Jaime Santos
Universidade do Minho

Licenciatura em Física
Ano letivo 2022/2023

Física Quântica II

Exercícios

Exercício 14: *Interação spin-órbita em iões hidrogenóides*

Considere um ião hidrogenóide de carga nuclear $+Ze$ e com um único eletrão de carga $-e$. No referencial em que o eletrão está instantaneamente em repouso, este perceciona um campo magnético dado pelo Lei de Biot-Savart (para já, a derivação é puramente clássica)

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \cdot \frac{Ze\,\boldsymbol{v}_N \times \boldsymbol{r}}{r^3}\,, \tag{40}$$

em que $\mu_0 = 1/(\varepsilon_0 c^2)$ é a permeabilidade magnética do vazio, c a velocidade da luz e $\boldsymbol{v}_N$ é a velocidade do núcleo percecionada pelo eletrão.

a) Mostre que pode escrever a equação (40) como

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = \frac{Ze\,\boldsymbol{L}}{4\pi\varepsilon_0 mc^2 r^3}\,, \tag{41}$$

em que $\boldsymbol{L}$ é o momento angular orbital do eletrão e m a sua massa.

Pista: A que é igual $\boldsymbol{v}_N$?

b) No referencial em questão, o eletrão tem ainda um momento angular próprio $\boldsymbol{S}$, o seu spin, estando a ele associado um momento magnético $\boldsymbol{\mu}_e = -\frac{eg_e}{2m}\boldsymbol{S}$, em que $g_e = 2$ é o fator de Landé do eletrão (este valor deve-se a um efeito puramente quântico e relativista). Mostre que a energia de interação do spin com o campo magnético criado pelo nucleo é dada por

$$H_{rf} = \frac{Ze^2\,g_e}{8\pi\varepsilon_0 m^2 c^2} \cdot \frac{\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}}{r^3}\,. \tag{42}$$

c) Esta é a alteração de energia percecionada pelo eletrão no seu referencial próprio, que não é um referencial inercial. A sua energia no referencial inercial de laboratório em que o núcleo está em repouso é dada por (ver Landau e Lifshitz, Mecânica, §40, exercício 2) $H_{so} = H_{rf} + \boldsymbol{\Omega}\cdot\boldsymbol{S}$, em que $\boldsymbol{\Omega} \approx \frac{1}{2c^2}(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{v})$ é a frequência de rotação do referencial próprio (precessão de Thomas, efeito puramente relativístico, daí a presença do factor $1/(2c^2)$ na expressão anterior) e $\boldsymbol{a}$ é a aceleração a que o eletrão está sujeito.

Mostre que

$$H_{so} = \frac{Ze^2\,(g_e-1)}{8\pi\varepsilon_0 m^2 c^2} \cdot \frac{\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}}{r^3}\,. \tag{43}$$

Esta é a contribuição para a energia do eletrão da denominada *interação spin-órbita*. Em mecânica quântica não-relativística, este efeito é considerado tomando a expressão anterior como uma perturbação ao Hamiltoniano que descreve o movimento do eletrão em torno do núcleo do ião hidrogenóide (promovendo r^{-3}, $\boldsymbol{L}$ e $\boldsymbol{S}$ a operadores).

d) O Hamiltoniano que descreve o movimento do eletrão em torno do núcleo é dado por

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2\, l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}\,, \tag{44}$$

na base própria da energia, $\mid n_r\, l\, m_l\, s\, m_s\,\rangle = R_{nl}(r) Y_{lm_l}(\theta,\varphi) \mid s\, m_s\,\rangle$, em que $n_r = n - l - 1$ é o número quântico radial, que indica o número de zeros da função radial $R_{nl}(r)$ e n o número quântico principal.

Considerando este Hamiltoniano como função de l (sabemos que l é inteiro para que as funções próprias sejam integráveis, mas a expressão está definida para l arbitrário), mostre que

$$\langle n_r\, l\, m_l\, s\, m_s |\, r^{-2}\, | n_r\, l\, m_l\, s\, m_s \rangle = \frac{1}{a_B^2 (n_r + l + 1)^3 (l + 1/2)}\,, \tag{45}$$

em que $a_B = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{Ze^2 m}$ é o raio de Bohr para o ião hidrogenóide.

Pista: Note que $E_{n_r\, l} = -\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 a_B (n_r+l+1)^2}$. Basta aplicar o teorema de Hellmann-Feynman, $\frac{\partial E_{n_r\, l}}{\partial l} = \langle n_r\, l\, m_l\, s\, m_s |\, \frac{\partial \hat{H}}{\partial l}\, | n_r\, l\, m_l\, s\, m_s \rangle$.

e) Considere agora a equação clássica do movimento do eletrão

$$\frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = -\frac{Ze^2 \boldsymbol{r}}{4\pi\varepsilon_0 r^3}\,, \tag{46}$$

em que $\boldsymbol{p} = m\boldsymbol{v}$ é o momento do eletrão.

