Jaime E. Santos
Departamento de Física

Física Quântica II

Teste 16/12/2022 - Correção

Exercício 1: *Adição de dois momentos angulares*

Um momento angular orbital caracterizado por $l = 1$ é adicionado a um spin, caracterizado por $s = 1/2$.

a) Com base na teoria de adição de dois momentos angulares, sabemos que j, o número quântico que caracteriza o momento angular total do sistema, pode assumir os valores inteiros ou semi-inteiros tais que $|l-s| \leq j \leq l+s$. Como $l = 1$ e $s = 1/2$, $1/2 \leq j \leq 3/2$, ou seja, j pode tomar dois valores possíveis, $j_{\text{max}} = 3/2$ e $j_{\text{min}} = 1/2$, como afirmado. O multipleto $j = 3/2$ é constituído por $2j_{\text{max}} + 1 = 4$ estados, a saber $|3/2\,3/2,\,1\,1/2\rangle$, $|3/2\,1/2,\,1\,1/2\rangle$, $|3/2\,-1/2,\,1\,1/2\rangle$ e $|3/2\,-3/2,\,1\,1/2\rangle$, enquanto que o multipleto $j = 1/2$ é constituído por $2j_{\text{min}}+1 = 2$ estados, a saber $|1/2\,1/2,\,1\,1/2\rangle$ e $|1/2\,-1/2,\,1\,1/2\rangle$.
(3 valores)

b) Genericamente, podemos escrever

$$|3/2\,m_j,\,1\,1/2\rangle = \sum_{m_l+m_s=m_j} a^{1\,1/2}_{m_l\,m_s}(3/2,m_j)\;|1\,m_l\,1/2\,m_s\rangle\,, \tag{1}$$

em que $a^{1\,1/2}_{m_l\,m_s}(3/2,m_j)$ são os coeficientes de Clebsch-Gordan. No entanto, a soma estende-se apenas aos estados $|1\,m_l\,1/2\,m_s\rangle$ tais que $m_j = m_l + m_s$. Se $m_j = j_{\text{max}} = 3/2$, há apenas um estado que satisfaz esta condição, a saber, o estado com $m_l = 1$ e $m_s = 1/2$. Como todos os estados estão por definição normalizados, temos que ter

$$|3/2\,3/2,\,1\,1/2\rangle = |1\,1\,1/2\,1/2\rangle\,,$$

ou, se se quiser, $a^{1\,1/2}_{1\,1/2}(3/2,3/2) = 1$. **(1 valor)**

c) Aplicando o operador $\hat{J}_-$ a $|3/2\,3/2,\,1\,1/2\rangle$, obtemos

$$\begin{aligned}\hat{J}_-\,|3/2\,3/2,\,1\,1/2\rangle &= \hbar\sqrt{\frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}+1\right)-\frac{3}{2}\left(\frac{3}{2}-1\right)}\,|3/2\,1/2,\,1\,1/2\rangle \\ &= \sqrt{3}\hbar\,|3/2\,1/2,\,1\,1/2\rangle\,. \end{aligned} \tag{2}$$

Mas isto é igual a

$$\begin{aligned}(\hat{L}_- + \hat{S}_-)\,|1\,1\,1/2\,1/2\rangle &= \hbar\sqrt{1(1+1)-1(1-1)}\,|1\,0\,1/2\,1/2\rangle + \hbar\,|1\,1\,1/2\,-1/2\rangle \\ &= \hbar\sqrt{2}\,|1\,0\,1/2\,1/2\rangle + \hbar\,|1\,1\,1/2\,-1/2\rangle\,, \end{aligned} \tag{3}$$

onde aplicamos $\hat{L}_-$ e $\hat{S}_-$, respetivamente, a $|1\,1\rangle$ e $|1/2\,1/2\rangle$ (note que $|1\,1\,1/2\,1/2\rangle = |1\,1\rangle \otimes |1/2\,1/2\rangle$). Igualando as duas partes, obtemos

$$\begin{aligned}|3/2\,1/2,\,1\,1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}\cdot\Big(\sqrt{2}\,|1\,0\,1/2\,1/2\rangle \\ &\quad + |1\,1\,1/2\,-1/2\rangle\Big)\,,\end{aligned}$$

cqd. **(2 valores)**

d) Tal como na equação (1), temos

$$|1/2\,1/2,\;1\,1/2\rangle = \sum_{m_l+m_s=m_j} a^{1\,1/2}_{m_l\,m_s}(1/2, m_j)\;|1\,m_l\,1/2\,m_s\rangle\,. \tag{4}$$

