a_0}}$
- $V_Y = -C_Y \frac{e^{-\frac{m_B c^2}{\hbar c} r}}{r}$ 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

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

**Pergunta 1** (5 Valores)

Através da difração por de uma grelha regular de átomos medimos o comprimento de De Broglie, $\lambda_B$, de um feixe de eletrões livres como $\lambda_B = 0.05$ nm com uma incerteza quântica de $\frac{\sigma_{\lambda_B}}{\lambda_B} = 10^{-8}$ . Qual o momento do feixe de eletrões em eV/c e a sua energia cinética em eV? Considerando as relações de incerteza de Heisenberg, qual o desvio padrão mínimo com que podemos medir simultaneamente a posição do eletrão (em mm) 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:

$p =$ ......... eV/c $E_c =$ ......... eV $\sigma_x \geq$ ............... mm

**Solution:** $\lambda_B = 2\pi\hbar/p$ pelo que $p = 2\pi\hbar/\lambda_B$ ou seja $p = \frac{2\pi\hbar c}{\lambda_B c} = \frac{2\pi\times 197.327}{0.05}\frac{eV}{c} = 24797$ eV/c

$E_c = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{p^2 c2}{2m_e c^2} = \frac{2480^2}{2\times 511\times 10^3}$=602 eV

Consideremos as relações de incerteza de Heisenberg,

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

onde relacionamos $\sigma_p$ com $\sigma_{\lambda_B}$ por (formulário $\lambda_B = 2\pi\hbar/p$),

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

pelo que,

$$\sigma_x \geq \frac{\lambda_B}{4\pi}\frac{\lambda_B}{\sigma_{\lambda_B}}$$

ou seja,

$$\sigma_x \geq 10^8 \cdot \frac{\lambda_B}{4\pi} = 10^8 \frac{0.05}{4\pi} nm = 0,398mm$$

........................................................................................
........................................................................................
........................................................................................
........................................................................................
........................................................................................
........................................................................................
........................................................................................
........................................................................................

**Pergunta 2** (5 Valores)

Considere um eletrão confinado num poço de potencial infinito a duas dimensões. Sabendo que este poço tem uma forma quadrada, ou seja $l_x = l_y = 0.1$ nm. Quais as funções de onda e as densidades de probabilidade de a partícula estar no centro do quadrado para todos os estados $\psi_{n_x n_y}$ correspondentes à energia $E_a = 188\,\text{eV}$? (Considere todos os estados possíveis)

Resposta:( unidades associadas a 1 nm)

a) $\psi_{E_a}$ ........................................ $\text{nm}^{-1}$ $\rho_a(\text{centro})$ .................. $\text{nm}^{-2}$

**Solution:** $E_b = \left(n_x^2 + n_y^2\right) \frac{\hbar^2 \pi^2}{2 m_e l^2}$ significa $E_b = \left(n_x^2 + n_y^2\right) \frac{\hbar^2 c^2 \pi^2}{2 m_e c^2 l^2}$ ou
$E_b = \left(n_x^2 + n_y^2\right) \frac{197.327^2 \pi^2}{2 \times 511 \times 10^3 \times 10^{-2}}$ ou $E_b = \left(n_x^2 + n_y^2\right) 37.6\,\text{eV}$
o que significa os estados $n_x^2 + n_y^2 = 5; n_x = 1; n_y = 2$ ou $n_x = 2; n_y = 1$ .
A função de onda é $\psi_{E_b} = 20 \sin(20\pi x) \sin(10\pi y)$ ou $\psi_{E_b} = 20 \sin(10\pi x) \sin(20\pi y)$
O centro do quadrado está em $(0,05, 0,05)$ onde a função de onda vale $20 \sin(\pi) \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) = 0$ ou $20 \sin\left(\frac{\pi}{2}\right) \sin(\pi) = 0$
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, verifica-se que essas funções são combinações lineares das funções próprias de $E, \vec{L}^2, L_z$ do tipo $\psi_{lm} = R_l(r)Y_l^m$. Pelo estudo da expansão em $\psi_{lm} = R_l(r)Y_l^m$ qual a probabilidade de um oscilador no estado $n_z = 1$ realizar uma medição de $L_z$ e ter $m_l = \pm 1$? Qual seria a probabilidade de ter $m_z = 0$?

c) Escreva $\psi_{100}$ como combinação linear de $R_l(r)Y_l^m$. Para estados de $n_z = 0$ qual a probabilidade de observar $m_l = 0$?

d) Calcule o quociente das probabilidades de medir $m_z = 1$ e $m_z = -1$ tendo notando, em particular, os fatores que cancelam neste coeficiente. Tendo em consideração a alínea c) quais as probabilidades de medição dos diferentes valores de $m_z$ neste caso?