Multiplicando escalarmente esta equação por $\boldsymbol{r}$ e integrando por partes, mostre que obtém a seguinte equação do movimento para $p_r = \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{r}/r$, a componente do momento ao longo da direção radial,

$$\frac{dp_r}{dt} = \frac{p^2 - p_r^2}{mr} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\,. \tag{47}$$

Mostre ainda que $L^2 = r^2(p^2 - p_r^2)$. Substituindo, obtenha

$$\frac{dp_r}{dt} = \frac{L^2}{mr^3} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\,, \tag{48}$$

que é a equação do movimento para p_r, expressa à custa da constante de movimento L^2.

f) A equação de Ehrenfest correspondente à equação (48) é dada por

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt} \langle n_r\, l\, m_l\, s\, m_s |\, \hat{p}_r\, | n_r\, l\, m_l\, s\, m_s \rangle \;&=\; \frac{\hbar^2 l(l+1)}{m} \langle n_r\, l\, m_l\, s\, m_s |\, \hat{r}^{-3}\, | n_r\, l\, m_l\, s\, m_s \rangle \\ &\quad - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0} \langle n_r\, l\, m_l\, s\, m_s |\, \hat{r}^{-2}\, | n_r\, l\, m_l\, s\, m_s \rangle\,. \end{aligned} \tag{49}$$

Use esta equação e a equação (45) para demonstrar que

$$\langle n_r\, l\, m_l\, s\, m_s |\, \hat{r}^{-3}\, | n_r\, l\, m_l\, s\, m_s \rangle = \frac{1}{a_B^3 (n_r + l + 1)^3 l (l + 1/2)(l + 1)}\,. \tag{50}$$

Pista: Note que $|n_r\, l\, m_l\, s\, m_s\rangle$ é uma solução da equação de Schrödinger independente do tempo.

g) Escrevendo, $\hat{\boldsymbol{L}} \cdot \hat{\boldsymbol{S}} = \frac{1}{2}(\hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{\boldsymbol{S}}^2)$, em que $\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{L}} + \hat{\boldsymbol{S}}$ é o operador do momento angular total do eletrão, e utilizando a base própria $|n\, j\, m_j,\, l\, s\rangle$, mostre que a correção à energia dos estados próprios devida à interação spin-órbita é dada em primeira ordem de teoria de perturbações por

$$E_{1\,n\,j\,l\,s} = \frac{Ze^2(g_e - 1)\hbar^2}{16\pi\varepsilon_0 m^2 c^2 a_B^3} \cdot \frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{n^3 l(l+1/2)(l+1)} \,. \tag{51}$$

Quais os valores de j possíveis?

h) Mostre que relativamente à energia do nível perturbado em questão, $E_{nl} = -\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 a_B n^2}$, a correção dada pela interação spin-órbita é da ordem de $Z^2\alpha^2$ em que $\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} \approx 1/137$ é a constante de estrutura fina. O que acontece quando Z cresce?

Exercício 15: *Método variacional para o potencial delta atrativo em 1d - parte II*

Verificamos na aula teórica que no caso de um potencial delta atrativo em 1d, localizado na origem, $V(x) = -V_0\delta(x)$, a energia do estado ligado era dada por $E_0 = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$, sendo a função de onda dada por $\psi_0(x) = \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x|}$, em que $\kappa = \frac{mV_0}{\hbar^2}$.

Consideramos o funcional $E(\alpha) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left(\frac{\hbar^2}{2m} \left| \frac{d\psi_\alpha}{dx} \right|^2 + V(x) \left|\psi_\alpha(x)\right|^2 \right)$ em que $\psi_\alpha(x)$ é uma função de onda variacional, dependente de um parâmetro α.

Escolhendo $\psi_\alpha(x) = \sqrt{\alpha} e^{-\alpha|x|}$, substituindo no funcional acima, e minimizando-o em ordem a α, verificamos que obtíamos a solução exata, como seria de esperar, dado que esta função de onda tem a mesma forma que a dita solução exata.

a) Considere agora a função de onda normalizada $\psi_\alpha(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{\alpha}{2}x^2}$. Substituindo no funcional acima, mostre que obtém $E(\alpha) = \frac{\hbar^2\alpha}{4m} - V_0\left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2}$.

b) Minimizando o funcional acima, mostre que $E(\alpha_{\text{min}}) = -\frac{mV_0^2}{\pi\hbar^2}$. Compare com o resultado exato e comente os seus resultados.