Mas, para $m_j = 1/2$, ou $m_l = 0$ e $m_s = 1/2$, ou $m_l = 1$ e $m_s = -1/2$. Assim, podemos escrever

$$|1/2\,1/2,\;1\,1/2\rangle = \alpha\,|1\,0\,1/2\,1/2\rangle + \beta\,|1\,1\,1/2\;-1/2\rangle\,, \tag{5}$$

em que α e β são os únicos coeficientes de Clebsch-Gordan não nulos neste caso, com $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$, já que o estado está normalizado.

Mas, $\langle 3/2\,1/2,\;1\,1/2\,|1/2\,1/2,\;1\,1/2\rangle = 0$, uma vez que estes estados são forçosamente ortogonais, já que são estados próprios de $\hat{\boldsymbol{J}}^2$, com valores próprios distintos. Assim, $\sqrt{2}\alpha + \beta = 0$, pelo que

$$|1/2\,1/2,\;1\,1/2\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{3}}\cdot\Big(|1\,0\,1/2\,1/2\rangle - \sqrt{2}\,|1\,1\,1/2\;-1/2\rangle\Big)\,,$$

que está devidamente normalizado. **(1 valor)**

Exercício 2: *Teoria de perturbações independentes do tempo*

Consideramos um oscilador harmónico bi-dimensional isotrópico, cuja dinâmica é descrita por um Hamiltoniano $\hat{H}_0 = \hbar\omega_0(\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger\hat{a}_y + 1)$, em que os operadores de destruição de criação são dados por $\hat{a}_x = \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\,\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega_0}}\,\hat{p}_x\right)$, $\hat{a}_x^\dagger = \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\,\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega_0}}\,\hat{p}_x\right)$, $\hat{a}_y = \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\,\hat{y} + i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega_0}}\,\hat{p}_y\right)$, $\hat{a}_y^\dagger = \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\,\hat{y} - i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega_0}}\,\hat{p}_y\right)$.

Aqui $\hat{x}$, $\hat{p}_x$, $\hat{y}$ e $\hat{p}_y$ são os operadores de posição e momento nas direções cartesianas de x e y. Dadas as relações de comutação entre estes operadores, resulta que $[\hat{a}_x, \hat{a}_x^\dagger] = \hat{\mathbb{1}}$ e $[\hat{a}_y, \hat{a}_y^\dagger] = \hat{\mathbb{1}}$, sendo que os restantes comutadores que envolvem operadores de criação e destruição são nulos.

Consideramos a perturbação $\hat{H}_1 = -\mathcal{K}\hat{x}\hat{y}$. Convenientemente, iremos representá-la em termos dos operadores de criação e destruição. Para tal basta representar os operadores $\hat{x}$ e $\hat{y}$ em termos desses operadores. Utilizando as expressões dadas acima, e adicionando $\hat{a}_x$ a $\hat{a}_x^\dagger$ e $\hat{a}_y$ a $\hat{a}_y^\dagger$, facilmente concluímos que $\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}(\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger)$, e que $\hat{y} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}}(\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger)$, pelo que obtemos

$$\hat{H}_1 = -\frac{\hbar\mathcal{K}}{2m\omega_0}(\hat{a}_x + \hat{a}_x^\dagger)(\hat{a}_y + \hat{a}_y^\dagger). \tag{6}$$

a) Temos $E^1_{0,0} = \langle 0,0|\,\hat{H}_1\,|0,0\rangle$. Ora, o único produto de operadores presente na equação (6) que não destrói o estado fundamental é o termo que envolve $\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y^\dagger$. Mas, $\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y^\dagger\,|0,0\rangle = |1,1\rangle$, utilizando as regras para a ação dos operadores de criação nos estados dadas no formulário, e portanto, $\langle 0,0|\,\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y^\dagger\,|0,0\rangle = \langle 0,0\,|1,1\rangle = 0$, já que os dois estados são ortogonais, pelo que $E^1_{0,0} = 0$. **(2 valores)**

b) Temos $E^2_{0,0} = \sum_{n_x\neq 0\,\vee\,n_y\neq 0}\frac{|\langle n_x,n_y|\hat{H}_1|0,0\rangle|^2}{E_{0,0}-E_{n_x,n_y}}$. Como vimos, $\hat{H}_1\,|0,0\rangle = -\frac{\hbar\mathcal{K}}{2m\omega_0}\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y^\dagger\,|0,0\rangle = -\frac{\hbar\mathcal{K}}{2m\omega_0}\,|1,1\rangle$, pelo que

$$E^2_{0,0} = \frac{\hbar^2\mathcal{K}^2}{4m^2\omega_0^2}\sum_{n_x\neq 0\,\vee\,n_y\neq 0}\frac{|\langle n_x,n_y\,|1,1\rangle\,|^2}{E_{0,0} - E_{n_x,n_y}}. \tag{7}$$

