Problemas de F.Q.–II

N. M. R. Peres
Universidade do Minho

17 de Dezembro de 2014

1 Teoria de perturbações independente do tempo

1. Considere o efeito de um campo magnético, $\boldsymbol{B} = B\boldsymbol{u}_z$, 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).

2. 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?

3. 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

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

2 Teoria de perturbações dependente do tempo

1. Considere um sistema que está num estado não perturnado $|n\rangle$, em $t = 0$. Durante um tempo $t > 0$ actua uma perturbação H_1. Mostre que a probabilidade de encontrar o sistema num estado $|k\rangle$ é dada por

$$P_{nk} = \frac{4}{\hbar^2}\frac{|\langle k|H_1|n\rangle|^2}{\omega_{kn}^2}\sin^2(\omega_{kn}t/2)\,, \tag{25}$$

com $\omega_{kn} = (E_k - E_n)/\hbar$.

2. Um oscilador harmónico no estado fundamental $|0\rangle$ é sujeito a uma pertubação da forma

$$H_1 = -xe^{-t^2/t_0^2}\,, \tag{26}$$

que actua para $t > 0$. Calcular a probabilidade the encontar o sistema nos estados excitados $|1\rangle$ e $|2\rangle$ para tempos muito longos. Mostre primeiro a seguinte identidade:

$$\int_0^\infty dt e^{-\alpha t^2 + i\omega t} = -i\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-\omega^2/(4\alpha)} . \tag{27}$$

O resultado para a probabilidade deverá ser:

$$P_{01} = \frac{\pi t_0^2}{2m\hbar\omega} e^{-\omega^2 t_0^2/2} . \tag{28}$$

3. Um átomo de hidrogénio, no estado fundamental ($1s$), é colocado entre as placas de um condensador. Para $t > 0$ é aplicado um campo que varia no tempo de acordo com a lei $E(t) = E_0 e^{-t/\tau}$, sendo nulo para tempos inferiores. O hamiltoniano de perturbação é o de uma carga num campo constante, dado por

$$H_1 = eE_0 z e^{-t/\tau} . \tag{29}$$

Calcule a probabilidade, após um tempo longo, de um electrão transitar para os estados $2s$ e $2p$ (com $m = 0$). Para o efeito necessita de

$$\psi_{1,0,0} = \frac{2}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} \tag{30}$$

$$\psi_{2,1,0} = \frac{2}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{(2a_0)^{3/2}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos\theta. \tag{31}$$

e do elemento de matriz (calcule-o; sugestão: expresse z como $z = r\cos\theta$)

$$\int d^3 r \psi_{2,1,0} z \psi_{1,0,0} = \frac{4!}{2^{3/2}} (2/3)^6 a_0 . \tag{32}$$

A probabilidade calculada deverá ser

$$P_{1s\to 2p} = \frac{2^{15}}{3^{10}} \frac{a_0^2 e^2 E_0^2}{\hbar^2(\omega^2 + 1/\tau^2)} . \tag{33}$$

Para as contas anteriores é útil o resultado

$$\int_0^\infty r^4 e^{-\beta r} dr = 4!/\beta^5 . \tag{34}$$

4. Considere uma partícula de massa m e carga q confinada numa caixa unidimensional de comprimento L. Inicialmente a partícula está no estado fundamental da caixa. Em $t = 0$ é aplicado um campo eléctrico da forma $E = E_0 e^{-t/\tau}$, o qual dá origem a um hamiltoniano de perturbação dado por $H_1 = -qxE$. Mostre que a probabilidade de encontar o sistema no primeiro estado excitado da caixa é dada, no limite $t \gg \tau$, por:

$$P_{12} \approx \frac{5^2}{9^2} \frac{64 L^2 q^2 E_0^2}{\hbar^2 \pi^4} \frac{\tau^2}{1 + [3\hbar\pi^2/(2mL^2)]^2 \tau^2} . \tag{35}$$

Mostre que P_{12} é efectivamente um número sem unidades.

5. Considere um oscilador harmónico anisotrópico, cujo hamiltoniano é dado por

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m(\omega_1 x^2 + \omega_2 y^2 + \omega_3 z^2)\,, \tag{36}$$

possuindo carga $-e$. No intervalo $0 \leq t \leq \tau$ o oscilador é iluminado por um laser, cujo campo eléctrico tem a forma

$$\vec{E}(t) = [E_0 \sin(\omega t), 0, 0]\,. \tag{37}$$

Para $t < 0$ o oscilador encontra-se no estado fundamental $|0,0,0\rangle$.

   (a) Escreva a função de onda do estado fundamental e do estado excitado $|1,0,0\rangle$ do oscilador harmónico

   (b) Considerando a aproximação dipolar, calcule a probabilidade de ao fim do tempo t o oscilador se encontrar no estado excitado $|1,0,0\rangle$.

6. Um sistema possui um estado fundamental ligado, de energia E_0, e um contínuo de estados de energia, $|E\rangle$, tais que $E_1 - \Delta/2 \leq E \leq E_1 + \Delta/2$, os quais são não-degenerados e normalizados de acordo com $\langle E'|E''\rangle = \delta(E' - E'')$. O sistema é sujeito, para $t > 0$, a um campo eléctrico da forma

$$\vec{E}(t) = [E_0 \sin(\omega t), 0, 0]\,, \tag{38}$$

com $\omega\hbar = E_1 - E_0$. Para $t < 0$ o sistema está no estado fundamental $|E_0\rangle$. Para $t < 0$ o sistema está no estado fundamental.