Resposta:

a) $\psi_{n_x n_y n_z} = \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots$(várias funções)

b) $P_{n_z=1}(m_l = 1) = \ldots\ldots\ldots P_{n_z=1}(m_l = -1) = \ldots\ldots\ldots\ldots P_{n_z=1}(m_l = 0) = \ldots\ldots\ldots$

c) $P_{n_z=0}(m_l = 0) = \ldots\ldots\ldots$

d) $P^1_{\psi_{100}}/P^{-1}_{\psi_{100}} = \ldots\ldots P_{\psi_{100}}(m_l = 0) = \ldots\ldots P_{\psi_{100}}(m_l = 1) = \ldots\ldots P_{\psi_{100}}(m_l = -1) = \ldots\ldots$

**Solution:** a) $\psi_{100} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/4}} x e^{-\frac{r^2}{2}}$ ,$\psi_{010} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/4}} y e^{-\frac{r^2}{2}}$,$\psi_{001} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/4}} z e^{-\frac{r^2}{2}}$função própria de $L_z$ com $m = 0 \neq \pm 1$. Pela ortogonalidade dos harmónicos esféricos $\langle \psi_{001} | Y_1^1 \rangle = \langle \psi_{001} | Y_1^{-1} \rangle = 0$ portanto $P_{n_z=1}(m_l = 1) = 0 P_{n_z=1}(m_l = -1) = 0 P_{n_z=1}(m_l = 0) = 1$

b) como $rY_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} z$ , $z = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} rY_1^0$ então $\psi_{001} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^{3/4}} \sqrt{\frac{4\pi}{3}} r e^{-\frac{r^2}{2}} Y_1^0 = \sqrt{\frac{8}{3}} \frac{1}{\pi^{1/4}} r e^{-\frac{r^2}{2}} Y_1^0$

c) como $rY_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (x \pm iy)$ então

$x = \sqrt{\frac{2\pi}{3}} \left( rY_1^{-1} - rY_1^1 \right)$ e $y = i \sqrt{\frac{2\pi}{3}} \left( rY_1^{-1} + rY_1^1 \right)$

pelo que $\psi_{100} = \frac{2}{\pi^{1/4}\sqrt{3}} \left( Y_1^{-1} - Y_1^1 \right) r e^{-\frac{r^2}{2}}$

e $\psi_{010} = i \frac{2}{\pi^{1/4}\sqrt{3}} \left( Y_1^{-1} + Y_1^1 \right) r e^{-\frac{r^2}{2l^2}}$

portanto $\langle \psi_{100} | Y_1^0 \rangle = \langle \psi_{010} | Y_1^0 \rangle = 0$ e, portanto $P_{n_z=0}(m_l = 0) = 0$

d)

$$P^1_{\psi_{100}}/P^{-1}_{\psi_{100}} = \frac{|\langle N R_l Y_1^1 | \psi_{100} \rangle|^2}{|\langle N R_l Y_1^{-1} | \psi_{100} \rangle|^2} = \frac{|\int N \frac{2}{\pi^{1/4}\sqrt{3}} r^2 e^{-r^2} Y_1^{*1} \left( Y_1^{-1} - Y_1^1 \right) dV|^2}{|\int N \frac{2}{\pi^{1/4}\sqrt{3}} r^2 e^{-r^2} Y_1^{*-1} \left( Y_1^{-1} - Y_1^1 \right) dV|^2} = 1$$

ou seja tudo cancela exceto os produtos internos de harmónicos esféricos que, por ortogonalidade têm o quociente $1^2/(-1)^2 = 1$ pelo que $P^1_{\psi_{100}}/P^{-1}_{\psi_{100}} = 1$ e $P_{\psi_{100}}(m_l = 0) = 0$ pelo que $P_{\psi_{100}}(m_l = 1) = 1/2 P_{\psi_{100}}(m_l = -1) = 1/2$.