Dada a ortogonalidade dos estados, o único termo nesta soma que sobrevive é o termo em que $n_x = 1$ e $n_y = 1$. Como $E_{0,0} = \hbar\omega_0$ e $E_{1,1} = 3\hbar\omega_0$, obtemos finalmente $E^2_{0,0} = -\frac{\hbar\mathcal{K}^2}{8m^2\omega_0^3}$. **(2 valores)**

c) Os primeiros estados excitados deste sistema são degenerados e são naturalmente o estado em que $n_x = 1$ e $n_y = 0$, ou seja $|1,0\rangle$, e o estado em que $n_x = 0$ e $n_y = 1$, ou seja $|0,1\rangle$, com energia $E_{1,0} = E_{0,1} = 2\hbar\omega_0$. Como é sabido, para encontrar as correções de primeira ordem da energia em teoria de perturbações para estados degenerados, devemos diagonalizar a perturbação no subespaço dos níveis de energia degenerados. Temos $\langle 1,0|\,\hat{H}_1\,|1,0\rangle = 0$, $\langle 0,1|\,\hat{H}_1\,|0,1\rangle = 0$, $\langle 0,1|\,\hat{H}_1\,|1,0\rangle = -\frac{\hbar\mathcal{K}}{2m\omega_0}\langle 0,1|\,\hat{a}_y^\dagger\hat{a}_x\,|1,0\rangle = -\frac{\hbar\mathcal{K}}{2m\omega_0}$ e $\langle 1,0|\,\hat{H}_1\,|0,1\rangle = -\frac{\hbar\mathcal{K}}{2m\omega_0}\langle 1,0|\,\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y\,|0,1\rangle = -\frac{\hbar\mathcal{K}}{2m\omega_0}$, utilizando as regras para a ação dos operadores de criação e destruição dadas no formulário (o operador $\hat{a}_x^\dagger\hat{a}_y^\dagger$ leva-nos para fora deste subespaço, enquanto que o operador $\hat{a}_y\hat{a}_x$ destrói ambos os estados). Somos pois levados a diagonalizar uma matriz 2×2, o que implica que a seguinte equação secular deve ser satisfeita

$$\begin{vmatrix} -E & -\frac{\hbar\mathcal{K}}{2m\omega_0} \\ -\frac{\hbar\mathcal{K}}{2m\omega_0} & -E \end{vmatrix} = 0, \tag{8}$$

ou seja, $E^2 - \frac{\hbar^2\mathcal{K}^2}{4m^2\omega_0^2} = 0$, com soluções $E = \pm\frac{\hbar\mathcal{K}}{2m\omega_0}$, que são as correções desejadas. Os vetores próprios dessa matriz são os estados naturais para se prosseguir a análise de teoria de perturbações e encontrar as correções às funções de onda em primeira ordem na perturbação, mas não eram aqui pedidos. **(3 valores)**

Exercício 3: *Teoria de perturbações dependentes do tempo*

Um spin $1/2$ interage com um campo magnético estático, sendo o Hamiltoniano que descreve a sua dinâmica dado por $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar\omega_0}{2}\hat{\sigma}_x$, em que $\hat{\sigma}_x$ é a correspondente matriz de Pauli (ver abaixo).

O sistema encontra-se no seu estado fundamental a $t = 0$, passando a partir desse momento a interagir igualmente com um campo magnético dependente do tempo, que trataremos como uma perturbação, descrita pelo Hamiltoniano $\hat{H}_1(t) = -\frac{\epsilon\hbar\omega_0 t}{2T}\hat{\sigma}_z$, em que $\epsilon \ll 1$ é um fator adimensional. Desejamos calcular a probabilidade de transição para o estado excitado do sistema não perturbado a $t = T$.

