



2º Teste: 19 de Dezembro de 2016 – 18h

Duração do teste: 1h30

Nota DF: Só serão cotadas as respostas em que há trabalho mostrado.

I (2 valores)

Para cada uma das afirmações seguintes diga se são verdadeiras ou falsas. Justifique numa linha a sua resposta, isto é, indique a *razão* sem fazer contas.

1. Considere um eletrão no estado $|\psi_{210}\rangle$ do átomo de Hidrogénio. Então

$$\langle \psi_{210} | z | \psi_{210} \rangle = 0$$

2. Uma partícula num potencial central está num estado descrito pela expressão

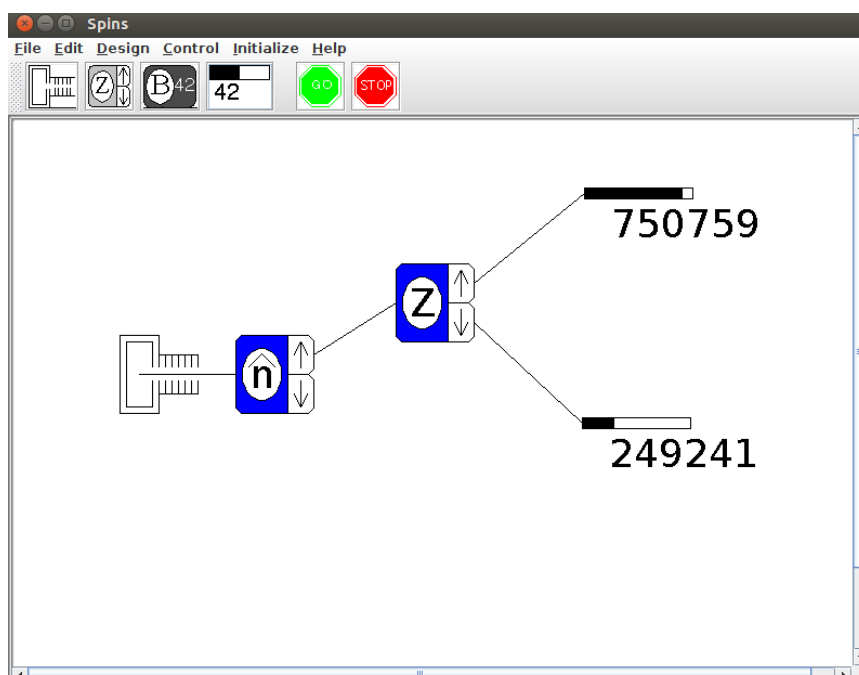
$$\psi(r, \theta, \varphi) = f(r) \cos^2(\theta)$$

A probabilidade duma medida de L_z dar $L_z = 0$ é igual a $\frac{45}{16\pi}$.

3. Considere a soma de dois momentos angulares $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ com $j_1 = 2$ e $j_2 = \frac{1}{2}$. Então o estado com $j = \frac{3}{2}, m = -\frac{1}{2}$ escreve-se, em função dos estados próprios dos dois momentos angulares,

$$|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{3}{5}} |2, 0\rangle |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2}{5}} |2, -1\rangle |\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}\rangle$$

4. Considere a experiência descrita na Figura seguinte:



Nesta experiência são disparados elétrons dum estado inicial aleatório. Esses elétrons passam primeiro por um analisador de spin segundo a direção \vec{n} , onde se selecionaram 10^6 elétrons com **spin up** nessa direção. Esses elétrons passam de seguida por um analisador de spin segundo o eixo dos z , obtendo-se as contagens indicadas para **spin up** e **down**. Então a direção \vec{n} pode corresponder a $\theta = 60^\circ$, $\phi = 0$.

II (2 valores)

Considere que o estado dum elétron no átomo de hidrogénio pode ser descrito pela função de onda

$$\psi(\vec{r}) = a \psi_{2,1,1}(r, \theta, \phi) + b \psi_{2,1,-1}(r, \theta, \phi)$$

com a, b reais e $a, b > 0$. As funções de onda $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi)$ são as funções próprias de H, L^2, L_z no átomo de hidrogénio.