   (a) Quais as unidade dos estados $|E\rangle$?

   (b) Mostre que a probabilidade total de transição do estado fundamental para o contínuo de estados é dada por

$$P(t) = \frac{1}{\hbar^2}\int_{E_1-E_0}^{E_1+E_0} dE \left| \int_0^t \langle E|H_1(t')|E_0\rangle e^{i(E-E_0)t'/\hbar} dt' \right|^2 \,, \tag{39}$$

   onde $H_1(t)$ é o hamiltoniano de perturbação.

   (c) Calcule $P(t)$ na aproximação dipolar e mostre que para $t \gg \hbar/\Delta E$ é possível definir uma taxa de transição, Γ, que é independente do tempo.

3 Espalhamento de partículas

1. Consideremos o espalhamento unidimensional por uma função delta na origem, descrito pelo potencial $V(x) = g\delta(x)$, onde $g > 0$.

(a) A função de Green livre a uma dimensão é solução da seguinte equação

$$(d^2/dx^2 + k^2)G(x) = \delta(x)\,. \tag{40}$$

Mostre que a função $G(x) = Ce^{ik|x|}$ satisfaz a equação anterior, desde que se escolha a constante C de modo apropriado. Para o efeito mostre que:

- $d/dx(e^{ik|x|}) = ik\text{sign}(x)e^{ik|x|}$
- $d^2/dx^2(e^{ik|x|}) = -k^2e^{ik|x|} + 2ik\delta(x)e^{ik|x|}$.

A função sinal, sign(x), pode ser escrita como $\theta(x) - \theta(-x)$, onde $\theta(x)$ é a função degrau.

(b) A solução integral da equação de Schrödinger a uma dimensão pode ser escrita como

$$\psi(x) = e^{ikx} + \frac{2m}{\hbar^2}\int dx' G(x-x')V(x')\psi(x')\,. \tag{41}$$

Encontre o valor exacto de $\psi(0)$. Usando esse resultado mostre que pode escrever a solução geral da equação integral como

$$\psi(x) = e^{ikx} + g\frac{2m}{\hbar^2}\frac{G(x)}{1-2mgG(0)/\hbar^2}\,. \tag{42}$$

(c) Usando o resultado anterior calcule o coeficiente de transmissão através do potencial.

(d) Resolva o mesmo problema usando métodos tradicionais de Física Quântica I e verifique que os dois resultados concordam.

2. Para o potencial $V(r) = \alpha 1/r^2$, calcule, na primeira aproximação de Born, a secção eficaz diferencial $\sigma_B(\theta)$.

3. Considere o potencial criado por um dipolo constituído por duas cargas de sinal oposto localizadas em $y = \pm a$. O potencial criado por cada uma das cargas é naturalmente o potencial de Coulomb, mas deslocado da origem. Mostre que na primeira aproximação de Born, a secção eficaz diferencial é dada por

$$\sigma_B(\theta) \propto \frac{e^4m^2}{(\hbar k)^4}\frac{\sin^2(ka\sin\theta)}{(1-\cos\theta)^2}\,. \tag{43}$$

4. Na sala de aula mostrámos que uma onda plana da forma $e^{ikz} = e^{ikr\cos\theta}$ pode ser expandida em funções esféricas de Bessel, como

$$e^{ikr\cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} C_\ell j_\ell(kr)P_\ell(\cos\theta)\,. \tag{44}$$

Pretende-se mostrar com este problema que $C_\ell = (2\ell+1)i^\ell$. Para o efeito, proceda do seguinte modo:

- Multiplique a expressão anterior por $P_{\ell'}(\cos\theta)\sin\theta$ e integre em θ. Deverá obter

$$C_\ell j_\ell(kr)\frac{2}{2\ell+1} = \int_0^\pi d\theta \sin\theta e^{ikr\cos\theta} P_\ell(\cos\theta)\,. \tag{45}$$

- Integre por partes o segundo termo da equação anterior, obtendo

$$C_\ell j_\ell(kr)\frac{2}{2\ell+1} = \frac{1}{ikr}[P_\ell(\cos\theta)e^{ikr\cos\theta}]_0^\pi + \ldots. \tag{46}$$

  Sabendo que $P_\ell(1) = 1$ e $P_\ell(-1) = (-1)^\ell$ simplifique a expressão anterior. Argumente que os termos "..." na equação anterior decaem mais rapidamente que $1/r$ para $r \to \infty$. Assim, nesse limite podemos manter apenas o primeiro termo na igualdade, isto é,

$$C_\ell j_\ell(kr)\frac{2}{2\ell+1} = \frac{1}{ikr}[e^{ikr} - (-1)^\ell e^{-ikr}]\,. \tag{47}$$

- Considerando agora a expansão das funções de Bessel para $r \to \infty$ vem

$$j_\ell(kr) = \frac{1}{kr}\sin(kr - \ell\pi/2)\,, \tag{48}$$

  e usando este resultado mostre que se conclui que C_ℓ tem o valor indicado.

Usámos algures na demonstração o resultado

$$\int_{-1}^1 P_\ell(x)P_m(x)dx = \frac{2}{2\ell+1}\delta_{\ell,m}\,. \tag{49}$$