Física Quântica II

Soluções

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)

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \cdot \frac{Ze\,\boldsymbol{v}_N \times \boldsymbol{r}}{r^3}\,,\tag{55}$$

em que μ_0 é a permeabilidade magnética do vazio, c a velocidade da luz e v_N é a velocidade do núcleo percecionada pelo eletrão.

a) No referencial em que o eletrão está em repouso, $v_N = -v$, pelo que escrevendo $v \times r = -\frac{L}{m}$ e substituindo na equação (55), com $\mu_0 = 1/(\varepsilon_0 c^2)$, obtemos

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = \frac{Ze\,\boldsymbol{L}}{4\pi\varepsilon_0 mc^2 r^3}\,,\tag{56}$$

que é a solução do exercício.

b) No referencial em questão, o eletrão tem ainda um momento angular próprio S, o seu spin, estando a ele associado um momento magnético μ_e . A energia de interação deste momento magnético com o campo magnético criado pelo nucleo é dada por

$$H_{rf} = -\boldsymbol{\mu}_e \cdot \boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}), \tag{57}$$

pelo que substituindo a expressão para o momento magnético do electrão, $\mu_e = -\frac{eg_e}{2m} S$, em que $g_e = 2$ é o fator de Landé do eletrão (este valor deve-se a um efeito puramente quântico e relativista), e a expressão para B(r) dada pela equação (56) na equação (57), obtemos

$$H_{rf} = \frac{Ze^2 g_e}{8\pi\varepsilon_0 m^2 c^2} \cdot \frac{\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{S}}{r^3}, \tag{58}$$

que é o resultado procurado.

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) $H_{so} = H_{rf} + \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{S}$, em que $\mathbf{\Omega} \approx \frac{1}{2c^2} (\mathbf{a} \times \mathbf{v})$ 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 \mathbf{a} é a aceleração a que o eletrão está sujeito.

Esta aceleração é dada pela Lei de Coulomb $a=-\frac{Ze^2r}{4\pi\varepsilon_0mr^3}$, logo temos $\Omega=-\frac{Ze^2r\times v}{8\pi\varepsilon_0mc^2r^3}=-\frac{Ze^2L}{8\pi\varepsilon_0m^2c^2r^3}$. Substituindo esta expressão acima, obtemos

$$H_{so} = \frac{Ze^2 (g_e - 1)}{8\pi\varepsilon_0 m^2 c^2} \cdot \frac{\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{S}}{r^3},$$
 (59)

que é o resultado desejado.

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} , L e S a operadores).

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

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r},$$
(60)

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 arbitrário²), temos

$$\langle n_r \, l \, m_l \, s \, m_s | \, \frac{\partial \hat{H}_l}{\partial l} \, | n_r \, l \, m_l \, s \, m_s \rangle = \frac{\hbar^2 \, (l + 1/2)}{m} \, \langle n_r \, l \, m_l \, s \, m_s | \, r^{-2} \, | n_r \, l \, m_l \, s \, m_s \rangle . \quad (61)$$

Como $E_{n_r\,l}=-\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 a_B(n_r+l+1)^2}$, em que $a_B=\frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{Ze^2m}$ é o raio de Bohr para o ião hidrogenóide, e logo $\frac{\partial E_{n_r\,l}}{\partial l}=\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 a_B(n_r+l+1)^3}$, substituindo este resultado na equação (61) após invocarmos o teorema de Hellmann-Feynman, obtemos

$$\langle n_r \, l \, m_l \, s \, m_s | \, r^{-2} \, | n_r \, l \, m_l \, s \, m_s \rangle = \frac{1}{a_B^2 (n_r + l + 1)^3 (l + 1/2)}. \tag{62}$$

e) Consideramos agora a equação clássica do movimento do eletrão

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{Ze^2\mathbf{r}}{4\pi\varepsilon_0 r^3},\tag{63}$$

em que p = mv é o momento do eletrão.