1. Qual o valor médio da energia neste estado? Determine a, b para que o valor médio de L_z neste estado, seja $\frac{1}{2}\hbar$.
2. Determine o valor médio de r , neste estado, isto é

$$\langle r \rangle_\psi \equiv \langle \psi(\vec{r}) | r | \psi(\vec{r}) \rangle$$

Se não resolveu a alínea anterior expresse o resultado em termos de a e b .

III (3 valores)

Considere um sistema quântico com dois estados, com um Hamiltoniano H_0 que numa base ortonormalizada, $|I\rangle$ e $|II\rangle$, tem a seguinte representação matricial

$$H_0 = \begin{bmatrix} E & E \\ E & E \end{bmatrix}$$

com $E > 0$.

1. Determine os valores próprios, E_1 e E_2 e os estados próprios $|1\rangle$ e $|2\rangle$ do Hamiltoniano não perturbado, H_0 . Identifique $|1\rangle$ com o estado fundamental.
2. Considere agora que é aplicada ao sistema uma perturbação, agora descrita na base, $|1\rangle, |2\rangle$ por

$$H_1 = \begin{bmatrix} 0 & \Delta \\ \Delta & 0 \end{bmatrix}$$

onde $\Delta > 0$ e $\Delta \ll E$. Calcule as correções de primeira ordem aos níveis de energia do sistema não perturbado.

3. Calcule as correções de 2ª ordem aos dois níveis, usando teoria de perturbações.
4. Resolva o problema exatamente para o Hamiltoniano $H = H_0 + H_1$ e compare com os resultados da alínea anterior, no limite em que $\Delta \ll E$. **Nota:** a matriz de representação dum operador depende da base.

IV (3 valores)

Considere uma partícula de massa m e carga $-e < 0$, com spin $\frac{1}{2}$ fixa no espaço. Descrevemos o sistema na base em que S_z é diagonal. A partícula está sujeita num campo magnético $\vec{B} = B_0 \vec{e}_y$. O Hamiltoniano do sistema é então

$$H = -\vec{M} \cdot \vec{B} = \frac{e}{m} \vec{S} \cdot \vec{B} \equiv \hbar \omega_0 \sigma_y$$

onde $\omega_0 = \frac{eB_0}{2m}$. Sabe-se que no instante $t = 0$, o sistema está no estado *up* segundo \vec{e}_z , isto é,

$$|\psi(0)\rangle = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

- Qual a probabilidade duma medida de S_x dar o valor $\hbar/2$ em $t = 0$?
- Determine a probabilidade duma medida de S_x dar $\hbar/2$ em função do tempo, $P_{S_x=\hbar/2}(t)$. Determine o tempo mínimo, T , ao fim do qual $P_{S_x=\hbar/2}(T) = 1$.
- No instante $t = T$, o campo magnético é rodado instantaneamente para a direção do eixo dos z , isto é, $\vec{B} = B_0 \vec{e}_z$ para $t > T$. Ao fim de outro intervalo de tempo T (isto é, para um tempo total $\Delta t = 2T$), faz-se uma medida de S_y . Determine a probabilidade dessa medida dar o valor $\hbar/2$, isto é $P_{S_y=\hbar/2}(2T)$. Comente o resultado.

Fim do Teste

Formulário

• Momento Angular e Harmónicas Esféricas

$$[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k, \quad L_{\pm} = L_x \pm iL_y, \quad [L_+, L_-] = 2\hbar L_z, \quad [L_z, L_{\pm}] = \pm\hbar L_{\pm}$$

$$L^2 |l, m\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l, m\rangle, \quad L_z |l, m\rangle = \hbar m |l, m\rangle, \quad L_{\pm} |l, m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} |l, m \pm 1\rangle$$

As primeiras harmónicas esféricas são:

$$\begin{aligned} Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} & Y_{11} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin \theta \\ Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta & Y_{22} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{i2\varphi} \sin^2 \theta \\ Y_{21} &= -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin \theta \cos \theta & Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) \end{aligned}$$

com

$$Y_{l,-m} = (-1)^m Y_{lm}^* \quad \text{e} \quad \int d\Omega |Y_{lm}(\theta, \varphi)|^2 = 1$$

