Mecânica Quântica II
Lista de Problemas 1.2

Departamento de Física de Ji-Paraná
Universidade Federal de Rondônia
Prof. Marco Polo

Questão 01:

Considere o poço cúbico infinito tridimensional:

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L, \quad 0 < y < L, \quad 0 < z < L, \\ \infty, & \text{c.c.} \end{cases},$$

Os estados estacionários e suas respectivas energias são

$$\psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right)$$

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}\left(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right)$$

Suponha que perturbemos o poço cúbico colocando uma "ondulação" função delta no ponto $(L/4, L/2, 3L/4)$:

$$H_1 = L^3 V_0 \delta(x - L/4)\delta(y - L/2)\delta(z - 3L/4).$$

Calcule as correções de primeira ordem para a energia do estado fundamental e os primeiros estados excitados (triplamente degenerados).

Questão 02:

Considere um sistema quântico com somente *três* estados linearmente independentes. Suponha que o hamiltoniano, na forma de matriz, seja

$$H = V_0 \begin{pmatrix} 1-\epsilon & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \epsilon \\ 0 & \epsilon & 2 \end{pmatrix},$$

em que V_0 é uma constante e ϵ é um número pequeno ($\epsilon \ll 1$).

(a) Escreva os autovetores e autovalores do hamiltoniano *não perturbado* ($\epsilon = 0$).

(b) Descubra os autovalores *exatos* de H. Expanda cada um deles como série de potências em ϵ até segunda ordem.

(c) Utilize a teoria da perturbação *não degenerada* de primeira e segunda ordem para encontrar os autovalores aproximados para o estado que surge a partir dos autovetores não degenerados de H_0. Compare com o resultado exato do item (a).

(d) Utilize a teoria da perturbação *degenerada* de primeira ordem para dois autovalores inicialmente degenerados. Compare com os resultados exatos.

Questão 03:

Considere uma partícula num potencial bidimensional

$$V_0 = \begin{cases} 0, & 0 \leq x \leq L, 0 \leq y \leq L, \\ \infty, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

(a) Escreva as funções de onda para o estado fundamental e o primeiro estado excitado.

(b) Adicionamos agora uma perturbação independente do tempo da forma

$$V_1 = \begin{cases} \lambda xy, & 0 \leq x \leq L, \quad 0 \leq y \leq L, \\ \infty, & \text{caso contrário} \end{cases}$$

Obtenha as energias de ordem zero e os desvios de energia em primeira ordem para o estado fundamental e primeiro estado excitado.

Questão 04:

Use um sistema algébrico computacional (ou um método analítico) para demonstrar os seguintes valores esperados do átomo de hidrogênio:

(a) $\langle n\ell m| \dfrac{1}{\hat{r}} |n\ell m\rangle = \dfrac{1}{a_0 n^2}$

(b) $\langle n\ell m| \dfrac{1}{\hat{r}^2} |n\ell m\rangle = \dfrac{1}{(\ell + 1/2)a_0^2 n^3}$

Questão 05:

Use um sistema algébrico computacional (ou um método analítico) para mostrar que os seguintes elementos de matriz para o átomo de hidrogênio:

(a) $\langle 2s|\,\hat{z}\,|2s\rangle = 0$

(b) $\langle 2s|\,\hat{z}\,|2p, m = 0\rangle = -3a_0$

(c) $\langle 2s|\,\hat{z}\,|2p, m = \pm 1\rangle = 0$

Questão 06:

A fórmula exata da estrutura fina para o hidrogênio (obtida a partir da equação de Dirac, sem recorrer à teoria da perturbação) é

$$E_{nj} = mc^2 \left[\frac{1}{\sqrt{1 + \left(\dfrac{\alpha}{n - (j + 1/2) + \sqrt{(j+1/2)^2 - \alpha^2}} \right)^2}} - 1 \right]$$

Expanda para ordem α^4 (observe que $\alpha \ll 1$) e demonstre que você recupera a equação da estrutura fina obtida via teoria da perturbação:

$$E_{nj} = -\frac{13.6\text{ eV}}{n^2} \left[1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left(\frac{n}{j + 1/2} - \frac{3}{4} \right) \right]$$

Questão 07:

Considere o efeito Stark para os estados $n = 3$ do hidrogênio. Há, inicialmente, nove estados degenerados, $|3\ell m\rangle$ (desprezando o spin do elétron), e ligamos um campo elétrico estático E_{ext} na direção z.

(a) Monte a matriz 9×9 representando o hamiltoniano perturbado: $\langle i|\, H_1\, |j\rangle$, onde $|i, j\rangle$ são os estados degenerados.

(b) Calcule os autovalores da matriz e suas degenerescências.

