Mecânica Quântica II
Lista de Problemas 3.1

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

Questão 01:

Um átomo de hidrogênio é colocado em um campo elétrico (dependente do tempo) $\vec{E} = E(t)\hat{k}$. Calcule os quatro elementos da matriz H^1_{ij} da perturbação $H^1 = eEz$ entre o estado fundamental ($n = 1$) e os primeiros estados excitados (quadruplamente degenerados) ($n = 2$). Demonstre também que $H^1_{ii} = 0$ para os cinco estados.

Questão 02:

Resolva o sistema de EDOs abordado em aula

$$\dot{c}_1 = -\frac{i}{\hbar} H^1_{12} e^{-i\omega_0 t} c_2$$
$$\dot{c}_2 = -\frac{i}{\hbar} H^1_{21} e^{i\omega_0 t} c_1,$$

referentes à evolução temporal dos coeficientes do vetor de estado $|\Psi\rangle = c_1(t)\,|1\rangle\, e^{-iE_1 t/\hbar} + c_2(t)\,|2\rangle\, e^{-iE_2 t/\hbar}$ em um sistema de dois níveis, considerando a seguinte condição inicial: $c_1(0) = a$; $c_2(0) = b$ (diferente do que foi considerado em aula). Resolva em ordem zero, primeira ordem e segunda ordem.

Questão 03:

O primeiro termo na equação

$$c_2^{(1)}(t) = \frac{iE_0 p}{2\hbar}\left[\frac{e^{i(\omega_0+\omega)t} - 1}{\omega_0 + \omega} + \frac{e^{i(\omega_0-\omega)t} - 1}{\omega_0 - \omega}\right],$$

obtida em aula, vem de $e^{i\omega t}/2$, parte de $\cos(\omega t)$ e o segundo, de $e^{-i\omega t}/2$. Assim, descartar o primeiro termo é essencialmente equivalente a escrever $H^1 = (V/2)e^{-i\omega t}$, o que significa

$$H_{12}^1 = \frac{V_{12}}{2}e^{i\omega t}$$
$$H_{21}^1 = \frac{V_{21}}{2}e^{-i\omega t}$$

(O último é necessário para transformar a matriz Hamiltoniana em hermitiana – ou, se preferir, para escolher o termo dominante da fórmula equivalente à equação para $c_1(t)$.) Rabi observou que, se você fizer a chamada **aproximação de onda girante** no início do cálculo, o sistema de EDO's da questão 02 pode ser precisamente resolvido, sem que seja necessário utilizar a teoria da perturbação, ou fazer suposições sobre a intensidade do campo.

(a) Resolva o sistema de EDO's da questão 02 na aproximação de onda girante (equações acima) para as condições iniciais comuns: $c_1(0) = 1; \quad c_2(0) = 0$. Expresse seus resultados ($c_1(t)$ e $c_2(t)$) em termos da **frequência de Rabi**:

$$\Omega \equiv \frac{1}{2}\sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + |V_{12}|^2/\hbar}.$$

(b) Determine a probabilidade de transição, $P_{1\to 2}(t)$, e demonstre que ela nunca excede 1. Confirme que $|c_1(t)|^2 + |c_2(t)|^2 = 1$.

(c) Verifique que $P_{1\to 2}(t)$ é reduzido ao resultado da teoria da perturbação obtido em aula quando a perturbação é "pequena" e explique exatamente o que significa nesse contexto, como restrição em V.

(d) Em quanto tempo o sistema retorna ao estado inicial?

Questão 04:

Como mecanismo de transição descendente, a emissão espontânea concorre com a emissão termicamente estimulada (emissão estimulada que tem como fonte a radiação do corpo negro). Demonstre que, em temperatura ambiente ($T = 300$ K), a estimulação térmica domina no caso de frequências muito abaixo de 5×10^{12} Hz, enquanto que a emissão espontânea domina no caso de frequências muito acima de 5×10^{12} Hz. Que mecanismo domina no caso de luz visível?