• Equação Radial

Para um potencial esfericamente simétrico a equação radial é

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} (V(r) - E) \right] R(r) = 0$$

Fazendo a mudança de variável $u(r) = r R(r)$ temos

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} (V(r) - E) \right] u(r) = 0$$

• Átomo de Hidrogénio e Funções Radiais

A solução geral é

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad \text{com energias} \quad E_n = -\frac{1}{2} m c^2 \alpha^2 \frac{1}{n^2}, \quad \alpha^{-1} = 137.036$$

As primeiras funções radiais são

$$\begin{aligned} R_{10} &= 2 \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} e^{-r/a_0} & R_{20} &= 2 \left(\frac{1}{2a_0} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{r}{2a_0} \right) e^{-r/2a_0} \\ R_{21} &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{1}{2a_0} \right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} & R_{30} &= 2 \left(\frac{1}{3a_0} \right)^{3/2} \left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2r^2}{27a_0^2} \right) e^{-r/3a_0} \\ R_{31} &= \frac{4\sqrt{2}}{3} \left(\frac{1}{3a_0} \right)^{3/2} \frac{r}{a_0} \left(1 - \frac{r}{6a_0} \right) e^{-r/3a_0} & R_{32} &= \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left(\frac{1}{3a_0} \right)^{3/2} \left(\frac{r}{a_0} \right)^2 e^{-r/3a_0} \end{aligned}$$

Os valores médios de algumas potências de r

$$\begin{aligned} \langle r^k \rangle &\equiv \int_0^\infty dr r^{2+k} R_{nl}^2(r) & \langle r \rangle &= \frac{a_0}{2} [3n^2 - l(l+1)] \\ \langle r^2 \rangle &= \frac{a_0^2 n^2}{2} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)] & \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle &= \frac{1}{a_0 n^2} & a_0 &= \frac{\hbar}{m c \alpha} \\ \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle &= \frac{2}{a_0^2 n^3 (2l+1)} & \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle &= \frac{2}{a_0^3 n^3 l (2l+1) (l+1)} \end{aligned}$$

• Átomos Hidrogenóides

Para os átomos com Z prótons e um eletrão, basta fazer

$$\alpha \rightarrow Z\alpha, \quad \text{e portanto} \quad a_0 \rightarrow \frac{1}{Z} a_0, \quad E_n = -\frac{1}{2} m c^2 (Z\alpha)^2 \frac{1}{n^2}$$

• Integrais Oscilador Harmónico e Átomo Hidrogénio

$$\int_0^\infty dx x^{\alpha-1} e^{-x} = \Gamma(\alpha), \quad \int_0^\infty dx x^{2\alpha-1} e^{-x^2} = \frac{1}{2} \Gamma(\alpha), \quad \Gamma(\alpha+1) = \alpha \Gamma(\alpha), \quad \Gamma(1) = 1, \quad \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$$

• Spin 1/2

1. Os sectores próprios do operador $S_n = \vec{S} \cdot \vec{n}$, onde, $\vec{n} = \sin \theta \cos \varphi \vec{e}_x + \sin \theta \sin \varphi \vec{e}_y + \cos \theta \vec{e}_z$, são

$$\psi(S_n = +\hbar/2) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad \psi(S_n = -\hbar/2) = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} \\ -e^{i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}$$

2. As matrizes de Pauli são

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

• Adição de Momento Angular

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2, \quad J_i^2 |j_i, m_i\rangle = \hbar^2 j_i(j_i+1) |j_i, m_i\rangle, \quad J^2 |j, m_j\rangle = \hbar^2 j(j+1) |j, m_j\rangle, \quad J_z |j, m_j\rangle = \hbar m_j |j, m_j\rangle$$

1. Os valores possíveis para j são

$$j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$$

2. Qualquer estado $|j, m_j\rangle$ se pode exprimir como uma combinação linear dos produtos dos estados $|j_1, m_1\rangle$ e $|j_2, m_2\rangle$ na seguinte forma

$$|j, m_j\rangle = \sum_{m_1+m_2=m_j} C(j, m_j; j_1, m_1, j_2, m_2) |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle$$

onde $C(j, m_j; j_1, m_1, j_2, m_2)$ são os coeficientes de Clebsch-Gordon e estão dados na Fig. 1 para os valores mais baixos de j_1 e j_2 .

