Trabalho II

Questão 01: Considere a correção de Darwin para a estrutura fina do átomo de Hidrogênio. Na expansão em série de Taylor para o potencial elétrico Φ, obtenha os 4º e 5º termos. Desenvolva os cálculos necessários para obter $\tilde{U}$ incluindo esses termos. Feito isso, use os termos correspondentes de $\tilde{U}$ como hamiltonianos de perturbação e desenvolva os cálculos necessários para obter a correção perturbativa de 1ª ordem correspondente para a energia.

Solução: Obtenção dos 4º e 5º termos da série:

$$\Phi(\vec{r}+\vec{r}') = \Phi(\vec{r}) + \sum_{i=1}^{3}\frac{\partial \Phi}{\partial x_i}x_i' + \frac{1}{2!}\sum_{i,j=1}^{3}\frac{\partial^2\Phi}{\partial x_i \partial x_j}x_i'x_j' + \frac{1}{3!}\sum_{i,j,k=1}^{3}\frac{\partial^3\Phi}{\partial x_i\partial x_j\partial x_k}x_i'x_j'x_k' + \frac{1}{4!}\sum_{i,j,k,l=1}^{3}\frac{\partial^4\Phi}{\partial x_i\partial x_j\partial x_k\partial x_l}x_i'x_j'x_k'x_l' + \frac{1}{5!}\sum_{i,j,k,l,m=1}^{3}\frac{}{\partial x_i\partial x}$$

Vamos desenvolver os termos $\tilde{U}$. Aqui, precisamos calcular o termo de 4ª ordem apenas, pois os termos de ordem ímpar (3ª e 5ª ordem) serão nulos. No caso, teremos um número ímpar de variáveis cartesianas. Como $\rho_0(\vec{r}') = \rho_0(r')$ só depende da distância, a função integranda será ímpar em relação alguma das variáveis e consequentemente simétrica em relação a inversão de eixo, o que torna nulo o resultado da integral.

- 4ª ordem:

$$I_4 = -\frac{e}{4!}\sum_{i,j,k,l=1}^{3}\frac{\partial^4\Phi}{\partial x_i\partial x_j\partial x_k\partial x_l}\int_{e^-} d^3r'\rho_0(\vec{r}')x_i'x_j'x_k'x_l'$$

Para a integral, devemos avaliar os casos abaixo:

$$[\text{caso 1}]\qquad \int_{e^-} x_1'x_2'^3\rho_0(\vec{r}')d^3r' = \int_{e^-} x_2'x_1'^3\rho_0(\vec{r}')d^3r' = \int_{e^-} x_3'x_1'^3\rho_0(\vec{r}')d^3r' = \int_{e^-} x_1'x_3'^3\rho_0(\vec{r}')d^3r' = \int_{e^-} x_2'x_3'^3\rho_0(\vec{r}')d^3r' = \int_{e^-} x_3'x_2'^3\rho_0(\vec{r}')d^3r'$$

$$[\text{caso 2}]\qquad \int_{e^-} x_1'^4\rho_0(\vec{r}')d^3r' = \int_{e^-} x_2'^4\rho_0(\vec{r}')d^3r' = \int_{e^-} x_3'^4\rho_0(\vec{r}')d^3r'$$

$$[\text{caso 3}]\qquad \int_{e^-} x_1'^2x_2'^2\rho_0(\vec{r}')d^3r' = \int_{e^-} x_1'^2x_3'^2\rho_0(\vec{r}')d^3r' = \int_{e^-} x_2'^2x_3'^2\rho_0(\vec{r}')d^3r'$$

$$[\text{caso 4}]\qquad \int_{e^-} x_1'^2x_2'x_3'\rho_0(\vec{r}')d^3r' = \int_{e^-} x_2'^2x_3'x_1'\rho_0(\vec{r}')d^3r' = \int_{e^-} x_3'^2x_1'x_2'\rho_0(\vec{r}')d^3r'$$

com

$$\begin{cases} x_1' = r'\sin\theta\cos\phi \\ x_2' = r'\sin\theta\sin\phi \\ x_3' = r'\cos\theta \end{cases}$$

$$d^3r' = r'^2\sin\theta dr'd\theta d\phi$$

- Caso 1:

$$x_1'(x_2')^3 = (r'\sin\theta\cos\phi)(r'\sin\theta\sin\phi)^3 = r'^4(\sin\theta)^4\cos\phi(\sin\phi)^3$$

Logo, a integral fica

$$\begin{aligned} I &= \int_{e^-}\rho_0(\vec{r}')r'^4\sin^4\theta\cos\phi\sin^3\phi\; d^3r' \\ &= \frac{3}{4\pi R_{e^-}^3}\int_0^{R_{e^-}} r'^6dr'\int_0^{\pi}\sin^5\theta d\theta\int_0^{2\pi}\cos\phi\sin^3\phi d\phi \\ &= \frac{3}{4\pi R_{e^-}^3}\cdot\frac{R_{e^-}^7}{7}\cdot\frac{16}{15}\cdot 0 = 0 \end{aligned}$$