O estado fundamental de $\hat{H}_0$ é naturalmente $|+,\hat{\mathbf{x}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$, com energia $-\frac{\hbar\omega_0}{2}$, enquanto que o estado excitado é $|-,\hat{\mathbf{x}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle)$, com energia $\frac{\hbar\omega_0}{2}$. A equação para a amplitude de transição é dada genericamente por

$$\gamma^1_{n\to m}(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} du\ \langle m|\,\hat{H}_1(u)\,|n\rangle\, e^{-i\omega_{nm}(u-t_0)}\,, \tag{9}$$

em que $\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}$ e t_0 é o momento em que a perturbação é aplicada. Neste caso, $t_0 = 0$, $t = T$, $|n\rangle = |+,\hat{\mathbf{x}}\rangle$, $|m\rangle = |-,\hat{\mathbf{x}}\rangle$ e $\omega_{nm} = -\omega_0$, pelo que temos que calcular a seguinte quantidade

$$\begin{aligned} \gamma^1_{+\to-}(T) &= \frac{i\epsilon\omega_0}{2T}\langle -,\hat{\mathbf{x}}|\,\hat{\sigma}_z\,|+,\hat{\mathbf{x}}\rangle\int_0^T du\, u\, e^{i\omega_0 u} \\ &= \frac{i\epsilon}{2\omega_0 T}\langle -,\hat{\mathbf{x}}|\,\hat{\sigma}_z\,|+,\hat{\mathbf{x}}\rangle\int_0^{\omega_0 T} dv\, v\, e^{iv}, \end{aligned} \tag{10}$$

após a substituição de variável $v = \omega_0 u$ no penúltimo integral. Desenvolvendo agora $e^{iv} = \cos v + i \sin v$ no integral, e notando que $\langle -, \hat{\mathbf{x}}| \, \hat{\sigma}_z \, |+, \hat{\mathbf{x}}\rangle = 1$, podemos utilizar os integrais dados no formulário, obtendo

$$\gamma^1_{+\to-}(T) \;=\; \frac{i\epsilon}{2}\left[\left(\sin(\omega_0 T) - \frac{1-\cos(\omega_0 T)}{\omega_0 T}\right) - i\left(\cos(\omega_0 T) - \frac{\sin(\omega_0 T)}{\omega_0 T}\right)\right]. \quad (11)$$

A probabilidade de transição procurada é simplesmente o módulo quadrado desta expressão, pelo que obtemos, após o desenvolvimento dos quadrados da parte real e da parte imaginária, o resultado

$$p^1_{+\to-}(T) \;=\; \frac{\epsilon^2}{4}\left(1 - \frac{2\sin(\omega_0 T)}{\omega_0 T} + \frac{4\sin^2(\omega_0 T/2)}{\omega_0^2 T^2}\right). \quad (12)$$

Note que esta probabilidade satura para $T \to \infty$, que corresponde ao limite de uma perturbação em rampa que varia entre 0 e $-\frac{\epsilon\hbar\omega_0}{2}$ e atua durante um tempo infinito. **(3 valores)**

Exercício 4: *Estado ligado para o potencial delta de Dirac em 1d*

Mostramos na aula teórico-prática que a equação de Schrödinger para os estados ligados de uma partícula em 1d se pode escrever na forma integral como

$$\psi(x) = -\frac{m}{\hbar^2\kappa}\int_{-\infty}^{+\infty} dx'\, e^{-\kappa|x-x'|}V(x')\psi(x'), \quad (13)$$

em que $V(x)$ é o potencial que atua sobre a partícula, sendo a energia da partícula dada por $E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m}$. Consideramos o potencial delta de Dirac $V(x) = -V_0\delta(x)$, em que $V_0 > 0$, ou seja, lidamos com um potencial atrativo.

a) Substituímos $V(x) = -V_0\delta(x)$ na equação (13) e executamos a integração em x', que é trivial, obtendo $\psi(x) = \frac{mV_0}{\hbar^2\kappa}\,\psi(0)\, e^{-\kappa|x|}$, pelo que concluímos que $C_\kappa = \frac{mV_0}{\hbar^2\kappa}\,\psi(0)$ e que a fumção de onda tem a forma dada no enunciado.