3. A relação inversa é (os coeficientes de Clebsch-Gordon são reais)

$$|j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle = \sum_j C(j, m_j; j_1, m_1, j_2, m_2) |j, m_j\rangle$$

4. Para o átomo de Hidrogénio ($\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$)

$$\psi_{l+1/2, m_j} = \sqrt{\frac{l+m_j+1/2}{2l+1}} Y_{l, m_j-1/2} \chi^+ + \sqrt{\frac{l+1/2-m_j}{2l+1}} Y_{l, m_j+1/2} \chi^-$$

$$\psi_{l-1/2, m_j} = -\sqrt{\frac{l+1/2-m_j}{2l+1}} Y_{l, m_j-1/2} \chi^+ + \sqrt{\frac{l+m_j+1/2}{2l+1}} Y_{l, m_j+1/2} \chi^-$$

• Teoria de Perturbações

No caso não degenerado, para uma perturbação com Hamiltoniano H_1 ,

$$\Delta E_n^{(1)} = \langle \phi_n | H_1 | \phi_n \rangle, \quad \Delta E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle \phi_n | H_1 | \phi_k \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}, \quad |\psi_n\rangle = |\phi_n\rangle + \sum_{k \neq n} \frac{\langle \phi_k | H_1 | \phi_n \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} |\phi_k\rangle$$

• Constantes Físicas

$$\hbar = 1.05457266(63) \times 10^{-34} \text{ Js}$$

$$e = 1.60217733(49) \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$c = 1/\sqrt{\epsilon_0 \mu_0} = 2.99792458 \times 10^8 \text{ m/s}$$

$$\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ H/m}$$

$$m_e = 9.1093897(54) \times 10^{-31} \text{ kg} = 0.510998918(44) \text{ MeV}$$

$$m_p = 1.6726231(10) \times 10^{-27} \text{ kg} = 938.272029(80) \text{ MeV}$$

$$m_n = 1.6749286(1) \times 10^{-27} \text{ kg} = 939.565360(81) \text{ MeV}$$

$$hc = 1240 \text{ nm.eV}, \quad \hbar c = 197.35 \text{ nm.eV}$$

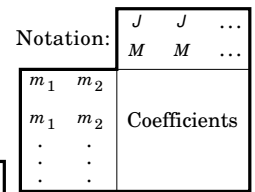
$$a_0 = 0.5291772108(18) \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$\alpha^{-1} = 137.03599911(46)$$

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 5.788 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$$

35. CLEBSCH-GORDAN COEFFICIENTS, SPHERICAL HARMONICS, AND d FUNCTIONS

Note: A square-root sign is to be understood over every coefficient, e.g., for $-8/15$ read $-\sqrt{8/15}$.



$1/2 \times 1/2$

1	0
+1/2 +1/2	1
+1/2 -1/2	1/2 1/2
-1/2 +1/2	1/2 -1/2
-1/2 -1/2	1

$1 \times 1/2$

3/2	3/2	1/2
+1 +1/2	1	+1/2 +1/2
+1 -1/2	1/3 2/3	3/2 1/2
0 +1/2	2/3 -1/3	-1/2 -1/2
0 -1/2	2/3 1/3	3/2
-1 +1/2	1/3 -2/3	-3/2

2×1

3	3	2
+2 +1	1	+2 +2
+2 0	1/3 2/3	3 2 1
+1 +1	2/3 -1/3	+1 +1 +1

$3/2 \times 1$

5/2	5/2	3/2
+3/2 +1	1	+3/2 +3/2
+3/2 0	2/5 3/5	5/2 3/2 1/2
+1/2 +1	3/5 -2/5	+1/2 +1/2 +1/2