As integrais foram calculadas em Sympy.

```
from sympy import symbols, integrate, sin, cos, pi

# variáveis
theta, phi = symbols('theta phi')
r, Re = symbols("r Re", positive=True, real=True)

integral1 = integrate(r**6, (r, 0, Re))
integral2 = integrate(sin(theta)**5, (theta, 0, pi))
integral3 = integrate(cos(phi) * sin(phi)**3, (phi, 0, 2*pi))

integral1, integral2, integral3
```

- Caso 2:

$$x_1'^4 = (r' \sin\theta \cos\phi)^4 = r'^4 \sin^4\theta \cos^4\phi$$

Logo, a integral fica

$$\begin{aligned}
I &= \int_{e^-} \rho_0(\vec{r}') r'^4 \sin^4\theta \cos^4\phi \, d^3r' \\
&= \frac{3}{4\pi R_{e^-}^3} \int_0^{R_{e^-}} r'^6 dr' \int_0^{\pi} \sin^5\theta d\theta \int_0^{2\pi} \cos^4\phi d\phi \\
&= \frac{3}{4\pi R_{e^-}^3} \cdot \frac{R_{e^-}^7}{7} \cdot \frac{16}{15} \cdot \frac{3\pi}{4} \\
&= \frac{3R_{e^-}^4}{35}
\end{aligned}$$

```
from sympy import symbols, integrate, sin, cos, pi

# variáveis
r, Re, theta, phi = symbols('r Re theta phi', real=True)

integral1 = integrate(r**6, (r, 0, Re))
integral2 = integrate(sin(theta)**5, (theta, 0, pi))
integral3 = integrate(cos(phi)**4, (phi, 0, 2*pi))

integral1, integral2, integral3
```

- Caso 3:

$$x_1'^2 x_2'^2 = (r' \sin\theta \cos\phi)^2 (r' \sin\theta \sin\phi)^2 = r'^4 \sin^4\theta (\cos^2\phi \sin^2\phi)$$

Logo, a integral fica

$$\begin{aligned}
I &= \int_{e^-} \rho_0(\vec{r}') r'^4 \sin^4\theta \cos^2\phi \sin^2\phi \, d^3r' \\
&= \frac{3}{4\pi R_{e^-}^3} \int_0^{R_{e^-}} r'^6 dr' \int_0^{\pi} \sin^5\theta d\theta \int_0^{2\pi} \cos^2\phi \sin^2\phi d\phi \\
&= \frac{3}{4\pi R_{e^-}^3} \cdot \frac{R_{e^-}^7}{7} \cdot \frac{16}{15} \cdot \frac{\pi}{4} \\
&= \frac{R_{e^-}^4}{35}
\end{aligned}$$

```
from sympy import symbols, integrate, sin, cos, pi

# variáveis
r, Re, theta, phi = symbols('r Re theta phi', real=True)

integral1 = integrate(r**6, (r, 0, Re))
integral2 = integrate(sin(theta)**5, (theta, 0, pi))
integral3 = integrate(cos(phi)**2 * sin(phi)**2, (phi, 0, 2*pi))

integral1, integral2, integral3
```

- Caso 4:

$$x_1'^2 x_2' x_3' = (r' \sin\theta \cos\phi)^2 (r' \sin\theta \sin\phi)(r' \cos\theta) = r'^4 (\sin^3\theta \cos\theta) \cos^2\phi \sin\phi$$

Logo, a integral fica

$$\begin{aligned}
I &= \int_{e^-} \rho_0(\vec{r}') r'^4 (\sin^3\theta \cos\theta) \cos^2\phi \sin\phi \, d^3r' \\
&= \frac{3}{4\pi R_{e^-}^3} \int_0^{R_{e^-}} r'^6 dr' \int_0^{\pi} \sin^4\theta \cos\theta d\theta \int_0^{2\pi} \cos^2\phi \sin\phi d\phi \\
&= \frac{3}{4\pi R_{e^-}^3} \cdot \frac{R_{e^-}^7}{7} \cdot 0 \cdot 0 = 0
\end{aligned}$$

```
from sympy import symbols, integrate, sin, cos, pi

# variáveis
r, Re, theta, phi = symbols('r Re theta phi', real=True)
```

```
integral1 = integrate(r**6, (r, 0, Re))
integral2 = integrate(sin(theta)**4 * cos(theta), (theta, 0, pi))
integral3 = integrate(cos(phi)**2 * sin(phi), (phi, 0, 2*pi))

integral1, integral2, integral3
```

