Jaime E. Santos
Departamento de Física

Física Quântica II

Exame 25/01/2023

Por favor, não se esqueça de incluir o seu **nome**, **número de aluno** e de assinalar o **número do exercício**, em cada folha que utilize. Os exercícios devem ser resolvidos a caneta azul ou preta e é permitido utilizar uma calculadora gráfica com a memória limpa (ou seja, não são permitidos formulários que não os dispensados abaixo). Por favor, explicite bem o seu raciocínio e numere as folhas que utilizar para apresentar a sua resolução dos exercícios.

Por favor, preste atenção às informações dadas nas páginas 3 e 4.

Exercício 1: *Adição de dois momentos angulares*

Suponha que um momento angular orbital caracterizado por $l = 2$ é adicionado a um spin, caracterizado por $s = 1/2$.

a) Com base na teoria de adição de momentos angulares da Mecânica Quântica, justifique porque há dois valores possíveis para o número quântico j, $j_{\text{max}} = 5/2$ e $j_{\text{min}} = 3/2$, que caracteriza os multipletos de momento angular total, $\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{L}} + \hat{\boldsymbol{S}}$. Enumere os estados $|j\, m_j\,, 2\, 1/2\rangle$ de cada multipleto. **(2 valores)**

b) Explique a razão da igualdade

$$|j_{\text{max}}\, m_j = j_{\text{max}},\, 2\, 1/2\rangle = |l = 2\, m_l = 2\, s = 1/2\, m_s = 1/2\rangle\,.$$

(1 valor)

c) Utilizando operadores escada (ver o formulário), mostre que

$$\begin{aligned}|j_{\text{max}}\, m_j = j_{\text{max}} - 1,\, 2\, 1/2\rangle \;\; &= \;\; \frac{1}{\sqrt{5}} \cdot (2\, |l = 2\, m_l = 1\, s = 1/2\, m_s = 1/2\rangle \\ &\quad + |l = 2\, m_l = 2\, s = 1/2\, m_s = -1/2\rangle)\,.\end{aligned}$$

(2 valores)

d) Justifique a igualdade

$$\begin{aligned}|j_{\text{min}}\, m_j = j_{\text{min}},\, 2\, 1/2\rangle \;\; &= \;\; \frac{1}{\sqrt{5}} \cdot (|l = 2\, m_l = 1\, s = 1/2\, m_s = 1/2\rangle \\ &\quad - 2\, |l = 2\, m_l = 2\, s = 1/2\, m_s = -1/2\rangle)\,.\end{aligned}$$

(1 valor)

Exercício 2: *Teoria de perturbações independentes do tempo*

Considere um oscilador harmónico bi-dimensional isotrópico, cuja dinâmica é descrita por um Hamiltoniano $\hat{H}_0 = \hbar\omega_0(\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + \hat{a}_y^\dagger \hat{a}_y + 1)$, em que as expressões para os operadores de destruição e de criação são dadas no formulário.

Considere a perturbação $\hat{H}_1 = -\frac{\epsilon}{m}\hat{p}_x\hat{p}_y$, em que ϵ é uma constante adimensional com $\epsilon \ll 1$.

a) Mostre que a correccão de energia $E^1_{0,0}$ ao estado fundamental do sistema, $|0,0\rangle$, que é não degenerado, devida a esta perturbação, é igual a zero em primeira ordem da teoria de perturbações. **(2 valores)**

b) Utilizando a fórmula para a correção de segunda ordem à energia do estado fundamental (ver formulário), calcule o valor dessa correção. **(2 valores)**

c) Os primeiros estados excitados deste sistema são degenerados. Enumere-os e calcule a correção à sua energia devida a esta perturbação em teoria de perturbações de primeira ordem para níveis degenerados.

Note que é pedida apenas a correção de energia de primeira ordem. **(2 valores)**

Exercício 3: *Teoria de perturbações dependentes do tempo*

Um oscilador harmónico em uma dimensão, de carga $-e$, cuja dinâmica é caracterizada pelo Hamiltoniano $\hat{H}_0 = \hbar\omega_0(\hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x + 1/2)$, interage com um campo elétrico constante. Tal perturbação pode ser representada (aparte um termo irrelevante dependente do tempo) na chamada velocity gauge, como $\hat{H}_1(t) = -\frac{e\mathcal{E}t}{m}\hat{p}_x$, em que $\mathcal{E}$ é a magnitude do campo elétrico.

No instante inicial, $t = 0$, o oscilador encontra-se no seu primeiro estado excitado, momento a partir do qual a perturbação é aplicada. Calcule a probabilidade de transição para o estado fundamental do sistema não perturbado a $t = T$ (ver formulário). **(3 valores)**

Pista: Para resolver corretamente o exercício, comece por identificar o estado inicial e final do sistema e as respetivas energias de cada um.

