

Mecânica Quântica – Série 11

Curso de Engenharia Física Tecnológica – 2013/2014

(Versão de 18 de Novembro de 2013)

*11.1 *Gasiorowicz 11.1*

Considere um oscilador harmónico a uma dimensão com frequência ω . Suponha que uma perturbação λx^2 é introduzida no sistema. Calcular o desvio da energia do nível n em primeira ordem em λ . Consegue encontrar o termo de 2ª ordem sem fazer as contas?

Nota:

- Escreva o Hamiltoniano total incluindo a perturbação. Calcule então a correção de 2ª ordem e compare com o desenvolvimento em série do resultado exato até à 2ª ordem em λ .

*11.2 *Gasiorowicz 11.2*

Considere um rotor esfericamente simétrico, com $H_0 = L^2/2I$. Suponha agora que o sistema está sujeito a uma perturbação dada por

$$H_1 = E_1 \cos \theta \quad (1)$$

Qual é o desvio dos valores da energia para os estados $l = 1$?

Comentário: Qual a razão para o resultado?

11.3 *Gasiorowicz 11.5*

Considere o átomo de hidrogénio e admita que o protão em vez de ser pontual é uma esfera de raio R com a carga distribuída uniformemente. Isto quer dizer que o potencial de Coulomb é agora modificado para

$$\begin{aligned} V(r) &= -\frac{3e^2}{8\pi\epsilon_0 R^3} \left(R^2 - \frac{1}{3}r^2 \right), \quad r < R (\ll a_0) \\ &= -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad r > R \end{aligned} \quad (2)$$

Calcule o desvio de energia para o estado $n = 1, l = 0$ e para os estados $n = 2$ causado por esta modificação.

Notas:

1. Exprima a perturbação em termos de μ , α , a_0 e R . Mostre que se obtém:

$$H_1 = \begin{cases} \mu c^2 \alpha \left(-\frac{3}{2} \frac{a_0}{R} + \frac{a_0}{r} + \frac{1}{2} \frac{a_0 r^2}{R^3} \right) & 0 < r < R \\ 0 & r > R \end{cases}$$

2. Utilize o `mathematica` para fazer os integrais. Se os fizer “à mão” utilize

$$\int dy y^n e^{-y} = -e^{-y} \sum_{k=0}^n \frac{n!}{k!} y^k$$

3. Mostre que o resultado tende para zero quando $R \rightarrow 0$. Mostre que

$$\Delta E_{10} \simeq \frac{2}{5} \mu c^2 \alpha \left(\frac{R}{a_0} \right)^2, \quad \Delta E_{21} = \Delta E_{20} \simeq \frac{1}{1120} \mu c^2 \alpha \left(\frac{R}{a_0} \right)^4$$

4. Calcule numericamente a correção quando $R = 10^{-15} \text{ m} = 1 \text{ fermi}$, isto é a dimensão do próton. Notar que como $R \ll a_0$ só vai conseguir um resultado que faça sentido se usar uma precisão de mais de 40 dígitos ou, em alternativa, usar os resultados da expansão em série em termos de R/a_0 .

5. Explique porque é que $\Delta E_{2l} \ll \Delta E_{10}$.

***11.4 Gasirowicz 11.6**

Calcule a correção aos níveis de energia no estado fundamental do oscilador harmónico quando a perturbação

$$V = \lambda x^4 \tag{3}$$

é adicionada ao Hamiltoniano não perturbado

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2. \tag{4}$$

Nota:

1. Este problema faz-se mais facilmente se usar os operadores A e A^+ .
2. Faça também com as funções próprias das coordenadas.

11.5 Gasirowicz 11.7

O fundo dum poço de potencial infinito é mudado para ter a forma

$$V(x) = \epsilon \sin \frac{\pi x}{a}, \quad 0 \leq x \leq a \tag{5}$$

Calcule os desvios de energia para todos os estados excitados em 1ª ordem em ϵ .

11.6 Gasirowicz 11.11

Considere um oscilador harmónico a duas dimensões,

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2) \tag{6}$$

Encontre os estados próprios e os valores próprios do Hamiltoniano usando os operadores de subida e descida. Considere agora que se junta ao sistema uma perturbação

$$V = 2\lambda xy \tag{7}$$

Calcule os desvios de energia no estado fundamental e nos primeiros estado excitados (degenerados). Para interpretar o resultado comece por resolver o problema exatamente (ver notas).

Notas:

1. Comece por resolver o problema exatamente. Para isso faça uma rotação de 45° nas coordenadas x, y .
2. Expanda o resultado exato para os valores próprios da energia até à ordem λ^2 .
3. Resolva agora o problema em teoria das perturbações. Comece por mostrar que o estado fundamental só tem correção em ordem λ^2 . Verifique que está de acordo com a expansão em λ do resultado exato.
4. Resolva agora o problema das correções ao primeiro estado excitado que é degenerado. Verifique novamente que o resultado está em acordo com a expansão do resultado exato.

***11.7** *Gasiorowicz 11.12*

O Hamiltoniano para um eletrão no átomo de hidrogénio sob a ação dum campo magnético \vec{B} é (se desprezarmos o spin)

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{e}{2m} \vec{L} \cdot \vec{B} \quad (8)$$

onde \vec{L} é o operador do momento angular. Na ausência do campo magnético há uma única linha na transição do estado ($n = 4, l = 3$) para o estado ($n = 3, l = 2$). Qual será o efeito do campo magnético naquela linha? Desenhe um esquema do novo espetro e das possíveis transições constrangidas pelas regras de seleção $\Delta L_z = 0, \pm 1$. Quantas linhas haverá? Qual seria o efeito dum campo magnético \vec{E} paralelo a \vec{B} ?

Notas:

1. Notar que este problema não é propriamente um problema de teoria de perturbações. Se tomarmos como eixo dos z a direção do campo \vec{B} , os estados próprios do átomo de hidrogénio, $|n, l, m\rangle$ são também estados próprios do Hamiltoniano de interação e portanto o cálculo das energias é trivial.
2. Este exemplo é o chamado *efeito de Zeeman*. A não observação dum número ímpar de estados desdobrados ($2l + 1$), como resulta na resolução deste problema, levou Pauli em 1924 a propor a ideia do spin.

***11.8** *Gasiorowicz 11.13*

Considere um Hamiltoniano da forma

$$H = \begin{bmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & -E_0 \end{bmatrix} + \lambda \begin{bmatrix} \alpha & u \\ u^* & \beta \end{bmatrix} \quad (9)$$

- a) Calcule o desvio dos níveis de energia em primeira e segunda ordem em λ . Compare com os valores próprios exatos.

b) Suponha que u^* é substituído por $v \neq u^*$. Mostre que os estados próprios do novo Hamiltoniano (não hermitico) correspondendo a diferentes valores próprios já não são ortogonais. (Para esta parte do problema tome $\alpha = \beta = 0$).

Nota: Na alínea b) considere que λ , $v \neq u$ são reais.

11.9 Calcule os integrais necessários para obter

$$\langle \phi_{200} | z | \phi_{210} \rangle = -3a_0$$

onde a_0 é o raio de Bohr. Este resultado é importante para calcular o *efeito de Stark* no átomo de hidrogénio para $n = 2$.