Considerando a simetria esférica e o tensor de quarta ordem dado na forma:

$$M_{ijkl} = A(\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})$$

vem

$$\begin{gathered}
M_{1111} = \int \rho_0(\vec{r}')(x_1')^4 d^3r' = \frac{3R_{e^-}^4}{35} \\
\Rightarrow A(3 \cdot \delta_{11}\delta_{11}) = 3A \\
\Rightarrow A = \frac{R_{e^-}^4}{35}
\end{gathered}$$

$$\begin{gathered}
M_{1122} = \int_{e^-} \rho_0(\vec{r}')(x_1')^2(x_2')^2 d^3r' = \frac{R_{e^-}^4}{35} \\
\Rightarrow A(\delta_{11}\delta_{22} + \delta_{12}\delta_{12} + \delta_{12}\delta_{12}) = A \\
\Rightarrow A = \frac{R_{e^-}^4}{35}
\end{gathered}$$

Logo:

$$\begin{aligned}
I_4 &= -\frac{e}{4!}\frac{R_{e^-}^4}{35}\sum_{i,j,k,l=1}^{3}\frac{\partial^4\Phi}{\partial x_i\partial x_j\partial x_k\partial x_l}(\delta_{ij}\delta_{kl} + \delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \\
&= -\frac{e}{4!}\frac{R_{e^-}^4}{35}\cdot 3\sum_{i,j=1}^{3}\frac{\partial^4\Phi}{\partial x_i^2\partial x_j^2} \\
&= -\frac{eR_{e^-}^4}{280}\nabla^4\Phi = \frac{R_{e^-}^4}{280}\nabla^4 U(r)
\end{aligned}$$

$$\therefore I_4 = \frac{\hbar^4}{280m^4c^4}\nabla^4 U(r)$$

Logo:

$$\boxed{\tilde{U} = U(r) + \frac{\hbar^2}{10m^2c^2}\nabla^2 U(r) + \frac{\hbar^4}{280m^4c^4}\nabla^4 U(r)}$$

O Hamiltoniano correspondente será

$$\begin{gathered}
H = \frac{P^2}{2m} + U(r) + \frac{\hbar^2}{10m^2c^2}\nabla^2 U(r) + \frac{\hbar^4}{280m^4c^4}\nabla^4 U(r) \\
H_1^{(4)} = \frac{\hbar^4}{280m^4c^4}\nabla^4 U(r) = -\frac{\hbar^4 ke^2}{280m^4c^4}\nabla^4\left(\frac{1}{r}\right)
\end{gathered}$$

Usando (considerando $\nabla^2\delta(\vec{r}) \sim -2\delta(\vec{r})$ - https://doi.org/10.1016/S0076-5392(08)62515-1, pag. 21):

$$\nabla^4\left(\frac{1}{r}\right) = \nabla^2(-4\pi\delta(\vec{r})) \sim 8\pi\delta(\vec{r})$$

Temos

$$H_1^{(4)} = -\frac{8\pi\hbar^4 ke^2}{280m^4c^4}\delta(\vec{r}) = -\frac{\pi\hbar^4 ke^2}{35m^4c^4}\delta(\vec{r})$$

A correção de energia de 1ª ordem para o Hamiltoniano $H_1^{(4)}$ fica:

$$\begin{aligned}
E_n^{(4)} &= \langle\psi_{n,l,m_l}^{(0)}|\, H_1^{(4)}\, |\psi_{n,l,m_l}^{(0)}\rangle \\
&= -\langle\psi_{n,l,m_l}^{(0)}|\frac{\pi\hbar^4 ke^2}{35m^4c^4}\delta(\vec{r})|\psi_{n,l,m_l}^{(0)}\rangle \\
&= -\frac{\pi\hbar^4 ke^2}{35m^4c^4}\langle\psi_{n,l,m_l}^{(0)}|\int d^3r'|\vec{r}'\rangle\langle\vec{r}'|\delta(\vec{r})|\psi_{n,l,m_l}^{(0)}\rangle \\
&= -\frac{\pi\hbar^4 ke^2}{35m^4c^4}\int d^3r'\langle\psi_{n,l,m_l}^{(0)}|\vec{r}'\rangle\langle\vec{r}'|\psi_{n,l,m_l}^{(0)}\rangle\delta(\vec{r}') \\
&= -\frac{\pi\hbar^4 ke^2}{35m^4c^4}\int d^3r'|\psi_{n,l,m_l}^{(0)}(\vec{r}')|^2\delta(\vec{r}' - \vec{0}) \\
&= -\frac{\pi\hbar^4 ke^2}{35m^4c^4}\left|\psi_{n,l,m_l}^{(0)}(\vec{0})\right|^2
\end{aligned}$$