..........................................................................................

..........................................................................................

..........................................................................................

..........................................................................................

..........................................................................................

..........................................................................................

..........................................................................................

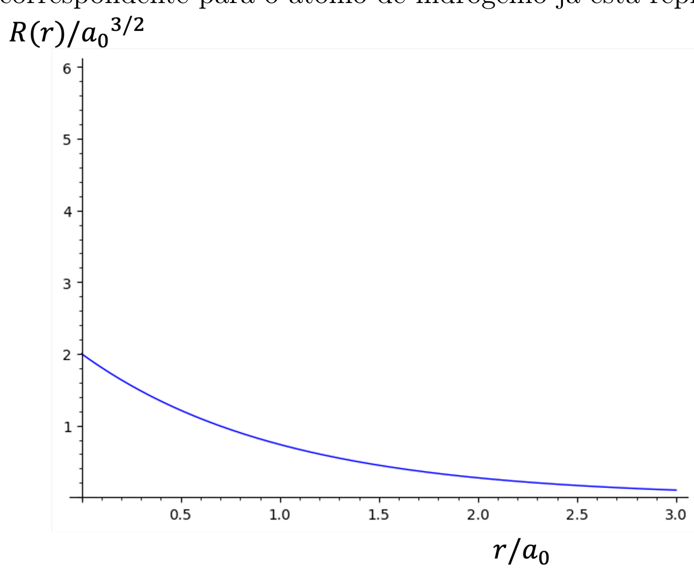
..........................................................................................

**Pergunta 4** (5 Valores)

Num ião hidrogenoide um único eletrão está ligado a um núcleo com $Z$ protões. Pode demonstrar-se que, para estes iões, as orbitais do eletrão 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 Hamiltoneano 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 $< r >$ para o estado fundamental do ião em função de $a_0$ e $Z$.( Note que a integração envolve $\int_r \cdots r^2\, dr$ e que estes integrais estão no formulário.) Esboce na figura a função de onda radial com $n = 1, l = 0$ para o ião de Hélio com Z=2. A curva correspondente para o átomo de hidrogénio já esta representada. Justifique as respostas.




Resposta: $E_1 =$ ......... e $< r >=$ .........

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

$$\begin{aligned}
H\psi &= -N\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}\left(re^{-\frac{Zr}{a_0}}\right) + \frac{2Z}{a_0 r}e^{-\frac{Zr}{a_0}}\right] \\
&= -N\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{r}\frac{d}{dr}\left(e^{-\frac{Zr}{a_0}} - \frac{Z}{a_0}re^{-\frac{Zr}{a_0}}\right) + \frac{2Z}{a_0 r}e^{-\frac{Zr}{a_0}}\right] \\
&= -N\frac{\hbar^2}{2m}\left[-\frac{2Z}{a_0 r}e^{-\frac{Zr}{a_0}} + \left(\frac{Z}{a_0}\right)^2 e^{-\frac{Zr}{a_0}} + \frac{2Z}{a_0 r}e^{-\frac{Zr}{a_0}}\right] \\
&= -\frac{\hbar^2 Z^2}{2ma_0^2}Ne^{-\frac{Zr}{a_0}}
\end{aligned}$$

pelo que a energia é $E_1 = -\frac{\hbar^2 Z^2}{2ma_0^2}$

O valor médio é:

$$< r >= \frac{\langle\psi|r\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \frac{|N|^2\int_0^\infty r^3 e^{-\frac{r}{\frac{a_0}{2Z}}}\,dr}{|N|^2\int_0^\infty r^2 e^{-\frac{r}{\frac{a_0}{2Z}}}\,dr}$$

pelo que $|N|^2 = \frac{4Z^3}{a_0^3}$

$$< r >= \frac{3!(a_0/2Z)^4}{2!(a_0/2Z)^3} = \frac{6a_0}{2\cdot 2Z} = \frac{3a_0}{2Z}$$