Questão 05:

Você poderia derivar a taxa de emissão espontânea

$$A = \frac{\omega_0^3 \left|\mu\right|^2}{3\pi\epsilon_0\hbar c^3}$$

sem o desvio por meio dos coeficientes A e B de Einstein se soubesse a densidade de energia do estado fundamental do campo eletromagnético, $\rho_0(\omega)$, já que, então, esse seria simplesmente um caso de emissão estimulada, onde

$$R_{2\to 1} = \frac{\pi}{3\epsilon_0\hbar^2} \left|\mu\right|^2 \rho_0(\omega)$$

Fazer isso corretamente exigiria eletrodinâmica quântica, mas se você está preparado para acreditar que o estado fundamental é constituído por um fóton de cada frequência, então, a derivação é muito simples:

(a) Substitua a equação do número de ocupação de fótons (estatística de Bose-Einstein para fótons)

$$N_\omega = \frac{g_k}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

por $N_\omega = g_k$ e deduza $\rho_0(\omega)$. (Provavelmente, essa fórmula falha em alta frequência, porque, de outro modo, a "energia do vácuo" total seria infinita ... Mas essa história fica para outro dia.)

(b) Utilize seu resultado, juntamente com a equação de $R_{2\to 1}$, para obter a taxa de emissão espontânea. Compare com a equação para A acima.

Questão 06:

A meia-vida ($t_{1/2}$) de um estado excitado é o tempo que metade dos átomos em uma amostra grande levaria para fazer uma transição. Encontre a relação entre $t_{1/2}$ e T ("tempo de vida" do estado).

Questão 07:

Calcule o tempo de vida (em segundos) para cada um dos quatro estados do hidrogênio com $n = 2$ ($|200\rangle$, $|210\rangle$, $|211\rangle$ e $|21,-1\rangle$). Use um sistema algébrico computacional, se desejar.

Questão 08:

Um elétron no estado $|300\rangle$ do hidrogênio decai ao estado fundamental por uma sequência (dipolo elétrico) de transições.

(a) Quais rotas de decaimento estão abertas para ele? Especificá-las da seguinte forma:

$$|300\rangle \to |n\ell m\rangle \to |n'\ell' m'\rangle \cdots |100\rangle$$

(b) Se você tivesse uma garrafa cheia de átomos nesse estado, que fração deles decairia por cada rota?

(c) Qual é o tempo de vida desse estado?

Questão 09:

No cálculo das taxas de absorção e emissão devido à interação com um sistemas de dois níveis, vimos em aula que o átomo era tão pequeno que as variações espaciais no campo poderiam ser ignoradas. O campo elétrico verdadeiro seria

$$E(\vec{r},t) = \vec{E}_0 \cos\Big(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t\Big).$$

Se o átomo estiver concentrado na origem, então $\vec{k}\cdot\vec{r} \ll 1$ sobre o volume relevante ($\left|\vec{k}\right| = 2\pi/\lambda$, então $\vec{k}\cdot\vec{r} \sim r/\lambda \ll 1$), e é por isso que poderíamos nos dar ao luxo de descartá-lo. Suponha que mantivéssemos a correção de primeira ordem:

$$E(\vec{r},t) = \vec{E}_0 \left[\cos(\omega t) + (\vec{k}\cdot\vec{r})\sin(\omega t)\right].$$

O primeiro termo dá origem às transições permitidas (dipolo elétrico) que foram consideradas em aula; o segundo leva às chamadas transições proibidas (dipolo magnético e quadrupolo elétrico) (altas potências de $\vec{k}\cdot\vec{r}$ levam a transições ainda mais "proibidas", associadas a momentos multipolares mais altos).

(a) Obtenha a taxa de emissão espontânea para as transições proibidas (não se preocupe em calcular a média sobre as direções de polarização e propagação, embora isso realmente deva ser feito para concluir o cálculo).

(b) Demonstre que, para um oscilador unidimensional, as transições proibidas vão do nível n ao nível $n-2$, e a taxa de transição (devidamente calculada sobre $\hat{n}$ e $\hat{n}$) é

$$R = \frac{\hbar q^2 \omega^3 n(n-1)}{15\pi\epsilon_0 m^2 c^5}.$$

Aqui, ω é a frequência do fóton, não do oscilador.