Pista: Considere um sistema de unidades tal que $\kappa = \frac{mV_0}{\hbar^2} = 1$, e compare igualmente as duas funções de onda, em particular os valores do seu quadrado na origem.

Exercício 16: *Desigualdade de Bell*

O propósito deste exercício é introduzir as questões que levaram aos trabalhos teóricos e experimentais que foram galardoados com o prémio Nobel da Física de 2022. Aquilo que aqui discutiremos não fará parte do processo de avaliação (não sairá no teste ou exame), mas como só utiliza conceitos já abordados noutros exercícios, fica como informação para os alunos.

Vimos no exercício 11 que, para um estado singleto, 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).

Como referido, existe um elemento de realidade para a componente do momento angular do sistema ao longo de qualquer eixo arbitrário, a saber, ela tem que ser igual a 0.

Vamos agora assumir que, embora não seja possível, de acordo com a Mecânica Quântica, medir simultaneamente as componentes de um dado spin ao longo de dois eixos distintos, $\hat{\boldsymbol{n}}^1$ e $\hat{\boldsymbol{n}}'^1$, no caso do primeiro spin, e $\hat{\boldsymbol{n}}^2$ e $\hat{\boldsymbol{n}}'^2$, no caso do segundo, essas componentes têm valores bem definidos, determinados por variáveis ocultas, no âmbito de uma teoria realista e local que completaria a Mecânica Quântica.

Nesse caso, é possível falar da distribuição conjunta $p_{\hat{\boldsymbol{n}}^1\,\hat{\boldsymbol{n}}'^1\,\hat{\boldsymbol{n}}^2\,\hat{\boldsymbol{n}}'^2}(\nu^1,\nu'^1,\nu^2,\nu'^2)$ e derivar dela diferentes distribuições marginais, isto é, $p_{\hat{\boldsymbol{n}}^1\,\hat{\boldsymbol{n}}^2}(\nu^1,\nu^2) = \sum_{\nu'^1,\nu'^2} p_{\hat{\boldsymbol{n}}^1\,\hat{\boldsymbol{n}}'^1\,\hat{\boldsymbol{n}}^2\,\hat{\boldsymbol{n}}'^2}(\nu^1,\nu'^1,\nu^2,\nu'^2)$, etc.

a*) Considere a combinação linear, $\Delta = p_{\hat{\boldsymbol{n}}^1\,\hat{\boldsymbol{n}}^2}(-,+) + p_{\hat{\boldsymbol{n}}'^1\,\hat{\boldsymbol{n}}^2}(+,-) + p_{\hat{\boldsymbol{n}}^1\,\hat{\boldsymbol{n}}'^2}(+,-) - p_{\hat{\boldsymbol{n}}'^1\,\hat{\boldsymbol{n}}'^2}(+,-)$. Recorrendo à distribuição conjunta, mostre que $0 \leq \Delta \leq 1$.

b*) Considere agora o resultado dado pela Mecânica Quântica, com a seguinte escolha de eixos, $\hat{\boldsymbol{n}}^1 = \hat{\boldsymbol{e}}_y$, $\hat{\boldsymbol{n}}'^1 = \hat{\boldsymbol{e}}_x$, $\hat{\boldsymbol{n}}^2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\boldsymbol{e}}_x + \hat{\boldsymbol{e}}_y)$, $\hat{\boldsymbol{n}}'^2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(-\hat{\boldsymbol{e}}_x + \hat{\boldsymbol{e}}_y)$, ou seja os eixos de medição das componentes do segundo spin estão rodados por $+45°$ em relação aos do primeiro spin. Mostre que $\Delta = \frac{1}{2}(1+\sqrt{2}) > 1$! Qual a origem da contradição e como interpretá-la fisicamente?

Exercício 17: *Função gama*

A função gama é definida para $x > 0$ real, por $\Gamma(x) = \int_0^\infty dt\, t^{x-1} e^{-t}$. Vamos aqui demonstrar algumas propriedades desta função usadas na aula teórica.

a) Integrando por partes, mostre que $\Gamma(x) = (x-1)\Gamma(x-1)$.

b) Mostre por indução que, para n inteiro, $\Gamma(n) = (n-1)!$.

Pista: Calcule explicitamente $\Gamma(1)$ e $\Gamma(2)$ e use a propriedade demonstrada na alínea anterior.

c) Mostre que $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$.

Pista: Faça a substituição de variável $t = x^2$ no integral.

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