Considerando $n = 1, l = 0, m_l = 0$:

$$\psi_{1,0,0}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}$$

Logo:

$$|\psi_{1,0,0}(0)|^2 = \frac{1}{\pi a^3}$$

E portanto:

$$E_{1,0,0}^{(4)} = -\frac{\pi \hbar^4 k e^2}{35 m^4 c^4} \cdot \frac{1}{\pi a^3} = -\frac{\pi \hbar^4 k e^2}{35 m^4 c^4} \cdot \frac{k^3 m^3 e^6}{\hbar^6} = -\frac{k^4 e^8}{35 m c^4 \hbar^2}$$

Usando

$$\alpha = \frac{k e^2}{\hbar c} \Rightarrow \alpha^4 = \frac{k^4 e^8}{\hbar^4 c^4} \Rightarrow \frac{k^4 e^8}{\hbar^2 c^4} = \alpha^4 \cdot \hbar^2$$

Temos

$$E_{1,0,0}^{(4)} = -\frac{\alpha^4 m c^2}{35}$$

Por fim (somando com o Hamiltoniano de $H_1^{(2)}$):

$$E_1 = E_{1,0,0}^{(2)} + E_{1,0,0}^{(4)} = \left(\frac{2}{5} - \frac{1}{35}\right) \alpha^4 m c^2 = \frac{13}{35} \alpha^4 m c^2$$

Usando $\alpha \approx 1/137$ e $mc^2 \approx 511 \text{ keV}$, temos

$$E_1 \approx \frac{13}{35} \cdot 2.9 \times 10^{-9} \cdot 511 \times 10^3 \text{ eV} \approx 5.5042 \times 10^{-4} \text{ eV}$$

Questão 02: No contexto da estrutura ultrafina do átomo de Hidrogênio, desenvolva o cálculo do valor médio $\langle \psi_{n,l,m_l} | U H_0 U | \psi_{n,l,m_l} \rangle$, com U sendo a energia de interação coulombiana entre o elétron e o próton, H_0 é o hamiltoniano não perturbado do átomo de Hidrogênio e $|\psi_{n,l,m_l}\rangle$ são os autovetores de H_0.

Solução:

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{n',l',m_l'}^{(0)} | U H_0 U | \psi_{n',l',m_l'}^{(0)} \rangle &= \sum_{n,l,m_l} \langle \psi_{n',l',m_l'}^{(0)} | U | \psi_{n,l,m_l} \rangle \langle \psi_{n,l,m_l} | H_0 | \psi_{n,l,m_l} \rangle \langle \psi_{n,l,m_l} | U | \psi_{n',l',m_l'}^{(0)} \rangle \\
&= \sum_{n,l,m_l} E_n^{(0)} | \langle \psi_{n,l,m_l} | U | \psi_{n',l',m_l'}^{(0)} \rangle |^2 \\
&= Z^2 k^2 e^4 \sum_{n,l,m_l} E_n^{(0)} \left| \int \psi_{n,l,m_l}^*(\vec{r}) \frac{1}{r} \psi_{n',l',m_l'}(\vec{r}) d^3 r \right|^2
\end{aligned}$$

Aqui, vamos aplicar a separação radial e angular:

$$\psi_{n,l,m_l}(\vec{r}) = R_{n,l}(r) Y_l^{m_l}(\theta, \phi)$$

Donde temos a integral:

$$\int \psi_{n,l,m_l}^*(\vec{r}) \frac{1}{r} \psi_{n',l',m_l'}(\vec{r}) d^3 r = \left(\int_0^\infty R_{n,l}(r) \frac{1}{r} R_{n',l'}(r) r^2 dr \right) \underbrace{\left(\int_{S^2} Y_l^{m_l^*}(\theta, \phi) Y_{l'}^{m_l'}(\theta, \phi) d\Omega \right)}_{=\delta_{ll'} \delta_{m_l, m_l'} \text{ (ortogonalidade)}}$$

$$\Rightarrow \left| \int \psi_{n,l,m_l}^*(\vec{r}) \frac{1}{r} \psi_{n',l',m_l'}(\vec{r}) d^3 r \right|^2 = \left| \int_0^\infty R_{n,l}(r) \frac{1}{r} R_{n',l'}(r) r^2 dr \right|^2 = \left| \int_0^\infty R_{n,l}(r) R_{n',l'}(r) r dr \right|^2$$

Usando

$$R_{n,l}(r) = \underbrace{\sqrt{\left(\frac{2Z}{n}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}}}_{N_{n,l} \text{ (cte de normalização)}} e^{-\rho/2} \rho^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$$

com $\rho = 2Zr/n$ e $L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)$ os polinômios de Laguerre associados, fazendo a substituição

$$r = \frac{n}{2Z} \rho \Rightarrow dr = \frac{n}{2Z} d\rho$$

temos

$$\int_0^\infty R_{n,l}(r) R_{n',l'}(r) r dr = N_{n,l} N_{n',l'} \int_0^\infty e^{-(\rho_n + \rho_n')/2} \rho_n^l \rho_{n'}^l L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho_n) L_{n'-l-1}^{2l+1}(\rho_{n'}) \cdot r dr$$

