Mecânica Quântica 1º Exame (21/1/2008)

I

1. Falso. Os valores próprios dum operador Hermítico são reais

2. Verdadeiro $x \propto (A + A^+)$ e $\langle n|A|n\rangle = 0$; $\langle n|A^+|n\rangle = 0$

3. Verdadeiro. $\langle \psi|H|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} E_n |A_n|^2 = E_0 |A_0|^2 + \sum_{n=1}^{\infty} E_n |A_n|^2$

$$= E_0 \left(1 - \sum_{n=1}^{\infty} |A_n|^2\right) + \sum_{n=1}^{\infty} E_n |A_n|^2$$

$$= E_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \underbrace{(E_n - E_0)}_{\geq 0} |A_n|^2 \geq E_0$$

4. Verdadeiro $\left[(A+B)^2\right]^+ = (A+B)^+(A+B)^+ = (A+B)^2$

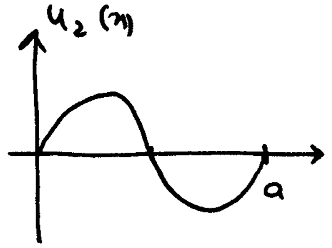
II

1. $\psi_a(x,0)$ é um estado próprio da energia com $E = E_2$. A função $u_2(x)$ está normalizada. logo

$$|A| = 1$$

$$\langle E \rangle = E_2$$

2. Resposta óbvia $u_2(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right)$



logo $\langle x \rangle = \frac{1}{2} a$

Resposta com contas

$$\langle x\rangle = \int_0^a dx\, x\, u_2^2(x)\, |A|^2 \qquad (|A|^2=1)$$

$$= \frac{2}{a}\int_0^a dx\, x \sin^2\left(2\frac{\pi x}{a}\right)$$

$$y = \frac{2\pi x}{a} \Rightarrow x = \frac{a}{2\pi} y \;;\; dx = \frac{a}{2\pi} dy$$

$$\langle x\rangle = \left(\frac{2}{a}\right)\left(\frac{a}{2\pi}\right)^2 \int_0^{2\pi} dy\, y \sin^2 y$$

$$= \frac{1}{2} a \frac{1}{\pi^2}\left[\frac{y^2}{4} - \frac{y \sin 2y}{4} - \frac{\cos 2y}{8}\right]_0^{2\pi}$$

$$= \frac{1}{2} a \frac{1}{\pi^2}\pi^2 = \frac{1}{2} a .$$

3. $\psi_b = \sum_n A_n u_n(x)$

$A_1 = A_3 = B$

$A_2 = C$

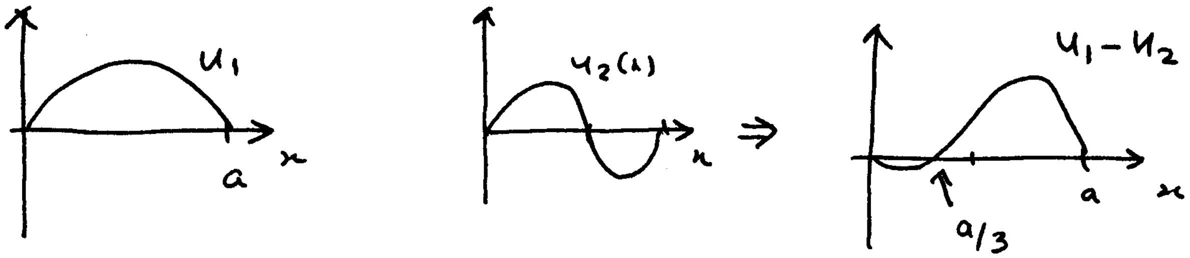
$A_n = 0 \quad n \geqslant 3$

$$\left.\begin{array}{l} \sum_{n=1}^{\infty} |A_n|^2 = 1 \Rightarrow 2|B|^2 + |C|^2 = 1 \\ P(E=E_2) = \frac{1}{2} \Rightarrow |C|^2 = \frac{1}{2} \end{array}\right\} |B|^2 = \frac{1}{4}$$

Logo $\quad B = \frac{1}{2} \;;\; C = \frac{1}{\sqrt{2}}$

4. <u>Sem contas</u>

$$\sum_n |A_n|^2 = 1 \Rightarrow |D| = \frac{1}{\sqrt{2}} \Rightarrow D = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}$$