Multiplicando escalarmente esta equação por r e integrando por partes, obtemos

$$\frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{dp_r}{dt} - \frac{\mathbf{p}}{r} \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} + \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{r^2} \frac{dr}{dt}
= -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}.$$
(64)

Mas $\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\mathbf{p}}{m}$ e $\frac{dr}{dt} = \frac{p_r}{m}$, enquanto que $\mathbf{p} \cdot \mathbf{r} = p_r r$. Logo, obtemos

$$\frac{dp_r}{dt} = \frac{p^2 - p_r^2}{mr} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}.$$
 (65)

Agora, $\boldsymbol{L}^2 = (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}) \cdot (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}) = \boldsymbol{r} \cdot (\boldsymbol{p} \times (\boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p})) = \boldsymbol{r} \cdot (p^2 \boldsymbol{r} - (\boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{r}) \boldsymbol{r}) = r^2 (p^2 - p_r^2).$

Substituindo, obtemos

$$\frac{dp_r}{dt} = \frac{L^2}{mr^3} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2},\tag{66}$$

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

Para estados próprios do Hamiltoniano que não estejam normalizados, é fácil demonstrar que se estes e o dito Hamiltoniano dependerem de um parâmetro μ , se tem $\frac{\partial E_{\mu}}{\partial \mu} = \frac{\langle \psi_{\mu} | \frac{\partial \hat{H}_{\mu}}{\partial \mu} | \psi_{\mu} \rangle}{\langle \psi_{\mu} | \psi_{\mu} \rangle}$. A demonstração fica como exercício.

f) A equação de Ehrenfest correspondente à equação (66) é dada por

$$\frac{d}{dt} \langle n_r \, l \, m_l \, s \, m_s | \, \hat{p}_r \, | n_r \, l \, m_l \, s \, m_s \rangle = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{m} \langle n_r \, l \, m_l \, s \, m_s | \, \hat{r}^{-3} \, | n_r \, l \, m_l \, s \, m_s \rangle
- \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0} \langle n_r \, l \, m_l \, s \, m_s | \, \hat{r}^{-2} \, | n_r \, l \, m_l \, s \, m_s \rangle .$$
(67)

O lado esquerdo desta equação tem que ser zero, uma vez que o estado $|n_r l m_l s m_s\rangle$ não depende do tempo³. Portanto, os termos do lado direito têm que se cancelar entre si. Substituindo a equação (62) em (67), obtemos

$$\langle n_r \, l \, m_l \, s \, m_s | \, \hat{r}^{-3} \, | n_r \, l \, m_l \, s \, m_s \rangle = \frac{1}{a_B^3 (n_r + l + 1)^3 l (l + 1/2) (l + 1)} \,. \tag{68}$$

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, podemos escrever a equação (59) como

$$\hat{H}_{so} = \frac{Ze^2 (g_e - 1)}{16\pi\varepsilon_0 m^2 c^2} \cdot \frac{\hat{\boldsymbol{J}}^2 - \hat{\boldsymbol{L}}^2 - \hat{\boldsymbol{S}}^2}{r^3}.$$
 (69)

Os estados próprios deste operador são $|n \ j \ m_j, \ l \ s\rangle$, os estados próprios do momento angular total. Assim, utilizando o resultado (68), obtemos como correção à energia dos estados próprios devida à interação spin-órbita, em primeira ordem de teoria de perturbações

$$E_{1njls} = \frac{Ze^2(g_e - 1)\hbar^2}{16\pi\varepsilon_0 m^2 c^2 a_B^3} \cdot \frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{n^3 l(l+1/2)(l+1)},$$
(70)

em que $j = l \pm 1/2$.