Pra resolver essa integral, vamos impor $n = n'$:

$$\rho = \rho_n = \rho_{n'} = \frac{2Zr}{n} \Rightarrow r = \frac{n}{2Z}\rho, \quad dr = \frac{n}{2Z}d\rho$$

$$\begin{aligned}\int_0^\infty R_{n,l}(r)^2 \cdot r dr &= N_{n,l}^2 \int_0^\infty e^{-\rho} \cdot \rho^{2l} \cdot [L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)]^2 \cdot \left(\frac{n}{2Z}\rho\right) \cdot \frac{n}{2Z}d\rho \\ &= N_{n,l}^2 \cdot \left(\frac{n}{2Z}\right)^2 \int_0^\infty e^{-\rho}\rho^{2l+1}[L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)]^2 d\rho\end{aligned}$$

Usando a identidade

$$\int_0^\infty e^{-\rho}\rho^\alpha [L_k^\alpha(\rho)]^2 d\rho = \frac{(2k+\alpha+1)\Gamma(k+\alpha+1)}{k!}$$

e $k = n-l-1$, $\alpha = 2l+1$, temos

$$\int_0^\infty e^{-\rho}\rho^{2l+1}[L_{n-l-1}^{2l+1}(\rho)]^2 d\rho = \frac{(2n-1)(n+l)!}{(n-l-1)!}$$

Donde vem:

$$\begin{aligned}\int_0^\infty R_{n,l}(r)^2 \cdot r dr &= N_{n,l}^2 \cdot \left(\frac{n}{2Z}\right)^2 \cdot \frac{(2n-1)(n+l)!}{(n-l-1)!} \\ &= \left(\frac{2Z}{n}\right)^3 \cdot \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!} \cdot \left(\frac{n}{2Z}\right)^2 \cdot \frac{(2n-1)(n+l)!}{(n-l-1)!} \\ &= \left(\frac{2Z}{n}\right) \cdot \frac{1}{2n} \cdot (2n-1) \\ &= Z\left(\frac{2n-1}{n^2}\right)\end{aligned}$$

Substituindo no valor médio, chegamos no resultado particular:

$$\begin{aligned}&\langle \psi_{n,l,m_l}^{(0)} | \, UH_0U \, | \psi_{n,l,m_l}^{(0)} \rangle = Z^2 k^2 e^4 E_n^{(0)} \cdot Z^2 \left(\frac{2n-1}{n^2}\right)^2 \\ \Rightarrow &\boxed{\langle \psi_{n,l,m_l}^{(0)} | \, UH_0U \, | \psi_{n,l,m_l}^{(0)} \rangle = Z^4 k^2 e^4 E_n^{(0)} \cdot \left(\frac{2n-1}{n^2}\right)^2}\end{aligned}$$

No cálculo da integral foi usado $a_0 = 1$.

Para $n \neq n'$, podemos tentar abrir os polinômios de Laguerre, usando (http://denebola.if.usp.br/~jbarata/Notas_de_aula/arquivos/nc-cap16.pdf):

$$L_k^\alpha(x) = \sum_{m=0}^{k} \frac{(-1)^m \Gamma(k+\alpha+1)}{m!(k-m)!\Gamma(m+\alpha+1)} x^m$$

Temos:

$$L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{n}\right) = \sum_{m=0}^{n-l-1} a_m^{(2)} \left(\frac{2Zr}{n}\right)^m$$

$$L_{n'-l+1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{n'}\right) = \sum_{m'=0}^{n'-l-1} a_m^{(n')} \left(\frac{2Zr}{n'}\right)^{m'}$$

com

$$a_m^{(n)} = \frac{(-1)^m \Gamma(n+l)}{m!(m-l-1-m)!\Gamma(m+2l+2)}$$

Calculando

$$L^{(n)} \cdot L^{(n')} = \sum_{m=0}^{n-l-1}\sum_{m'=0}^{n'-l-1} a_m^{(n)} a_{m'}^{(n')} \cdot \left(\frac{2Zr}{n}\right)^m \cdot \left(\frac{2Zr}{n'}\right)^{m'} = \sum_{m=0}^{n-l-1}\sum_{m'=0}^{n'-l-1} a_m^{(n)} a_{m'}^{(n')} \cdot \left(\frac{2Z}{n}\right)^m \left(\frac{2Z}{n'}\right)^{m'} r^{m+m'}$$