(c) Demonstre que a transição $2S \to 1S$ no hidrogênio não é possível nem mesmo por uma transição "proibida". Como se vê, isso é verdade para todos os multipolos superiores. O decaimento dominante acontece, de fato, por emissão de dois fótons, e o tempo de vida é de cerca de um décimo de segundo.

Questão 10:

Mostre que, para o oscilador harmônico quântico no estado $|0\rangle$ em $t = -\infty$, a probabilidade do oscilador sofrer uma transição para o estado $|1\rangle$ em $t = \infty$ devido à perturbação

$$\hat{H}^1(t) = -\frac{eE_0\hat{X}}{1 + (t/\tau)^2}$$

é, em aproximação de primeira ordem,

$$P_{0\to 1} = \frac{e^2 E_0^2 \pi^2 \tau^2}{2m\hbar\omega} e^{-2\omega\tau}$$

Questão 11:

Um átomo de hidrogênio está no estado fundamental no instante $t = -\infty$. Um pulso elétrico

$$\vec{E}(t) = (\vec{k}E_0)e^{-t^2/\tau^2}$$

é aplicado até $t = \infty$. Mostre que a probabilidade do átomo ser excitado a qualquer um dos estados com $n = 2$ é, em aproximação de primeira ordem,

$$P(n=2) = \left(\frac{eE_0}{\hbar}\right)^2 \left(\frac{2^{15} a_0^2}{3^{10}}\right) \pi\tau^2 e^{-\omega^2\tau^2/2}$$

Respostas

Questão 01

$-0.75eEa_0$

Questão 02

$c_1^{(0)} = a, \quad c_2^{(0)} = b$

$c_1^{(1)} = a - \frac{ib}{\hbar}\int_0^t H_{12}^1(t')e^{-i\omega_0 t'}dt', \quad c_2^{(1)} = b - \frac{ia}{\hbar}\int_0^t H_{21}^1(t')e^{i\omega_0 t'}dt'$

$c_1^{(2)} = a - \frac{ib}{\hbar}\int_0^t H_{12}^1(t')e^{-i\omega_0 t'}dt' - \frac{a}{\hbar^2}\int_0^t\int_0^{t'} H_{12}^1(t')H_{21}^1(t'')e^{-i\omega_0(t'-t'')}dt'dt''$

$c_2^{(2)} = b - \frac{ia}{\hbar}\int_0^t H_{21}^1(t')e^{i\omega_0 t'}dt' - \frac{b}{\hbar^2}\int_0^t\int_0^{t'} H_{21}^1(t')H_{12}^1(t'')e^{i\omega_0(t'-t'')}dt'dt''$

Questão 03

(a) $c_1(t) = e^{i(\omega-\omega_0)t/2}\left[\cos(\Omega t) + i\left(\frac{\omega_0-\omega}{2\Omega}\right)\sin(\Omega t)\right]$

$c_2(t) = -\frac{i}{2\hbar\Omega}V_{21}e^{i(\omega_0-\omega)t/2}\sin(\Omega t)$

(b) $P_{1\to 2}(t) = \left(\frac{|V_{12}|}{2\hbar\Omega}\right)^2\sin^2(\Omega t)$

Questão 04

Emissão espontânea domina.

Questão 06

(a) $\rho_0(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3}$

(b) $R_{b\to a} = \frac{\omega^3 |p|^2}{3\pi\hbar\epsilon_0 c^3}$

(d) $\frac{\pi}{\Omega}$

Questão 07

1.6 ns para todas, exceto para ψ_{200}, que é infinito.

Questão 08

(a) $|300\rangle \to |210\rangle \to |100\rangle$, $|300\rangle \to |21\pm 1\rangle \to |100\rangle$
(b) 1/3 por cada rota
(c) 158 ns

Questão 09

(a) $R_{b\to a} = \frac{q^2\omega^5}{\pi\hbar\epsilon_0 c^5}\left|\langle b|\,(\hat{n}\cdot\vec{r})(\hat{k}\cdot\vec{r})\,|a\rangle\right|^2$