Logo $\boxed{D = -\frac{1}{\sqrt{2}}}$

<u>Com contas</u>

$$|D| = \frac{1}{2}$$

$$\int_0^{a/2} dx \left(\frac{1}{\sqrt{2}} u_1(x) + D\, u_2(x) \right)^2$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2}\int_0^{a/2} dx\, u_1^2(x)}_{I_1} + \underbrace{\frac{1}{2}\int_0^{a/2} dx\, u_2^2(x)}_{I_2} + \sqrt{2}\, D \underbrace{\int_0^{a/2} dx\, u_1(x)\, u_2(x)}_{I_3}$$

$$I_1 = \frac{1}{2}\left(\frac{2}{a}\right) \int_0^{a/2} dx \sin^2 \frac{\pi x}{a} = \frac{1}{2}\left(\frac{2}{a}\right)\left(\frac{a}{\pi}\right) \int_0^{\pi/2} dy \sin^2 y$$

$$= \frac{1}{\pi} \left[\frac{1}{2} y - \frac{1}{4} \sin 2y \right]_0^{\pi/2} = \frac{1}{\pi} \frac{\pi}{4} = \frac{1}{4}$$

$$I_2 = \frac{1}{2}\left(\frac{2}{a}\right) \int_0^{a/2} dx \sin^2 \frac{2\pi x}{a} = \frac{1}{2}\left(\frac{2}{a}\right) \frac{a}{2\pi} \int_0^{\pi} dy \sin^2 y$$

$$= \frac{1}{4}$$

$$I_3 = \sqrt{2}D\left(\frac{2}{a}\right)\int_0^{a/2} dx \sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi x}{a}$$

$$= \sqrt{2}D\left(\frac{2}{a}\right)\frac{a}{\pi}\int_0^{\pi/2} dy \sin y \sin 2y$$

$$= \sqrt{2}D\,\frac{2}{\pi}\left[\frac{1}{2}\sin y - \frac{1}{6}\sin 3y\right]_0^{\pi/2}$$

$$= \sqrt{2}D\,\frac{2}{\pi}\left[\frac{1}{2}+\frac{1}{6}\right] = \sqrt{2}D\,\frac{2}{\pi}\,\frac{2}{3} = \frac{\sqrt{2}D\,4}{\pi\,3}$$

$$P(0<x<a/2) = \frac{1}{2} + \frac{4\sqrt{2}}{3\pi}D$$

Como $P(0<x<a)=1$ temos

$$P(a/2<x<a) = \frac{1}{2} - \frac{4\sqrt{2}}{3\pi}D$$

e

$$P(0<x<a/2) < P(a/2<x<a) \Rightarrow D<0$$

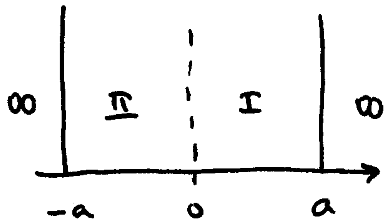
Logo

$$\boxed{D = -\frac{1}{\sqrt{2}}}$$

III

1. O problema tem simetria $x \to -x$. Logo $[H, P]=0$ e as funções próprias são funções simultâneas de Paridade: pares ou ímpares.

2.



$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Solução par

$$\begin{cases} u_I(x) = A \sin kx + B \cos kx & 0<x<a \\ u_{II}(x) = -A \sin kx + B \cos kx & -a<x<0 \end{cases}$$

Em $x=a$

$$A \sin ka + B \cos ka = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{B}{A} = -\tan ka$$

