Jaime Santos
Universidade do Minho

Licenciatura em Física
Ano letivo 2022/2023

Física Quântica II

Exercícios

Exercício 11: *Diagonalização do Hamiltoniano para um sistema a dois níveis e probabilidades de medição num estado singleto de 2 spins* $1/2$.

Escrevemos o Hamiltoniano de um sistema a dois níveis como

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \alpha & \gamma^* \\ \gamma & \beta \end{pmatrix} , \tag{36}$$

que é a forma genérica de um operador hermítico num espaço de Hilbert a duas dimensões, e onde as constantes reais α e β e a constante complexa, $\gamma = \gamma_{\mathrm{R}} + i\gamma_I$, são genéricas.

a) Mostre que se pode escrever este operador como

$$\hat{H} = A\hat{\mathbb{1}} + B(\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}) ,$$

onde as constantes A, B e o vector unitário $\hat{\boldsymbol{n}} = (\hat{n}_x, \hat{n}_y, \hat{n}_z)$, se escrevem à custa de α, β, γ_{R} e γ_{I}.

b) Vimos no exercício 6 que $(\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})^2 = \hat{\mathbb{1}}$. Escrevendo, $\hat{n}_x = \sin\theta\cos\varphi$, $\hat{n}_y = \sin\theta\sin\varphi$ e $\hat{n}_z = \cos\theta$ (parametrização em termos de coordenadas esféricas, na esfera unitária ou de Bloch), mostre explicitamente que um dos valores próprios de $\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ é $+1$ e o outro -1, e que os vetores próprios associados são

$$| +, \hat{\boldsymbol{n}} \rangle = \cos\frac{\theta}{2}\, | + \rangle + \sin\frac{\theta}{2}\, e^{i\varphi}\, | - \rangle , \tag{37}$$

$$| -, \hat{\boldsymbol{n}} \rangle = -\sin\frac{\theta}{2}\, | + \rangle + \cos\frac{\theta}{2}\, e^{i\varphi}\, | - \rangle , \tag{38}$$

onde $| + \rangle$ e $| - \rangle$ são os estados próprios com valor próprio $+1$ e -1, respetivamente, de $\hat{\sigma}_z$.

c) Mostre que $\hat{P}_{\hat{\boldsymbol{n}}}(\nu) = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{1}} + \nu\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}})$, com $\nu = \pm 1$ é o projetor no estado $| \nu, \hat{\boldsymbol{n}} \rangle$ respetivo.

d) Para um estado singleto de dois spins $1/2$, mostre que a probabilidade de medir a componente do primeiro spin ao longo do eixo $\hat{\boldsymbol{n}}^1$ e obter $\nu^1 = \pm 1$, e medir a componente do segundo spin ao longo do eixo $\hat{\boldsymbol{n}}^2$ e obter $\nu^2 = \pm 1$, é dada por $p_{\hat{\boldsymbol{n}}^1\, \hat{\boldsymbol{n}}^2}(\nu^1, \nu^2) = \frac{1}{4}[1 - \nu^1\nu^2(\hat{\boldsymbol{n}}^1 \cdot \hat{\boldsymbol{n}}^2)]$ (normalizamos as componentes a $\hbar/2$, de modo que o que medimos são os valores próprios das matrizes de Pauli).

Pista: Use os resultados dos exercícios 7 e 8.

e) Mostre que se os eixos forem paralelos, i.e. $\hat{\boldsymbol{n}}^1 = \hat{\boldsymbol{n}}^2$, a probabilidade de medir os mesmos valores da componente dos spins ao longo desse eixo é sempre nula.

f) Mostre que a probabilidade de medir a componente do primeiro spin igual a $+1$ ou -1 ao longo de um eixo arbitrário é $1/2$, se a medição sobre o segundo spin não for realizada (ou se não conhecermos o seu resultado).

Exercício 12: *Correções anarmónicas à energia do estado fundamental de um OH*

Calcule as correções à energia em primeira ordem de um OH no seu estado fundamental, cujo Hamiltoniano é dado pela equação (29), perturbado pelo termo anarmónico, $\hat{V} = \frac{C}{4!}\hat{x}^4$, onde C é uma constante de dimensões $ML^{-2}T^{-2}$.

Pista: Expresse $\hat{x}^4$ em termos dos operadores de criação e destruição, recordando que estes últimos não comutam.

Exercício 13: *Interação hiperfina em iões hidrogenóides*

O termo de contacto de Fermi da interação hiperfina entre o spin do electrão e o núcleo de carga $+Ze$ de um ião hidrogenóide é dado por

$$\hat{H}_{\text{hyp}} = \frac{Ze^2 g_N}{3\varepsilon_0 M_N m c^2}\delta^3(\boldsymbol{r})\,(\hat{\boldsymbol{S}} \cdot \hat{\boldsymbol{I}})\,, \tag{39}$$

onde ε_0 é a permitividade do vazio, c a velocidade da luz, m a massa do eletrão e M_N a do núcleo, enquanto g_N é o factor de Landé do dito núcleo. O operador $\hat{\boldsymbol{S}}$ é o operador de spin do eletrão e $\hat{\boldsymbol{I}}$ é o operador do momento angular do núcleo (para $Z > 1$, este pode ser caracterizado por um número quântico, $i > 1/2$). A função delta assegura que só estados s veem a sua energia modificada por esta interação.

Considerando a função de onda para o estado $1s$ do electrão, $\psi_{n=1,l=0,m=0}(\boldsymbol{r}) = \frac{e^{r/a_B}}{\sqrt{\pi a_B^3}}$, em que $a_B = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{mZe^2}$ é o raio de Bohr para este ião, mostre que o splitting hiperfino entre os níveis de energia do sistema é dado por $\Delta E_{\text{hyp}} = \frac{8\pi g_N E_{1s}^2}{3M_N c^2}(2i+1)$, onde $E_{1s} = -\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 a_B}$ é a energia do nível $1s$ do ião.

Olhando para este resultado, explique igualmente porque podemos aplicar teoria de perturbações para calcular as correções à energia do estado $1s$.

Pista: Considere a função de onda para a coordenada e o spin do eletrão e o momento angular nuclear como $\psi_{n=1,l=0,m=0}(\boldsymbol{r}) \mid s, m_s\,\rangle \bigotimes \mid i, m_i\,\rangle$, e escreva $\hat{\boldsymbol{S}} \cdot \hat{\boldsymbol{I}} = \frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{F}}^2 - \hat{\boldsymbol{I}}^2 - \hat{\boldsymbol{S}}^2)$, em que $\hat{\boldsymbol{F}} = \hat{\boldsymbol{I}} + \hat{\boldsymbol{S}}$ é o operador do momento angular do sistema eletrão+núcleo.

Responsável: Jaime Santos, DFUM e CFUM **E-Mail:** jaime.santos@fisica.uminho.pt