Substituindo isso na integral, temos

$$\begin{aligned}\int_0^\infty R_{n,l}(r) R_{n',l}(r) r dr &= N_{n,l} N_{n',l} \int_0^\infty r^{2l+1} e^{-Zr\left(\frac{1}{n'}+\frac{1}{n'}\right)} \cdot L^{(n)} \cdot L^{(n')} dr \\ &= N_{n,l} N_{n',l} \sum_{m,m'} a_m^{(n)} a_{m'}^{(n')} \left(\frac{2Z}{n}\right)^m \left(\frac{2Z}{n'}\right)^{m'} \cdot \int_0^\infty r^{2l+1+m+m'} e^{-Zr\left(\frac{1}{n}+\frac{1}{n'}\right)} dr\end{aligned}$$

Queremos calcular uma integral na forma

$$\int_0^\infty r^k e^{-Cr} dr$$

Fazemos

$$x = Cr \Rightarrow r = \frac{x}{C}, dr = \frac{dx}{C}$$

onde temos

$$\int_0^\infty r^k e^{-Cr} dr = \int_0^\infty \left(\frac{x}{C}\right)^k e^{-x} \cdot \frac{dx}{C} = \frac{1}{A^{k+1}} \int_0^\infty x^k e^{-x} dx$$

Essa integral é uma função gamma $\Gamma(k+1)$. Logo:

$$\int_0^\infty r^k e^{-Cr} dr = \frac{\Gamma(k+1)}{C^{k+1}}$$

Substituindo $k = 2l + 1 + m + m'$ e $C = Z\left(\frac{1}{n'} + \frac{1}{n'}\right)$ chegamos em:

$$\boxed{\int_0^\infty R_{n,l}(r) R_{n',l}(r) r dr = N_{n,l} N_{n',l} \sum_{m,m'} a_m^{(n)} a_{m'}^{(n')} \left(\frac{2Z}{n}\right)^m \left(\frac{2Z}{n'}\right)^{m'} \cdot \frac{\Gamma(2l+2+m+m')}{\left[Z\left(\frac{1}{n} + \frac{1}{n'}\right)\right]^{2l+2+m+m'}}}$$

Substituindo o valor dessa integral novamente no valor médio, chegamos no resultado que desejamos. Aqui usamos $a_0 = 1$ novamente.

Questão 03: Considere o oscilador harmônico quântico em três dimensções (OHQ3D). Determine o hamiltoniano H_0 desse sistema. Obtenha os autovalores e autovetores de H_0. Quantifique as degenerescências dos autovalores de H_0.

Solução: Considerando 3 graus de liberdade (eixo x, y e z), temos um potencial total clássico escrito por

$$U(x, y, z) = \frac{1}{2} m\omega r^2$$

com $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$. O hamiltoniano total do sistema fica dado por

$$H = \sum_{i=x,y,z} \frac{p_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$$

Quantizando,

$$\boxed{\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{P_i^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X_i^2\right)}$$

Ou seja

$$\begin{aligned} H_0 &= H_0^{\text{oh1}} + H_0^{\text{oh2}} + H_0^{\text{oh3}} \\ &= H_0^{\text{oh1}} \otimes I_2 \otimes I_3 + I_1 \otimes H_0^{\text{oh2}} \otimes I_3 + I_1 \otimes I_2 \otimes H_0^{\text{oh3}} \end{aligned}$$

Como temos três graus de liberdade distintos, e temos a soma de 3 OHQ unidimensional (para cada direção), lembrando que os autovalores no caso unidimensional é

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n \in \mathbb{Z}_+$$

temos que

$$\boxed{E_{n_1,n_2,n_3} = \hbar\omega \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{2}{3}\right) = \hbar\omega \left(N + \frac{2}{3}\right)}$$

Para diferentes combinações de (n_1, n_2, n_3) que somam o mesmo N teremos a mesma energia para o mesmo autovalor (degenerescência).

A degenerescência, neste caso, será o número de soluções inteiras não negativas (dado que $n_i \geq 0$) da equação:

$$n_1 + n_2 + n_3 = N, \quad n_i \in \mathbb{N}_0$$

Da Análise Combinatória, para um sistema com k-tuplas $(x_1, \cdots, x_k)$ de inteiros não negativos que somam n, temos que o total de arranjos é

$$\binom{n+k-1}{k-1}$$

Logo:

$$\boxed{D = \binom{N+2}{2} = \frac{(N+2)!}{2!N!} = \frac{(N+1)(N+2)}{2}}$$

Isto é, o número total de degenerescências.