E $x=0$

$$u'_I(0) - u'_{II}(0) = \frac{\lambda}{a} u_I(0)$$

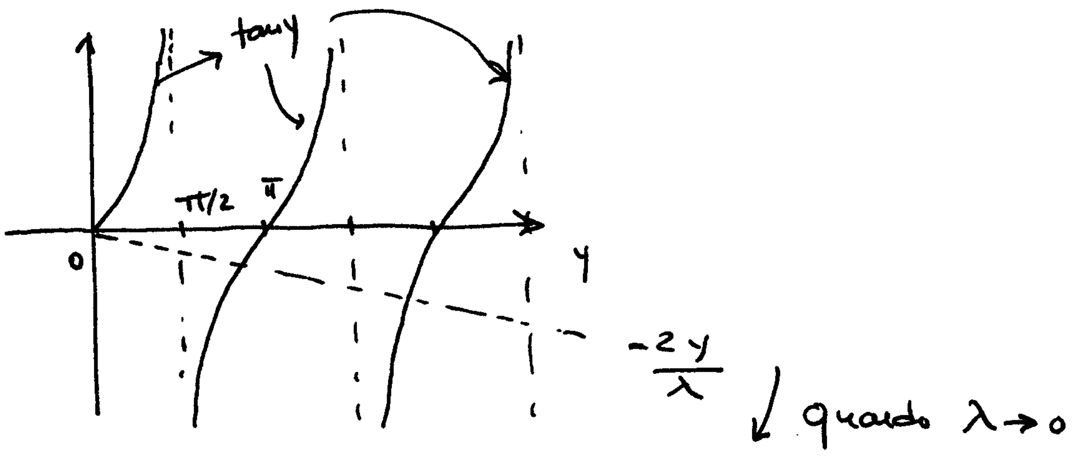
ou

$$Ak - (-Ak) = \frac{\lambda}{a} B \quad \Rightarrow \quad \frac{B}{A} = \frac{2ka}{\lambda}$$

Donde

$$\boxed{\tan ka = -\frac{2ka}{\lambda}}$$

3. Seja $y = ka$. Então a equação é $\tan y = -\dfrac{2y}{\lambda}$



Do gráfico verifica-se que há sempre solução e que quando $\lambda \to 0$ a solução é $y = \pi/2 \Rightarrow ka = \pi/2$. Então

$$E_0 = \frac{k^2\hbar^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{8ma^2} = E_+$$

4. Solução ímpar

$$\begin{cases} u_I(x) = A\sin kx + B\cos kx & 0<x<a \\ u_{II}(x) = A\sin kx - B\cos kx & -a<x<0 \end{cases}$$

Em $x=0$

$$u'_I(0) - u'_{II}(0) = \frac{\lambda}{a} u_I(0) = 0$$

$$u_I(0) = u_{II}(0) \Rightarrow \boxed{B=0}$$

Em $x=a$ (tomando $B=0$)

$$A\sin ka = 0 \Rightarrow ka = n\pi \qquad n=1,2\ldots$$

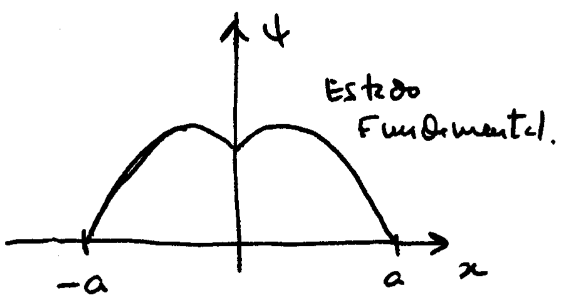
O estado mais baixo é $n=1$

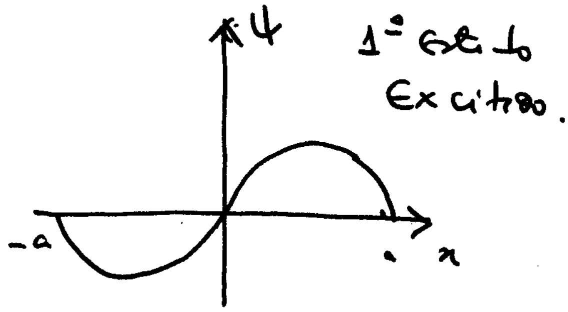
$$E_1 = \frac{\hbar^2k^2}{2m} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2} = E_-$$

A energia é igual à do estado $u_-(x)$. Do gráfico anterior pode verificar-se que a solução do estado fundamental tem sempre

$$\frac{\pi}{2} < y < \pi \Rightarrow E_1 > E_0 \quad \forall \lambda$$

5.





6. $\underline{E<0}$. Para o estado fundamental deve ser uma solução par.

$$\begin{cases} u_I(x) = A\sinh\alpha x + B\cosh\alpha x & 0<x<a \\ u_{II}(x) = -A\sinh\alpha x + B\cosh\alpha x & -a<x<0 \end{cases}$$

Com $\alpha = \sqrt{\dfrac{2m|E|}{\hbar^2}}$.