h) Dividindo o resultado anterior por $|E_{nl}|$, em que $E_{nl}=-\frac{Ze^2}{8\pi\varepsilon_0 a_B n^2}$, vemos que esta razão é dada por

$$\frac{E_{1\,n\,j\,l\,s}}{|E_{nl}|} = \frac{(g_e - 1)\hbar^2}{2m^2c^2a_B^2} \cdot \frac{j(j+1) - l(l+1) - 3/4}{nl(l+1/2)(l+1)}.$$
 (71)

Mas
$$\frac{\hbar^2}{m^2c^2a_B^2}=\left(\frac{\hbar}{mca_B}\right)^2=\left(\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\right)^2=Z^2\alpha^2$$
, em que $\alpha=\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}\approx 1/137$ é a constante de estrutura fina.

Para um núcleo leve, esta quantidade é muito pequena, mas quando Z cresce ela vai-se aproximando de 1, pelo que a interação spin-órbita vai-se tornando mais forte, a ponto de não ser possível tratá-la como uma mera perturbação. De facto, os cálculos de *density-functional theory* para átomos pesados como o Au têm que considerar os efeitos relativistas de modo auto-consistente e não como mera perturbação.

³Para um operador que não depende explicitamente do tempo, a equação de Ehrenfest é dada por $\frac{d}{dt} \langle \psi_t | \hat{A} | \psi_t \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_t | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi_t \rangle$. No caso de um Hamiltoniano independente do tempo, qualquer auto-estado $|\psi_E\rangle$ deste operador evolui no tempo como $|\psi_t\rangle = |\psi_E\rangle \, e^{-iEt/\hbar}$, pelo que facilmente se vê que $\langle \psi_t | \hat{A} | \psi_t \rangle$ é independente do tempo. De igual modo, $\frac{1}{i\hbar} \langle \psi_t | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi_t \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_E | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi_E \rangle = 0$ (aplique \hat{H} a $|\psi_E\rangle$ ou a $\langle \psi_E |$).

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) Consideramos 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, obtemos

$$E(\alpha) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \, x^2 e^{-\alpha x^2} - V_0 \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2} \,, \tag{72}$$

onde calculamos a derivada de $e^{-\frac{\alpha}{2}x^2}$ no primeiro termo e usamos as propriedades da função delta para calcular o segundo. Como vimos na aula teórica $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \, x^2 e^{-\alpha x^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \alpha^{-3/2}$, pelo que obtemos $E(\alpha) = \frac{\hbar^2 \alpha}{4m} - V_0 \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{1/2}$.

b) Minimizando o funcional, obtemos $E'(\alpha_{\min}) = \frac{\hbar^2}{4m} - \frac{V_0}{2} \left(\frac{1}{\pi\alpha_{\min}}\right)^{1/2} = 0$, ou seja $\alpha_{\min} = \frac{4m^2V_0^2}{\pi\hbar^2}$, pelo que substituindo acima, obtemos $E(\alpha_{\min}) = -\frac{mV_0^2}{\pi\hbar^2} > -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2}$. Tal valor faz sentido, já que sabemos que o resultado exato para a energia do estado fundamental é sempre inferior ao aproximado.

Considerando um sistema de unidades tal que $\kappa=\frac{mV_0}{\hbar^2}=1$ (de modo a podermos representar graficamente a função), temos $\psi_0(x)=e^{-|x|}$ e $\psi_{\alpha_{\min}}(x)=\left(\frac{4}{\pi^2}\right)^{1/4}e^{-\frac{2}{\pi}x^2}$, pelo que $|\psi_0(0)|^2=1$ e $|\psi_{\alpha_{\min}}(0)|^2=\frac{2}{\pi}<1$.

Como o valor esperado da energia potencial, que é o termo dominante (a energia total é negativa para um estado ligado e a contribuição proveniente da energia cinética é sempre positiva), só depende do valor da função de onda em x=0, um menor valor do módulo quadrado da função de onda nesse ponto irá dar origem a uma contribuição menor (i.e. menos negativa) para a energia potencial.

