Problemas de Física Quântica–II

Perturbações independentes do tempo
Universidade do Minho

31 de Outubro de 2018

1 Teoria de perturbações independente do tempo

1. Considere um oscilador harmónico simples a uma dimensão com uma frequência característica ω. Suponha que é introduzida uma perturbação λx^2. Calcule o desvio na energia do nível n em primeira ordem em λ. Consegue determinar o termo de segunda ordem, proporcional a λ^2, sem fazer o cálculo? (Sugestão: escreva o hamiltoneano total, incluindo a perturbação.)

   (Gasiorowicz, 11.1)

2. Considere um rotor simétrico com
$$H_0 = \frac{\boldsymbol{L}^2}{2I}$$
   Suponha que este sistema é sujeito a uma perturbação dada por:
$$H_1 = \beta \cos\theta$$
   Quais são os desvios na energia para os estados com $l = 1$?

   (Gasiorowicz, 11.2)

3. Considere uma partícula num poço de potencial infinito com largura L e uma das pontas em $x = 0$. Qual é o desvio na energia para o estado n devido à introdução de um potencial adicional que corresponde a inclinar o "chão" do poço,
$$V(x) = V_0\left(\frac{x}{L}\right)$$
   em que V_0 é uma constante?

   (Gasiorowicz, 11.3)

4. Considere um átomo de hidrogénio e assuma que o protão, em vez de ser uma fonte pontual do campo de Coulomb, é uma esfera uniformemente carregada de raio R. Isso quer dizer que o potencial de Coulomb é modificado de modo a ser:

$$V(r) = \begin{cases} -\dfrac{3e^2}{8\pi\varepsilon_0 R^3}\left(R^2 - \dfrac{1}{3}r^2\right) & r < R \qquad (<< a_0) \\ -\dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} & r > R \end{cases}$$

   Calcule o desvio de energia para os estados $n = 1, l = 0$ e $n = 2$ causado por esta modificação, usando as funções de onda radiais:

$$R_{1,0}(r) = 2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

$$R_{2,0}(r) = 2\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$$

$$R_{2,1}(r) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0}e^{-Zr/2a_0}$$

   (Gasiorowicz, 11.5)

5. Calcule o desvio na energia do estado fundamental do oscilador harmónico a uma dimensão, quando a perturbação

$$V = \lambda x^4$$

   é acrescentada a

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

   (Gasiorowicz, 11.6)

6. O fundo de um poço de potencial é alterado de modo a ficar com a forma

$$V(x) = \varepsilon \sin\frac{\pi x}{b} \qquad 0 \leq x \leq b$$

   Calcule o desvio da energia para todos os estados excitados em primeira ordem em ε. Note que o poço originalmente tinha $V(x) = 0$ para $0 \leq x \leq b$ e $V(x) = \infty$ fora do poço.

   (Gasiorowicz, 11.7)

7. Considere um oscilador harmónico a duas dimensões descrito pelo hamiltoneano

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2\right) + \frac{1}{2}m\omega^2\left(x^2 + y^2\right)$$

   Generalize a abordagem do capítulo VI do Gasiorowicz de modo a obter as soluções deste problema em termos de operadores de subida a actuar no estado fundamental. Calcule o desvio de energia devidos à perturbação

$$V = 2\lambda xy$$

no estado fundamental e nos estados degenerados do primeiro estado excitado, usando teoria de perturbações de primeira ordem. Consegue fazer uma interpretação simples do resultado? Calcule a correcção de segunda ordem à energia do estado fundamental.

(Gasiorowicz, 11.11)

8. O hamiltoneano do electrão no átomo de hidrogénio sujeito a um campo magnético constante $\boldsymbol{B}$ é, desprezando o spin,

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + \frac{e}{2m}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{B}$$

em que $\boldsymbol{L}$ é o operador do momento angular. Na ausência do campo magnético, haverá uma única linha na transição do estado $n = 4, l = 3$ para o estado $n = 3, l = 2$. Qual será o efeito do campo magnético nessa linha? Desenhe o novo espectro e as transições possíveis, constrangidas pela regra de selecção $\Delta l_z = 0, \pm 1$. Quantas linhas haverá? Qual será o efeito de um campo eléctrico constante $\boldsymbol{E}$ paralelo a $\boldsymbol{B}$?

(Gasiorowicz, 11.12)

9. Considere o efeito de um campo magnético, $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{e}_z$, nos níveis de energia de um electrão no átomo de hidrogénio, num estado de momento angular $l = 1$. O hamiltoniano é dado por

$$H_0 = \frac{\mu_B B}{\hbar}(L_z + 2S_z) \equiv \frac{\epsilon}{\hbar}(L_z + 2S_z)\,, \tag{1}$$

onde μ_B é o magnetão de Bohr, $\mu_B = e\hbar/(2m)$.

   (a) Determine os níveis de energia e os correspondentes estados próprios do sistema.

   Designe por ϕ_1, ϕ_0 e ϕ_{-1} os estados próprios do operador L_z, e por $\alpha_{1/2}$ e $\alpha_{-1/2}$, os estados próprios do operador S_z.

   Dois valores próprios deverão ser degenerados.