<u>Em x=a</u>

$$A\sinh\alpha a + B\cosh\alpha a = 0 \Rightarrow \frac{B}{A} = -\tanh\alpha a$$

<u>Em x=0</u>

$$u_I'(0) - u_{II}'(0) = \frac{\lambda}{a}\, u_I(0)$$

$$\alpha A - (-\alpha A) = \frac{\lambda}{a} B \Rightarrow \frac{B}{A} = \frac{2\alpha a}{\lambda}$$

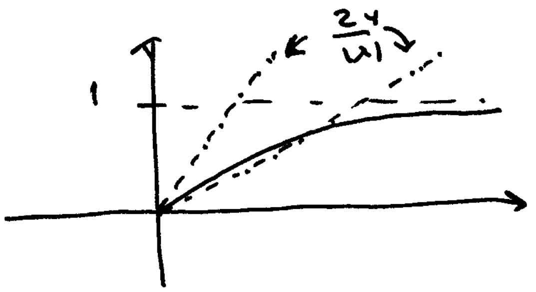
logo

$$\boxed{\tanh\alpha a = -\frac{2\alpha a}{\lambda}}$$

Seja $\lambda = -|\lambda|$. Então

$$\boxed{\tanh\alpha a = \frac{2\alpha a}{|\lambda|}}$$

Tomemos $y=\alpha a \Rightarrow \tanh y = \dfrac{2y}{|\lambda|}$



Para haver solução

$$(\tanh y)'_{y=0} > \left(\frac{2y}{|\lambda|}\right)' = \frac{2}{|\lambda|}$$

$$\Rightarrow |\lambda| > 2 = \lambda_0$$

IV

1. Falso. Dois spin 1 podem estar nos estados ($m=0$)

$$|2,0\rangle \; ; \; |1,0\rangle \; ; \; |0,0\rangle$$
$$L^2 = 6\hbar^2 \qquad L^2 = 2\hbar^2 \; ; \quad L^2 = 0$$

2. Falso. Depois da 1ª medição o estado colapsa para uma combinação linear de $|1,1\rangle$ e $|1,-1\rangle$ com igual probabilidade. Portanto $P(L_z = -\hbar) = \frac{1}{2}$.

3. Verdadeiro $\quad \sin 2\varphi = \frac{1}{2i}\left(e^{2i\varphi} - e^{-2i\varphi}\right) \Rightarrow \psi = C\, e^{-r^2/r_0}\left(Y_{2,2} - Y_{2,-2}\right)$

$$P(L_z = 2\hbar) = P(L_z = -2\hbar) = \frac{1}{2}$$

4. Falso $\quad$ « Energia é proporcional a Z^2.

V

1. $\quad L_z|l,m\rangle = m\hbar|l,m\rangle$

logo
$$\langle l,m|L_z^2|l,m\rangle = \hbar m \langle l,m|L_z|l,m\rangle = \hbar^2 m^2 \underbrace{\langle l,m|l,m\rangle}_{=1}$$
$$= \hbar^2 m^2$$

2. É mais fácil tomar $m=0$ desde o início. Usando

$$L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)$$

obtemos sucessivamente

$$L_x|l,0\rangle = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)|l,0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\sqrt{l(l+1)}\left(|l,1\rangle + |l,-1\rangle\right)$$

$$L_z L_x|l,0\rangle = \frac{1}{2}\hbar^2\sqrt{l(l+1)}\,|l,1\rangle - \frac{1}{2}\hbar^2\sqrt{l(l+1)}\,|l,-1\rangle$$

e

$$L_x L_z L_x |l,0\rangle = \frac{1}{2}(L_+ + L_-) L_z L_x |l,0\rangle$$

$$= \frac{1}{4}\hbar^2 \sqrt{l(l+1)}\,(L_+ + L_-)|l,1\rangle - \frac{1}{4}\hbar^2\sqrt{l(l+1)}\,(L_+ + L_-)|l,-1\rangle$$

$$= \frac{1}{4}\hbar^3 \sqrt{l(l+1)}\sqrt{l(l+1)-2}\;|l,2\rangle$$

$$+\frac{1}{4}\hbar^2\,\cancel{l(l+1)}\,|l,0\rangle$$

$$-\frac{1}{4}\hbar^2\,\cancel{l(l+1)}\,|l,0\rangle$$

$$-\frac{1}{4}\hbar^3 \sqrt{l(l+1)}\sqrt{l(l+1)-2}\;|l,-2\rangle$$

e finalmente

$$\langle l,0|L_x L_z L_z|l,0\rangle = \frac{1}{4}\hbar^3\sqrt{l(l+1)}\sqrt{l(l+1)-2}\,\Big[\langle l,0|l,2\rangle - \langle l,0|l-2\rangle\Big]$$

$$= 0$$ (devido à ortogonalidade dos estados $|l,m\rangle$)