Concluimos que a função de onda exata descreve um estado mais localizado do que a função de onda aproximada, como seria de esperar (ver figura 1).

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{n}^1 e obter $\nu^1 = \pm 1$, e medir a componente do segundo

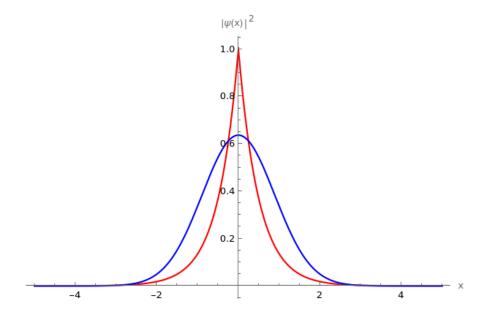


Figure 1: Módulo quadrado da função de onda: comparação entre o resultado exato (a vermelho) e a função de onda gaussiana variacional (a azul) para o potencial delta de Dirac atrativo em 1d (unidades escolhidas explicadas no texto).

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{n}^1 e \hat{n}'^1 , no caso do primeiro spin, e \hat{n}^2 e \hat{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, temos

$$p_{\hat{\boldsymbol{n}}^{1} \hat{\boldsymbol{n}}^{2}}(-,+) = \sum_{\nu'^{1},\nu'^{2}} p_{\hat{\boldsymbol{n}}^{1} \hat{\boldsymbol{n}}'^{1} \hat{\boldsymbol{n}}^{2} \hat{\boldsymbol{n}}'^{2}}(-,\nu'^{1},+,\nu'^{2}),$$

$$p_{\hat{\boldsymbol{n}}'^{1} \hat{\boldsymbol{n}}^{2}}(+,-) = \sum_{\nu'^{1},\nu'^{2}} p_{\hat{\boldsymbol{n}}^{1} \hat{\boldsymbol{n}}'^{1} \hat{\boldsymbol{n}}^{2} \hat{\boldsymbol{n}}'^{2}}(\nu'^{1},+,-,\nu'^{2}),$$

$$p_{\hat{\boldsymbol{n}}^{1} \hat{\boldsymbol{n}}'^{2}}(+,-) = \sum_{\nu'^{1},\nu'^{2}} p_{\hat{\boldsymbol{n}}^{1} \hat{\boldsymbol{n}}'^{1} \hat{\boldsymbol{n}}^{2} \hat{\boldsymbol{n}}'^{2}}(+,\nu'^{1},\nu'^{2},-),$$

$$p_{\hat{\boldsymbol{n}}'^{1} \hat{\boldsymbol{n}}'^{2}}(+,-) = \sum_{\nu'^{1},\nu'^{2}} p_{\hat{\boldsymbol{n}}^{1} \hat{\boldsymbol{n}}'^{1} \hat{\boldsymbol{n}}^{2} \hat{\boldsymbol{n}}'^{2}}(\nu'^{1},+,\nu'^{2},-).$$

Substituindo estas expressões na expressão de Δ e efectuando explicitamente os somatórios, obtemos após o cancelamento de alguns terms dois a dois, o resultado