$3/2 \times 1/2$

2	2	1
+3/2 +1/2	1	+1 +1
+3/2 -1/2	1/4 3/4	2 1
+1/2 +1/2	3/4 -1/4	0 0
+1/2 -1/2	1/2 1/2	2 1
-1/2 +1/2	1/2 -1/2	-1 -1

1×1

2	2	1
+1 +1	1	+1 +1
+1 0	1/2 1/2	2 1 0
0 +1	1/2 -1/2	0 0 0
+1 -1	1/6 1/2 1/3	2 1
0 0	2/3 0 -1/3	2 1
-1 +1	1/6 -1/2 1/3	-1 -1

$3/2 \times 3/2$

3	3	2
+3/2 +3/2	1	+2 +2
+3/2 +1/2	1/2 1/2	3 2 1
+1/2 +3/2	1/2 -1/2	+1 +1 +1
+3/2 -1/2	1/5 1/2 3/10	3 2 1 0
+1/2 +1/2	3/5 0 -2/5	3 2 1
-1/2 +3/2	1/5 -1/2 3/10	-2 -2

$Y_\ell^m = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_\ell^m e^{-im\phi}$

$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 JM \rangle = (-1)^{J-j_1-j_2} \langle j_2 j_1 m_2 m_1 | j_2 j_1 JM \rangle$

$d_{m',m}^j = (-1)^{m-m'} d_{m,m'}^j = d_{-m,-m'}^j$

$d_{0,0}^1 = \cos \theta$

$d_{1/2,1/2}^{1/2} = \cos \frac{\theta}{2}$

$d_{1,1}^1 = \frac{1 + \cos \theta}{2}$

$d_{1/2,-1/2}^{1/2} = -\sin \frac{\theta}{2}$

$d_{1,0}^1 = -\frac{\sin \theta}{\sqrt{2}}$

$d_{1,-1}^1 = \frac{1 - \cos \theta}{2}$

$d_{3/2,3/2}^{3/2} = \frac{1 + \cos \theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$

$d_{3/2,1/2}^{3/2} = -\sqrt{3} \frac{1 + \cos \theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}$

$d_{3/2,-1/2}^{3/2} = \sqrt{3} \frac{1 - \cos \theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$

$d_{3/2,-3/2}^{3/2} = -\frac{1 - \cos \theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}$

$d_{1/2,1/2}^{3/2} = \frac{3 \cos \theta - 1}{2} \cos \frac{\theta}{2}$

$d_{1/2,-1/2}^{3/2} = -\frac{3 \cos \theta + 1}{2} \sin \frac{\theta}{2}$

$d_{2,2}^2 = \left(\frac{1 + \cos \theta}{2}\right)^2$

$d_{2,1}^2 = -\frac{1 + \cos \theta}{2} \sin \theta$

$d_{2,0}^2 = \frac{\sqrt{6}}{4} \sin^2 \theta$

$d_{2,-1}^2 = -\frac{1 - \cos \theta}{2} \sin \theta$

$d_{2,-2}^2 = \left(\frac{1 - \cos \theta}{2}\right)^2$

$d_{1,1}^2 = \frac{1 + \cos \theta}{2} (2 \cos \theta - 1)$

$d_{1,0}^2 = -\sqrt{\frac{3}{2}} \sin \theta \cos \theta$

$d_{1,-1}^2 = \frac{1 - \cos \theta}{2} (2 \cos \theta + 1)$

$d_{0,0}^2 = \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2}\right)$

Figure 35.1: The sign convention is that of Wigner (*Group Theory*, Academic Press, New York, 1959), also used by Condon and Shortley (*The Theory of Atomic Spectra*, Cambridge Univ. Press, New York, 1953), Rose (*Elementary Theory of Angular Momentum*, Wiley, New York, 1957), and Cohen (*Tables of the Clebsch-Gordan Coefficients*, North American Rockwell Science Center, Thousand Oaks, Calif., 1974). The coefficients here have been calculated using computer programs written independently by Cohen and at LBNL.

Figura 1: Coeficientes de Clebsch-Gordan para $j_i = 1/2, 1, 3/2, 2$. Fonte: Particle Data Group web page, <http://pdg.lbl.gov/2007/reviews/clebrpp.pdf>