   Defina a base:

$$\psi_1 = \phi_1\alpha_{1/2}\,, \qquad \psi_3 = \phi_0\alpha_{1/2}\,, \qquad \psi_5 = \phi_{-1}\alpha_{1/2}\,, \tag{2}$$

$$\psi_2 = \phi_1\alpha_{-1/2}\,, \qquad \psi_4 = \phi_0\alpha_{-1/2}\,, \qquad \psi_6 = \phi_{-1}\alpha_{-1/2}\,. \tag{3}$$

   e construa uma tabela com as energias dos estados de 1 a 6.

   (b) Considere agora o efeito do acoplamento spin-órbita, o que adiciona ao hamiltoniano um termo da forma

$$H_1 = \frac{2W}{\hbar^2}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}\,. \tag{4}$$

   Mostre que $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S} = (L_+S_- + L_-S_+)/2 + L_zS_z$.

(c) Mostre que $H = H_0 + H_1$ actua nessa base originando:

$$H\psi_1 = c_{11}\psi_1\,, \tag{5}$$
$$H\psi_2 = c_{22}\psi_2 + c_{23}\psi_3\,, \tag{6}$$
$$H\psi_3 = c_{32}\psi_2 + c_{33}\psi_3\,, \tag{7}$$
$$H\psi_4 = c_{44}\psi_4 + c_{45}\psi_5\,, \tag{8}$$
$$H\psi_5 = c_{54}\psi_4 + c_{55}\psi_5\,, \tag{9}$$
$$H\psi_6 = c_{66}\psi_6\,. \tag{10}$$

onde

$$c_{11} = W + 2\epsilon\,, \tag{11}$$
$$c_{66} = W - 2\epsilon\,, \tag{12}$$
$$c_{22} = c_{55} = -W\,, \tag{13}$$
$$c_{33} = -c_{44} = \epsilon\,, \tag{14}$$
$$c_{23} = c_{32} = c_{45} = c_{54} = \sqrt{2}W\,. \tag{15}$$

(d) Use as equações anteriores para diagonalizar o hamiltoniano H e mostre que os valores próprios da energia são dados por:

$$W \pm 2\epsilon\,, \tag{16}$$
$$\frac{1}{2}[(\epsilon - W) \pm \{(\epsilon + W)^2 + 8W^2\}^{1/2}]\,, \tag{17}$$
$$\frac{1}{2}[-(\epsilon + W) \pm \{(\epsilon - W)^2 + 8W^2\}^{1/2}]\,. \tag{18}$$

Faça um desenho dos valores próprios em função de W.

(e) Considere agora o caso em que $W \ll \epsilon$. Calcule, em primeira ordem de teoria de perturbações, os valores próprios de H, considerando H_1 como uma perturbação a H_0. Confirme o resultado, expandindo os valores próprios exactos em potências de W, em torno de $W = 0$. Os seus resultados para as energias deverão ser, em primeira ordem em W, os seguintes:

$$W \pm 2\epsilon\,, \quad \epsilon\,, \quad -W\,, \quad -\epsilon\,, \quad -W\,. \tag{19}$$

(f) Calcule, em primeira ordem de teoria de perturbações, os valores próprios de H, considerando agora que H_1 é dominante sobre H_0. (É melhor usar a base que diagonaliza simultâneamente J^2, J_z, L^2, S^2).

10. Considere que o núcleo atómico é uma casca esférica de raio b e carga e (uma melhor aproximação seria considerar o núcleo uma esfera uniformemente carregada). Neste caso o potencial é dado por

$$\begin{cases} V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{b}\,, & r < b \\ V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}\,, & r > b \end{cases} \tag{20}$$

(a) Convença-se que a perturbação, relativamente ao modelo do núcleo pontual, tem a forma

$$H_1 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{b}\right) \tag{21}$$

para $r < b$ e $H_1 = 0$ para $r > b$.

(b) Calcule, em teoria de perturbações de primeira ordem, a correção à energia do estado fundamental, mostrando que esta é dada por

$$E_0^{(1)} \approx \frac{4}{a_0^3}\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{b^2}{6}\,, \tag{22}$$

onde a_0 é o raio de Bohr. Para o efeito use a aproximação $e^{-r/a_0} \approx 1$, para $r \ll a_0$, o que é o caso neste problema.

(c) Faça o quociente $E_0^{(1)}/E^{(0)}$ e calcule o seu valor numérico. Considera que o efeito de tomar o núcleo finito é importante?

11. Considere a função de onda $\psi(r) = Ae^{-\beta r}$. Mostre que o coeficiente A toma o valor $A^2 = \beta^3/\pi$, para que $\psi(r)$ esteja normalizada. Usando o teorema variacional encontre o valor superior para a energia do estado fundamental do átomo de hidrogénio. Note que

$$\nabla^2 e^{-\beta r} = \left(\beta^2 - \frac{2\beta}{r}\right) e^{-\beta r}\,. \tag{23}$$

Compare o valor obtido com a energia exacta do estado fundamental do átomo de hidrogénio. Ficou surpreendido com essa comparação? Deverá ter obtido para β o valor

$$\beta = \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}\,. \tag{24}$$