$$\Delta = p_{\hat{\boldsymbol{n}}^{1} \hat{\boldsymbol{n}}^{\prime 1} \hat{\boldsymbol{n}}^{2} \hat{\boldsymbol{n}}^{\prime 2}(-,+,+,+) + p_{\hat{\boldsymbol{n}}^{1} \hat{\boldsymbol{n}}^{\prime 1} \hat{\boldsymbol{n}}^{2} \hat{\boldsymbol{n}}^{\prime 2}(-,-,+,+)
+ p_{\hat{\boldsymbol{n}}^{1} \hat{\boldsymbol{n}}^{\prime 1} \hat{\boldsymbol{n}}^{2} \hat{\boldsymbol{n}}^{\prime 2}(-,-,+,-) + p_{\hat{\boldsymbol{n}}^{1} \hat{\boldsymbol{n}}^{\prime 1} \hat{\boldsymbol{n}}^{2} \hat{\boldsymbol{n}}^{\prime 2}(+,-,+,-)
+ p_{\hat{\boldsymbol{n}}^{1} \hat{\boldsymbol{n}}^{\prime 1} \hat{\boldsymbol{n}}^{2} \hat{\boldsymbol{n}}^{\prime 2}(+,-,-,-) + p_{\hat{\boldsymbol{n}}^{1} \hat{\boldsymbol{n}}^{\prime 1} \hat{\boldsymbol{n}}^{2} \hat{\boldsymbol{n}}^{\prime 2}(+,+,-,+)
+ p_{\hat{\boldsymbol{n}}^{1} \hat{\boldsymbol{n}}^{\prime 1} \hat{\boldsymbol{n}}^{2} \hat{\boldsymbol{n}}^{\prime 2}(+,+,-,-) + p_{\hat{\boldsymbol{n}}^{1} \hat{\boldsymbol{n}}^{\prime 1} \hat{\boldsymbol{n}}^{2} \hat{\boldsymbol{n}}^{\prime 2}(-,+,-,+) .$$
(73)

Todas as probabilidades são positivas e referem-se a 8 eventos distintos dos 16 possíveis, $\log 0 < \Delta < 1$.

b*) O resultado dado pela Mecânica Quântica é $\Delta = \frac{1}{2} + \frac{1}{4} (\hat{\boldsymbol{n}}^1 \cdot \hat{\boldsymbol{n}}^2 + \hat{\boldsymbol{n}}^1 \cdot \hat{\boldsymbol{n}}^2 + \hat{\boldsymbol{n}}^{'1} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}^2 - \hat{\boldsymbol{n}}^{'1} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}^{'2})$, como se conclui facilmente do exercício 11. Com a 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 $+45^\circ$ em relação aos do primeiro spin, temos $\hat{\boldsymbol{n}}^1 \cdot \hat{\boldsymbol{n}}^2 = 1/\sqrt{2}$, $\hat{\boldsymbol{n}}^2 \cdot \hat{\boldsymbol{n}}^2 = 1/\sqrt{2}$, logo $\hat{\boldsymbol{n}} = \frac{1}{2}(1+\sqrt{2}) > 1!$ A origem desta contradição derivou de supormos que existe uma distribuição conjunta de probabilidades quando ela se refere a diferentes componentes do mesmo spin (da primeiro

não comutam. Este problema é conhecido como o *problema das distribuições marginais* em teoria de probabilidades. As ditas distribuições são compatíveis entre si, dando origem à mesma distribuição para um único spin, mas não é possível derivá-las de uma mesma distribuição

ou do segundo), sabendo nós que tais observáveis são representados por operadores que

Exercício 17: Função gama

conjunta.

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) Temos, integrando por partes

$$\Gamma(x) = -\int_0^\infty dt \, t^{x-1} \frac{de^{-t}}{dt}$$

$$= -(t^{x-1}e^{-t})_0^\infty + (x-1) \int_0^\infty dt \, t^{x-2}e^{-t}$$

$$= (x-1)\Gamma(x-1). \tag{74}$$

- **b)** $\Gamma(1) = \int_0^\infty dt \, e^{-t} = 1$, $\Gamma(2) = \int_0^\infty dt \, t e^{-t} = \int_0^\infty dt \, e^{-t} = 1$, após integração por partes. Suponhamos agora que $\Gamma(n) = (n-1)!$. Assim, $\Gamma(n+1) = n\Gamma(n) = n!$, pela alínea anterior, logo a proposição está demonstrada.
- c) Temos $\Gamma(1/2) = \int_0^\infty dt \, t^{-1/2} e^{-t} = 2 \int_0^\infty dx \, e^{-x^2} = \sqrt{\pi}$, após a substituição de variável $t=x^2$ no integral.

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