Questão 08:

Obtenha a fórmula da estrutura fina a partir da correção relativística

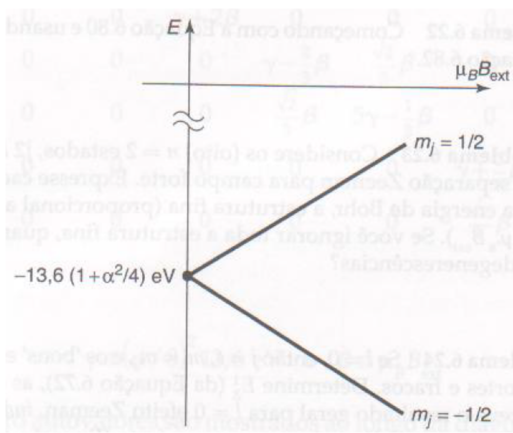
$$E_R^{(1)} = -\frac{(E_n)^2}{2mc^2}\left(\frac{4n}{\ell + 1/2} - 3\right)$$

e do acoplamento spin-órbita

$$E_{SO}^{(1)} = -\frac{n(E_n)^2}{mc^2}\left[\frac{j(j+1) - \ell(\ell+1) - 3/4}{\ell(\ell+1/2)(\ell+1)}\right]$$

Questão 09:

Considere os (oito) $n = 2$ estados, $|2ljm_j\rangle$. Calcule a energia de cada estado de acordo com a separação Zeeman no campo fraco e monte o diagrama como a figura abaixo para mostrar como as energias evoluem conforme B_{ext} aumenta. Seja claro ao rotular cada linha e indique sua inclinação.



Respostas

Questão 01

Estado fundamental: $E^{(1)} = 2V_0$;   primeiros estados excitados: $E^{(1)} = 0, 0, 8V_0$

Questão 02

(a) $|E_1 = V_0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ $|E_2 = V_0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ $|E_3 = 2V_0\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

(b) $E_1 = V_0(1 - \epsilon)$

$$E_2 = \frac{V_0}{2}\left(3 - \sqrt{1+4\epsilon^2}\right) \approx V_0(1-\epsilon^2)$$
$$E_3 = \frac{V_0}{2}\left(3 + \sqrt{1+4\epsilon^2}\right) \approx V_0(2+\epsilon^2)$$

(c) $E^{(1)} = 0$, $E^{(2)} = \epsilon^2 V_0$

(d) $E_{\pm}^{(1)} = 0, -\epsilon V_0$

Questão 03

(a) $\psi_{11}(x,y) = \dfrac{2}{L}\sin\left(\dfrac{\pi x}{L}\right)\sin\left(\dfrac{\pi y}{L}\right)$

$\psi_{12}(x,y) = \dfrac{2}{L}\sin\left(\dfrac{\pi x}{L}\right)\sin\left(\dfrac{2\pi y}{L}\right)$

$\psi_{21}(x,y) = \dfrac{2}{L}\sin\left(\dfrac{2\pi x}{L}\right)\sin\left(\dfrac{\pi y}{L}\right)$

(b) $E_{11}^{(0)} = \dfrac{\pi^2\hbar^2}{mL^2}$, $E_{12}^{(0)} = E_{21}^{(0)} = \dfrac{5\pi^2\hbar^2}{mL^2}$

$E_{11}^{(1)} = \dfrac{\lambda L^2}{4}$; estados excitados: $E_{\pm}^{(1)} = \dfrac{(\pi^4 \pm 4^5/81)\lambda L^2}{4\pi^4}$

Questão 07

(a) $$-ea_0E_{\text{ext}}\begin{pmatrix} 0 & 3\sqrt{6} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3\sqrt{6} & 0 & 3\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3\sqrt{3} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 9/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 9/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 9/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 9/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

(b) $ea_0E_{\text{ext}} \times \{0 \ \ (g=3), 1, -1, 9/2 \ \ (g=2), -9/2 \ \ (g=2)\}$

Questão 09

$$
\begin{aligned}
E_{2,0,1/2,1/2} &= -3.4\text{eV}\left(1+5\alpha^2/16\right)+\mu_B B_{ext}\\
E_{2,0,1/2,-1/2} &= -3.4\text{eV}\left(1+5\alpha^2/16\right)-\mu_B B_{ext}\\
E_{2,1,1/2,1/2} &= -3.4\text{eV}\left(1+5\alpha^2/16\right)+\mu_B B_{ext}/3\\
E_{2,1,1/2,-1/2} &= -3.4\text{eV}\left(1+5\alpha^2/16\right)-\mu_B B_{ext}/3\\
E_{2,1,3/2,3/2} &= -3.4\text{eV}\left(1+1\alpha^2/16\right)+2\mu_B B_{ext}\\
E_{2,1,3/2,1/2} &= -3.4\text{eV}\left(1+1\alpha^2/16\right)+2\mu_B B_{ext}/3\\
E_{2,1,3/2,-1/2} &= -3.4\text{eV}\left(1+1\alpha^2/16\right)-2\mu_B B_{ext}/3\\
E_{2,1,3/2,-3/2} &= -3.4\text{eV}\left(1+1\alpha^2/16\right)-2\mu_B B_{ext}
\end{aligned}
$$