Exercício 4: *Dinâmica de um spin* $1/2$

Um spin $1/2$, que se encontra no estado próprio de $\hat{\sigma}_z$ com valor próprio igual a $+1$, penetra, a $t = 0$, numa região em que existe um campo magnético segundo y, de tal modo que o Hamiltoniano que descreve a sua dinâmica é dado por $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar\omega_0}{2}\hat{\sigma}_y$.

a) Mostre que o estado do sistema para $t > 0$, é descrito pela função de onda

$$|\Psi_t\rangle = \cos(\omega_0 t/2)\,|+\rangle - \sin(\omega_0 t/2)\,|-\rangle\,, \tag{1}$$

onde expressamos a dita função de onda na base dos estados próprios de $\hat{\sigma}_z$, $|\pm\rangle$. **(2 valores)**

Pista: Comece por escrever o estado inicial como uma sobreposição dos estados próprios do Hamiltoniano.

b) Se o spin viajar em linha reta com velocidade constante v, qual deve ser a dimensão mínima da região em que está aplicado o campo magnético acima de modo a que, quando abandonar essa região, se encontra no estado próprio de $\hat{\sigma}_x$, $|+,\hat{\boldsymbol{x}}\rangle$? **(1 valor)**

Pista: Note que um estado quântico está sempre definido a menos de um factor de fase.

Exercício 5: *Anti-simetria da função de onda de um sistema atómico com dois fermiões*

Considere um estado excitado do átomo ${}^4_2$He, onde o primeiro eletrão ocupa o nível $2s$, sendo a projeção do seu spin ao longo do eixo z igual para $-\hbar/2$ e o segundo eletrão ocupa o nível $3s$, sendo a projeção do seu spin ao longo do eixo z também igual a $-\hbar/2$.

Escreva a função de onda com a simetria apropriada dos dois eletrões no espaço de posição e de spin. Qual é a densidade de probabilidade de encontrar ambos os eletrões na mesma localização espacial? Considere as funções de onda espaciais de cada eletrão como sendo dadas por $\varphi_{2s}(\boldsymbol{r}_1)$, $\varphi_{3s}(\boldsymbol{r}_2)$. **(2 valores)**

Pista: Escreva a função de onda no espaço real e de spin dos dois eletrões como produto das funções espaciais e de spin de cada eletrão e aplique o operador de anti-simetrização $\hat{A} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \hat{P}_{12})$ a essa função de onda (o fator de normalização já está corretamente incluído), em que $\hat{P}_{12}$ é o operador de troca das coordenadas espaciais $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2$, e de spin σ_1, σ_2, dos eletrões.

Exercício 6*: *Manipulação de um spin recorrendo a dois campos magnéticos distintos*

Se um spin $1/2$ se encontra, a $t = 0$, no estado próprio de $\hat{\sigma}_z$ com valor próprio igual a $+1$, não é possível, aplicando um campo magnético constante ao longo de x, ou de z, fazê-lo evoluir de modo a que se encontre, num instante $T > 0$, no estado próprio de $\hat{\sigma}_x$, $|+, \hat{\boldsymbol{x}}\rangle$. Mas, se a dinâmica do sistema for determinada à vez pelos Hamiltonianos $\hat{H} = -\frac{\hbar\omega_0}{2}\hat{\sigma}_x$ e $\hat{H}' = -\frac{\hbar\omega_0}{2}\hat{\sigma}_z$, é possível obter esse estado.

Descreva um protocolo válido para conseguir isso. Deve determinar se o sistema está sujeito primeiro a $\hat{H}$ ou a $\hat{H}'$, e deve calcular o tempo T total necessário para obter $|+, \hat{\boldsymbol{x}}\rangle$, e ainda os tempos parciais T_1 e T_2 (com $T = T_1 + T_2$), em que a dinâmica do spin é descrita pelo primeiro ou pelo segundo Hamiltoniano. **(2 valores extra)**

Pista: As pistas são as mesmas que lhe foram dadas para resolver as duas alíneas do exercício 4.

Informações: A nota máxima do exame são 20 valores. Qualquer pessoa com nota superior a essa verá a sua classificação reduzida à nota máxima, o exercício extra 6 comporta alguma dificuldade suplementar e tem por objetivo permitir aos alunos melhorarem as suas classificações.

Formulário:

Exercício 1:

A ação dos operadores escada do momento angular orbital nos auto-estados de $\hat{\boldsymbol{L}}^2$ e $\hat{L}_z$ é dada por

$$\hat{L}_\pm | \, l \, m \, \rangle = \hbar\sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)} | \, l \, m \pm 1 \, \rangle \, , \tag{2}$$

sendo que equações análogas são válidas para os operadores $\hat{J}_\pm$ e $\hat{S}_\pm$ e respetivos auto-estados.