Ao mesmo tempo, esta equação é válida para $x = 0$, pelo que obtemos $C_\kappa = \frac{mV_0}{\hbar^2\kappa}\, C_\kappa$. Uma vez que $C_\kappa \neq 0$, $\kappa = \frac{mV_0}{\hbar^2}$, como pedido. Tal não era pedido, mas a energia do estado ligado é dada por $E = -\frac{\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$. **(2 valores)**

b) A constante C_κ determina-se exigindo que o módulo quadrado da função de onda, integrado entre $-\infty$ e $+\infty$, dê como resultado 1 (condição de normalização da probabilidade). Assim, temos $\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,|\psi(x)|^2 = 2|C_k|^2\int_0^{+\infty} dx\, e^{-2\kappa x} = 1$, de onde resulta $C_\kappa = \sqrt{\kappa}$, a menos de um factor de fase irrelevante. **(1 valor)**

Exercício 5*: *Aproximação de Born em 1d*

Foi igualmente mostrado que a equação de Schrödinger para os estados de energia positiva de uma partícula em 1d se pode escrever na forma integral como

$$\psi(x) = e^{ikx} + \frac{m}{i\hbar^2 k}\int_{-\infty}^{+\infty} dx'\, e^{ik|x-x'|}V(x')\psi(x'), \quad (14)$$

em que a energia da partícula é dada por $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Consideramos de novo o potencial delta de Dirac $V(x) = -V_0 \delta(x)$, em que $V_0 > 0$. Para obter a amplitude de transmissão $t(k)$ na primeira aproximação de Born utilizando a equação (14), basta notar que para $x \geq 0$, podemos escrever $|x - x'| = x - x'$ na equação acima (o potencial só atua em $x' = 0$), de onde resulta

$$\psi(x) = e^{ikx} + \frac{m}{i\hbar^2 k} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' \, e^{ik(x-x')} V(x') \psi(x'). \tag{15}$$

Agora, a forma mais simples de fazer o exercício é simplesmente substituir $\psi(x') \approx e^{ikx'}$ no integral acima, dado que é esta a primeira aproximação de Born. Efectuando o integral, obtemos $\psi(x) \approx \left(1 + \frac{imV_0}{\hbar^2 k}\right) e^{ikx}$ para $x \geq 0$, pelo que $t(k) \approx 1 + \frac{imV_0}{\hbar^2 k}$.

A segunda possibilidade é substituir $\psi(x) = t(k) e^{ikx}$ para $x \geq 0$ em ambos os lados da equação (15), obtendo a equação $t(k) = 1 + \frac{imV_0}{\hbar^2 k} t(k)$, que tem como solução exata $t(k) = \frac{1}{1 - \frac{imV_0}{\hbar^2 k}}$. Esta solução, só por si, não constituiria uma resposta ao problema. Temos ainda que notar que a primeira aproximação de Born corresponde ao desenvolvimento em série da solução até à primeira ordem em V_0, pelo que, recorrendo à série geométrica, obtemos $t(k) \approx 1 + \frac{imV_0}{\hbar^2 k}$, como acima. **(2 valores extra)**

Formulário:

Exercício 1:

A ação dos operadores escada do momento angular orbital nos auto-estados de $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ e $\hat{L}_z$ é dada por

$$\hat{L}_\pm |\, l\, m \,\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} |\, l\, m \pm 1 \,\rangle \,, \tag{16}$$

sendo que equações análogas são válidas para os operadores $\hat{J}_\pm$ e $\hat{S}_\pm$ e respetivos auto-estados.

Exercício 2:

Recorde que $\hat{a}_x \, |n_x, n_y\rangle = \sqrt{n_x} \, |n_x - 1, n_y\rangle$, $\hat{a}_x^\dagger \, |n_x, n_y\rangle = \sqrt{n_x + 1} \, |n_x + 1, n_y\rangle$, $\hat{a}_y \, |n_x, n_y\rangle = \sqrt{n_y} \, |n_x, n_y - 1\rangle$, $\hat{a}_y^\dagger \, |n_x, n_y\rangle = \sqrt{n_y + 1} \, |n_x, n_y + 1\rangle$.

Exercício 3:

Os seguintes integrais poderão ser-lhe úteis

$$\int_0^x dv \, v \cos v = x \sin x + \cos x - 1.$$

$$\int_0^x dv \, v \sin v = \sin x - x \cos x.$$

Exercício 4:

Recorde que a função delta de Dirac está definida como $\int_{-\infty}^{+\infty} dx' \, f(x') \delta(x' - a) = f(a)$, em que $f(x)$ é uma função pelo menos contínua em $x = a$.

Total: 20 + 2 Valores