VI

1. $E_0^{(0)} = 0$. A correcção de 1ª ordem será (o estado não é degenerado)

$$E_0^{(1)} = \langle\psi_0|H_1|\psi_0\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\varphi\, V_0 \cos 2\varphi$$

$$= \frac{V_0}{2\pi}\left[\frac{1}{2}\sin 2\varphi\right]_0^{2\pi} = 0$$

2. O primeiro estado excitado é degenerado. Assim temos de usar teoria de perturbação para o caso degenerado.

temos os estados $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_{-1}\rangle$ com a mesma energia.
Construímos a matriz

$$H^{(1)}_{ij} = \langle \psi_i | H_1 | \psi_j \rangle \qquad i, j = -1, 1$$

Temos:

$$\langle \psi_1 | H_1 | \psi_1 \rangle = \frac{1}{2\pi} V_0 \int_0^{2\pi} d\varphi \, e^{-i\varphi} \cos 2\varphi \, e^{i\varphi}$$

$$= \frac{1}{2\pi} V_0 \int_0^{2\pi} d\varphi \cos 2\varphi = 0$$

Igualmente.

$$\langle \psi_{-1} | H_1 | \psi_{-1} \rangle = \frac{1}{2\pi} V_0 \int_0^{2\pi} d\varphi \, e^{i\varphi} \cos 2\varphi \, e^{-i\varphi} = 0$$

isto é, os termos diagonais anulam-se. Calculemos os outros elementos:

$$\langle \psi_{-1} | H_1 | \psi_1 \rangle = \frac{1}{2\pi} V_0 \int_0^{2\pi} d\varphi \, e^{i\varphi} \, \frac{e^{i2\varphi} + e^{-i2\varphi}}{2} \, e^{i\varphi}$$

$$= \frac{V_0}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \left[e^{i4\varphi} + 1 \right] = \frac{V_0}{4\pi} \left[0 + 2\pi \right] = \frac{V_0}{2}$$

Igualmente

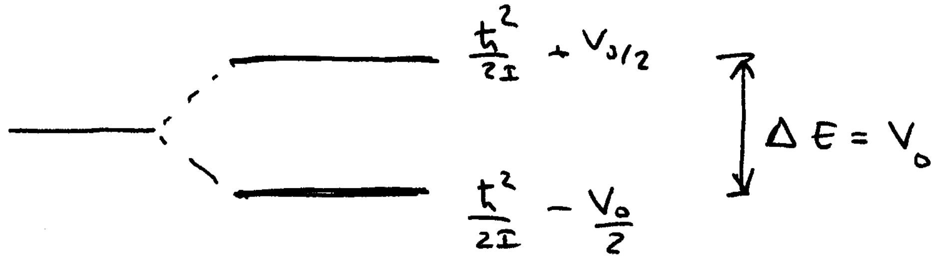
$$\langle \psi_1 | H_1 | \psi_{-1} \rangle = \frac{V_0}{2}$$

e podemos escrever

$$H^{(1)} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{V_0}{2} \\ \frac{V_0}{2} & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow \lambda^2 - \left(\frac{V_0}{2}\right)^2 = 0 \Rightarrow \lambda = \pm \frac{V_0}{2}$$

e portanto o 1º estado excitado deixará de ser degenerado tendo energias

$$E^{(1)} = \frac{\hbar^2}{2I} \pm \frac{V_0}{2}$$



3. $$E_0^{(2)} = \sum_{k\neq 0} \frac{|\langle \psi_0 | H_1 | \psi_k \rangle|^2}{0 - E_k^{(0)}}$$

Da resposta da alínea anterior deve ser claro que só os estados com $k = \pm 2$ devem contribuir. De facto

$$\langle \psi_0 | H_1 | \psi_k \rangle = \frac{V_0}{2\pi} \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} d\varphi \, e^{ik\varphi} \left(e^{2i\varphi} + e^{-2i\varphi} \right)$$

$$= \frac{V_0}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \, e^{i(k+2)\varphi} + \frac{V_0}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \, e^{i(k-2)\varphi}$$

$$= \frac{V_0}{2} \left[\delta_{k,2} + \delta_{k,-2} \right]$$

Assim

$$E_0^{(2)} = - \frac{1}{\frac{4\hbar^2}{2I}} \left(\frac{V_0}{2} \right)^2 - \frac{1}{\frac{4\hbar^2}{2I}} \left(\frac{V_0}{2} \right)^2 = - \frac{1}{4} \frac{V_0^2 I}{\hbar^2}$$