Os autovetores do estado $|n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes |n_3\rangle = |n_1, n_2, n_3\rangle$ será dado pelo produtos dos autovetores unidimensionais:

$$\Psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z)$$

No caso unidimensional, temos que, da solução algébrica do OHQ1D,

$$\Xi_n(x) = \sqrt{\frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{\pi}2^n n!}} e^{-\alpha x^2/2} H_n(\sqrt{\alpha}x)$$

onde $\alpha = m\omega/\hbar = 2\pi m\nu/\hbar$ e H_n são os polinômios de Hermite.

Assim

$$\Psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = \Xi_{n_x}(x) \cdot \Xi_{n_y}(y) \cdot \Xi_{n_z}(z)$$

Substituindo cada termo explicitamente, temos

$$\boxed{\Psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = \prod_{i=x,y,z} \sqrt{\frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{\pi}2^{n_i} n_i!}} e^{-\alpha i^2/2} \cdot H_{n_i}(\sqrt{\alpha} i)}$$

Questão 04: Considere que o OHQ3D da questão anterior é carregado eletricamente e é submetido a um campo magnético constante na direção z. Considere essa interação como um hamiltoniano H_1 de perturbação e calcule as correções perturbativas de 1ª ordem para o menor autovalor de energia degenerado de H_0.

Solução:

O Hamiltoniano, não perturbardo, usando os operadores de aniquilação e criação é

$$H_0 = \hbar\omega \left(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 + a_3^\dagger a_3 + \frac{3}{2} I \right)$$

Como temos um campo $\vec{B}$ na direção z, escrevemos o hamiltoniano de perturbação como

$$H_1 = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} \propto \vec{L} \cdot \vec{B} = g L_3$$

com $L_3 = X_1 P_2 - X_2 P_1 = i\hbar(a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2)$ (mesmo caso do OHQ2D). Portanto

$$H_1 = gi\hbar(a_2^\dagger a_1 - a_1^\dagger a_2)$$

Para $n_1 + n_2 + n_3 = 0$, temos o estado trivial $|0,0,0\rangle$, que não é degenerado, pois não há mais estados de mesma energia:

$$E_0 = \hbar\omega \left(0 + \frac{3}{2} \right) = \frac{3}{2}\hbar\omega$$

Para $n_1 + n_2 + n_3 = 1$, temos os estados $\{|1,0,0\rangle, |0,1,0\rangle, |0,0,1\rangle\}$, de energia

$$E_1 = \hbar\omega \left(1 + \frac{3}{2} \right) = \frac{5}{2}\hbar\omega$$

Mas, nesse caso, como L_3 envolve apenas os modos 1 e 2, não há combinações de operações $(a_j, a_j^\dagger)$ que levam um desses estados a outro do mesmo subespaço com ação de H_1. Assim, esse nível não é afetado por H_1.

Finalmente, consideremos $n_1 + n_2 + n_3 = 2$. Temos como autovalor

$$E_3^{(0)} = \hbar\omega \left(2 + \frac{3}{2} \right) = \frac{7}{2}\hbar\omega$$

E estados

$$\{|2,0,0\rangle, |1,1,0\rangle, |1,0,1\rangle, |0,2,0\rangle, |0,1,1\rangle, |0,0,2\rangle\}$$

Isto é, uma degenerescência de 6 estados.

Para obter a matriz de H_1, calculemos

$$\begin{aligned}
\langle n_1, n_2, n_3 | H_1 | n_1' n_2', n_3' \rangle &= i\hbar g \left(\langle n_1, n_2, n_3 | a_2^\dagger a_1 | n_1', n_2', n_3' \rangle - \langle n_1, n_2, n_3 | a_1^\dagger a_2 | n_1', n_2', n_3' \rangle \right) \\
&= i\hbar g \left(\langle n_1, n_2, n_3 | a_2^\dagger \sqrt{n_1'} | n_1' - 1, n_2', n_3' \rangle - \langle n_1, n_2, n_3 | a_1^\dagger \sqrt{n_2'} | n_1', n_2' - 1, n_3' \rangle \right) \\
&= i\hbar g \left(\langle n_1, n_2, n_3 | \sqrt{n_1'}\sqrt{n_2'+1} | n_1' - 1, n_2' + 1, n_3' \rangle - \langle n_1, n_2, n_3 | \sqrt{n_2'}\sqrt{n_1'+1} | n_1' + 1, n_2' - 1, n_3' \rangle \right) \\
&= i\hbar g \left(\sqrt{(n_2'+1)n_1'} \delta_{n_1, n_1'-1} \delta_{n_2, n_2'+1} \delta_{n_3, n_3'} - \sqrt{(n_1'+1)n_2'} \delta_{n_1, n_1'+1} \delta_{n_2, n_2'-1} \delta_{n_3, n_3'} \right)
\end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned}
a_j |n_j\rangle &= \sqrt{n_j} |n_j - 1\rangle \\
a_j^\dagger |n_j\rangle &= \sqrt{n_j + 1} |n_j + 1\rangle
\end{aligned}$$

