Mecânica Quântica Avançada
Prova 1

Lucas Froguel
IFT

Prova 1

Exercício 1. *Considere uma molécula constituída de três átomos idênticos nos sítios (vértices) de um triângulo equilátero, conforme mostrado na figura. Vamos considerar que o íon desta molécula é formado adicionando-se um único elétron a ela; como vimos em aula, deve haver um efeito de delocalização, e o elétron deve se acomodar em um estado distribuído ao redor dos sítios. Suponha que o elemento de matriz da Hamiltoniana para o elétron em dois sítios adjacentes* i, j *é* $\langle i|H|j\rangle = -a, a > 0$*, para* $i \neq j$*; por simetria, os elementos diagonais são todos iguais,* $\langle i|H|i\rangle = E_0$.

Item 1. *Escreva a Hamiltoniana na forma matricial e calcule os níveis de energia.*
Resposta. A hamiltoniana é

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -a & -a \\ -a & E_0 & -a \\ -a & -a & E_0 \end{pmatrix} \tag{1}$$

Diagonalizando a matriz (processo feito em aula), achamos que as autoenergias são

$$E_s = E_0 - 2a\cos\left(\frac{2\pi s}{3}\right) \tag{2}$$

Assim, nossas energias são

$$E_0 = E_0 - 2a, \quad E_1 = E_0 - 2a\cos\left(\frac{2\pi}{3}\right), \quad E_2 = E_0 - 2a\cos\left(\frac{4\pi}{3}\right) \tag{3}$$

Item 2. *Suponha que um campo elétrico na direção* z *é aplicado, de modo que a energia potencial para o elétron na posição rotulada por "1" diminui por uma parcela* b $(b > 0)$*. Calcule os níveis de energia e os autoestados de energia.*
Resposta. Agora quebramos a simetria que fazia com que os elementos das diagonais fossem E_0, pois podemos distinguir o estado 1 dos estados 2 e 3. Logo, a hamiltoniana modificada é

$$H = \begin{pmatrix} E_0 - b & -a & -a \\ -a & E_0 + b & -a \\ -a & -a & E_0 + b \end{pmatrix} \tag{4}$$