VII

1. Definimos o spin total

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \Rightarrow \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2} \left(S^2 - S_1^2 - S_2^2 \right)$$

o campo $\vec{B}$ define o eixo dos zz pelo que o Hamiltoniano se pode escrever

$$H = V_0 \left[\frac{1}{2\hbar^2} \left(S^2 - S_1^2 - S_2^2 \right) + \eta \frac{1}{\hbar} S_z \right]$$

com $\eta = \frac{\mu_B B}{V_0}$. Temos ainda $S_1^2 = S_2^2 = \frac{3}{4}\hbar^2$ (spin 1/2)

e S pode tomar os valores 0 (singleto) e 1 (tripleto).

Assim o Hamiltoniano é diagonal na base $|S, m_S\rangle$ do spin total com

$$S^2 |S, m_S\rangle = \hbar^2 S(S+1) |S, m_S\rangle$$

$$S_z |S, m_S\rangle = \hbar m_S |S, m_S\rangle$$

e portanto os seus valores próprios são:

$$H|S, m_S\rangle = V_0 \left[\frac{1}{2} \left(S(S+1) - \frac{3}{2} \right) + \eta m_S \right] |S, m_S\rangle$$

Há 4 estados:

Singleto $|0,0\rangle$

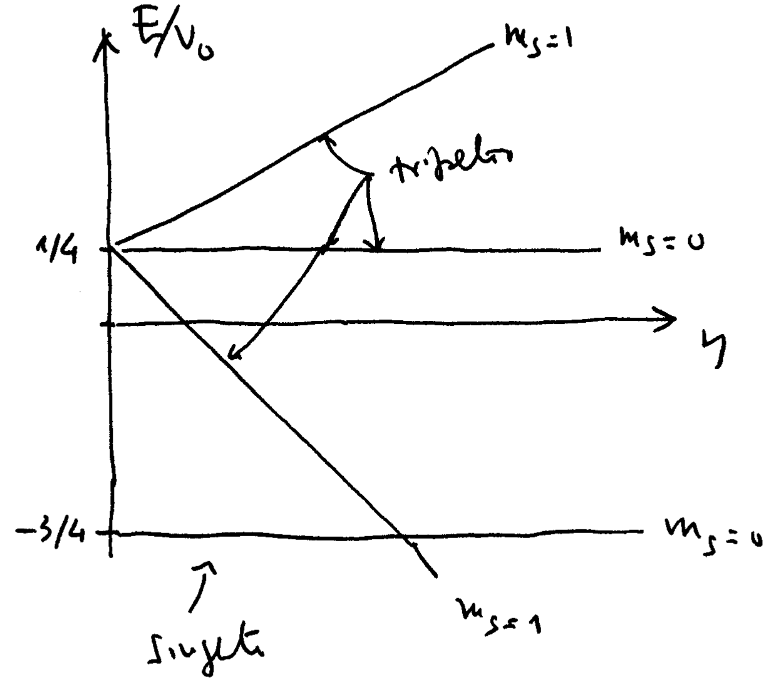
$$H|0,0\rangle = V_0 \left[-\frac{3}{4} \right] |00\rangle$$

Tripleto $|1,1\rangle$, $|1,0\rangle$ e $|1,-1\rangle$

$$H|1,1\rangle = V_0 \left[\frac{1}{4} + \eta \right] |1,1\rangle$$

$$H|1,0\rangle = V_0 \frac{1}{4} |1,0\rangle$$

$$H|1,-1\rangle = V_0 \left[\frac{1}{4} - \eta \right] |1,-1\rangle$$



2. Para um dos valores de B o estado $|1,-1\rangle$ intersecta o singleto. Isso acontece quando

$$-\frac{3}{4}V_0 = V_0\left[\frac{1}{4} - \eta\right] \Rightarrow \eta = 1 \Rightarrow B = \frac{V_0}{\mu_B}$$

<u>Nota</u>: o estado $|1,1\rangle$ também intersecta o estado singleto para $\eta = -1$. Contudo esta solução não faz sentido para o nosso problema. Não há um eixo dos z definido <u>à priori</u> <u>antes</u> da aplicação do campo $\vec{B}$. Se houvesse, isso seria <u>outro</u> problema, em que se tinha alinhado o spin total <u>antes</u> da aplicação do campo $\vec{B}$, o que não é dito no enunciado.