Consideremos a base ordenada $\mathcal{B} = \{|2,0,0\rangle, |1,1,0\rangle, |0,2,0\rangle, |1,0,1\rangle, |0,1,1\rangle, |0,0,2\rangle\}$e calculemos:

- Para $n_3 = 0$, temos:

$$\langle 2,0,0| H_1 |1,1,0\rangle = -i\hbar g\sqrt{(1+1)\cdot 1}\delta_{2,2}\cdot\delta_{0,0} = -i\hbar g\sqrt{2} \Rightarrow \langle 1,1,0| H_1 |2,0,0\rangle = i\hbar g\sqrt{2}$$

$$\langle 1,1,0| H_1 |0,2,0\rangle = -i\hbar g\sqrt{(0+1)(2)}\delta_{1,1}\cdot\delta_{1,1} = -i\hbar g\sqrt{2} \Rightarrow \langle 0,2,0| H_1 |1,1,0\rangle = i\hbar g\sqrt{2}$$

- Para $n_3 = 1$, temos:

$$\langle 1,0,1| H_1 |0,1,1\rangle = -i\hbar g\sqrt{(0+1)\cdot 1}\delta_{1,1}\cdot\delta_{0,0} = -i\hbar g \Rightarrow \langle 0,1,1| H_1 |1,0,1\rangle = i\hbar g$$

- Para $n_3 = 2$, temos:

$$\langle 0,0,2| H_1 |n_1', n_2', n_3'\rangle = 0$$

Além disso, os termos na diagonal são todos nulos.

Portanto, a matriz H_1, na base ordenada $\mathcal{B}$, será

$$H_1 = i\hbar g\begin{bmatrix} 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Os autovalores são:

$$\lambda = \{-2\hbar g, -\hbar g, 0, 0, \hbar g, 2\hbar g\}$$

```
import sympy as sp

# símbolos
i, hbar, g = sp.symbols('i hbar g', imaginary=True)

# matriz H1
sqrt2 = sp.sqrt(2)
H1 = i*hbar*g * sp.Matrix([
    [0, -sqrt2, 0, 0, 0, 0],
    [sqrt2, 0, -sqrt2, 0, 0, 0],
    [0, sqrt2, 0, 0, 0, 0],
    [0, 0, 0, 0, -1, 0],
    [0, 0, 0, 1, 0, 0],
    [0, 0, 0, 0, 0, 0]
])

# autovalores
eigenvals = H1.eigenvals()
eigenvals
```

Com isso, as energias corrigidas de 1ª ordem serão:

$$E_3^{(0)} = \frac{7}{2}\hbar\omega \rightarrow \begin{cases} \dfrac{7}{2}\hbar\omega + 2\hbar g \\ \dfrac{7}{2}\hbar\omega + \hbar g \\ \dfrac{7}{2}\hbar\omega \\ \dfrac{7}{2}\hbar\omega - \hbar g \\ \dfrac{7}{2}\hbar\omega - 2\hbar g \end{cases}$$

Questão 05: No contexto da Mecânica Quântica na base da posição, verifique que

$$\langle -\vec{r}| \vec{P} |\psi\rangle = -\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\langle -\vec{r}|\psi\rangle, \quad \forall |\psi\rangle$$

Solução:

$$
\begin{aligned}
\langle -\vec{r}|\,\vec{P}\,|\psi\rangle &= \langle -r_1, -r_2, -r_3|\,\vec{P}\,|\psi\rangle \\
&= \sum_{j=1}^{3} \hat{e}_j \,\langle -r_1, -r_2, -r_3|\, P_j \,|\psi\rangle \\
&= \sum_{j=1}^{3} \hat{e}_j \frac{\hbar}{i} \partial_{r_j} \langle -r_1, -r_2, -r_3|\psi\rangle \\
&= \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{\vec{r}} \,\langle -\vec{r}|\psi\rangle
\end{aligned}
$$

Como

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial r_j}\psi(-\vec{r}) &= \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial \psi}{\partial(-r_k)} \frac{\partial(-r_k)}{\partial r_j} \\
&= \sum_{k=1}^{3} \frac{\partial \psi(-\vec{r})}{\partial(-r_k)}(-\delta_{jk}) \\
&= -\frac{\partial \psi(-\vec{r})}{\partial(-r_j)} \\
\therefore \vec{\nabla}_{\vec{r}}\psi(-\vec{r}) &= -\vec{\nabla}_{-\vec{r}}\psi(-\vec{r})
\end{aligned}
$$

Temos

$$
\langle -\vec{r}|\,\vec{P}\,|\psi\rangle = -\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{-\vec{r}}\,\langle -\vec{r}|\psi\rangle
$$