Exercício 2:

Os operadores de destruição e criação do oscilador harmónico bidimensional são dados por $\hat{a}_x = \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\,\hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega_0}}\,\hat{p}_x\right)$, $\hat{a}_x^\dagger = \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\,\hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega_0}}\,\hat{p}_x\right)$, $\hat{a}_y = \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\,\hat{y} + i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega_0}}\,\hat{p}_y\right)$, $\hat{a}_y^\dagger = \left(\sqrt{\frac{m\omega_0}{2\hbar}}\,\hat{y} - i\sqrt{\frac{1}{2\hbar m\omega_0}}\,\hat{p}_y\right)$.

Aqui $\hat{x}$, $\hat{p}_x$, $\hat{y}$ e $\hat{p}_y$ são os operadores de posição e momento nas direções cartesianas de x e y. Dadas as relações de comutação entre estes operadores, resulta que $[\hat{a}_x, \hat{a}_x^\dagger] = \hat{\mathbb{1}}$ e $[\hat{a}_y, \hat{a}_y^\dagger] = \hat{\mathbb{1}}$, sendo que os restantes comutadores que envolvem operadores de criação e destruição são nulos.

Os estados próprios do Hamiltoniano $\hat{H}_0$ são os estados próprios dos operadores de ocupação, $\hat{n}_x = \hat{a}_x^\dagger\hat{a}_x$, $\hat{n}_y = \hat{a}_y^\dagger\hat{a}_y$, $|n_x, n_y\rangle$, sendo que os valores próprios destes operadores são dados por $n_x = 0, 1, 2, 3, \ldots$ e $n_y = 0, 1, 2, 3, \ldots$.

Recorde que $\hat{a}_x |n_x, n_y\rangle = \sqrt{n_x}\, |n_x - 1, n_y\rangle$, $\hat{a}_x^\dagger |n_x, n_y\rangle = \sqrt{n_x + 1}\, |n_x + 1, n_y\rangle$, $\hat{a}_y |n_x, n_y\rangle = \sqrt{n_y}\, |n_x, n_y - 1\rangle$, $\hat{a}_y^\dagger |n_x, n_y\rangle = \sqrt{n_y + 1}\, |n_x, n_y + 1\rangle$.

A fórmula para a correção de segunda ordem à energia do estado fundamental é dada por $E_{0,0}^2 = \sum_{n_x \neq 0 \,\vee\, n_y \neq 0} \frac{|\langle n_x, n_y| \hat{H}_1 |0,0\rangle|^2}{E_{0,0} - E_{n_x, n_y}}$. Note que o somatório é sobre todos os valores de n_x e n_y tais que pelo menos um deles é diferente de zero. Evidentemente, estão presentes no resultado final apenas aqueles pares de valores (n_x, n_y) para os quais o elemento de matriz $\langle n_x, n_y| \hat{H}_1 |0, 0\rangle$ é distinto de zero.

Exercício 3:

Veja as informações relativas ao exercício 2 para as definições dos operadores relevantes, $\hat{a}_x$ e $\hat{a}_x^\dagger$. Recordo-lhe que para um oscilador a uma dimensão, os estados próprios de $\hat{H}_0$ são os estados próprios do operador de ocupação, $\hat{n}_x = \hat{a}_x^\dagger \hat{a}_x$, sendo que os valores próprios deste operador são dados por $n_x = 0, 1, 2, 3, \ldots$.

Recorde ainda que $\hat{a}_x |n_x\rangle = \sqrt{n_x}\, |n_x - 1\rangle$, $\hat{a}_x^\dagger |n_x\rangle = \sqrt{n_x + 1}\, |n_x + 1\rangle$.

A amplitude de transição de um auto-estado inicial $|n\rangle$ do Hamiltoniano $\hat{H}_0$ para um auto-estado final $|m\rangle$ é, de acordo com a teoria de perturbações dependentes do tempo, dada, em primeira ordem na perturbação $\hat{H}_1(t)$, por

$$\gamma_{n\to m}^1(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} du \ \langle m| \hat{H}_1(u) |n\rangle \, e^{-i\omega_{nm}(u - t_0)} \,, \tag{3}$$

em que $\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}$ e t_0 é o momento em que a perturbação é aplicada.

Os seguintes integrais poderão ser-lhe úteis

$$\int_0^x dv\, v \cos v = x \sin x + \cos x - 1.$$

$$\int_0^x dv\, v \sin v = \sin x - x \cos x.$$

Exercício 4:

As matrizes de Pauli são definidas como

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \,, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \,, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \,. \tag{4}$$

Em termos dos auto-estados de $\hat{\sigma}_z$, $|\pm\rangle$, os auto-estados de $\hat{\sigma}_x$ são dados por $|+, \hat{\mathbf{x}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$ e $|-, \hat{\mathbf{x}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - |-\rangle)$. Os auto-estados de $\hat{\sigma}_y$ são dados por $|+, \hat{\mathbf{y}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + i\,|-\rangle)$ e $|-, \hat{\mathbf{y}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle - i\,|-\rangle)$.

Exercício 6: Veja a lista de fórmulas necessárias para resolver o exercício 4.

Total: 20 + 2 Valores