Mecânica Quântica – Série 11

Curso de Engenharia Física Tecnológica – 2014/2015

`(Versão de 11 de Dezembro de 2014)`

$\ast$**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.

$\ast$**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

$$H_1 = E_1 \cos\theta \tag{1}$$

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

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

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 $R \to 0$. 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 $R = 10^{-15}$ m = 1 fermi, isto é a dimensão do protão. 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 *Gasiorowicz 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 *Gasiorowicz 11.7*
O fundo dum poço de potencial infinito é mudado para ter a forma

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

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

11.6 *Gasiorowicz 11.11*
Considere um oscilador harmónico a duas dimensões,

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

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)

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

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 $\Delta L_z = (0, \pm 1)\hbar$. 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

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

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 hermítico) 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 $n = 2$.