

Lista VII**Tarefa de leitura:**

1. GY seções 3.7, 4.2 e 5.2.
2. Sakurai seções 5.1 a 5.4

Problemas para entregar dia 18 de junho

1. Um sistema físico que tem três estados não perturbados pode ser representado pelo Hamiltoniano perturbado

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & a \\ 0 & E_1 & b \\ a^* & b^* & E_2 \end{pmatrix}$$

onde $E_2 > E_1$. As quantidades a e b devem ser vistas como perturbação do sistema que tem a mesma ordem e são muito menores que $E_2 - E_1$. Calcule os novos auto-valores da energia usando teoria de perturbação para níveis não degenerados. Diagonalize a matriz H e encontre os auto-valores exatos. Re-calcule os auto-valores da energia usando teoria de perturbação para níveis degenerados. Compare os três resultados.

2. Um átomo de um único elétron cujo estado fundamental é não degenerado é colocado em um campo elétrico uniforme na direção z . Obtenha uma expressão aproximada para o momento de dipolo elétrico induzido do estado fundamental considerando o valor esperado de ez com relação ao vetor de estado perturbado calculado em primeira ordem. Mostre que a mesma expressão pode ser também obtida usando a mudança de energia $\Delta = -\alpha|\vec{E}|^2/2$ do estado fundamental calculada em segunda ordem (α é a polarizabilidade). Ignore o spin.

Problemas para as discussões

1. O teorema do virial vale tanto na mecânica clássica quanto na mecânica quântica. Na primeira ele relaciona a média temporal das energias cinética e potencial. Na mecânica quântica ele relaciona os valores esperados correspondentes em qualquer estado estacionário $|\Psi\rangle$, e é uma consequência de $\langle[A, H]\rangle_\Psi = 0$ para qualquer observável A . Considere um sistema com um Hamiltoniano da forma $T + V(q_i)$, onde T é o termo de energia cinética convencional. Tomando $A = \sum q_i p_i$ mostre que

$$2\langle T \rangle = \sum_i \langle q_i \partial V / \partial q_i \rangle.$$

2. Considere uma partícula movendo-se em um potencial central $V(r) = Cr$. Introduzindo uma variável adimensional apropriada ρ em termos da qual a equação de Schrödinger radial é

$$\left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} - \rho - \lambda \right) u = 0.$$

Mostre que as energias são relacionadas aos auto-valores de λ por $E = \lambda(\hbar^2 C^2 / 2m)^{1/3}$. O problema é encontrar os auto-valores mais baixos para $l = 0, 1, 2$ pelo método variacional com uma função de prova de um único parâmetro e comparar esse resultado com os valores exatos $\lambda = 2.338, 3.361$ e 4.248 . Ao escolher uma função de prova lembre-se do comportamento desejado para $\rho \rightarrow 0$. Tente agora calcular a energia do primeiro estado s excitado escolhendo uma função de prova ortogonal à primeira (função de prova do estado fundamental). Compare seu resultado com o valor exato $\lambda = 4.008$.

3. A hamiltoniana de um sistema unidimensional é dada por

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \lambda x^2.$$

Utilizando o termo λx^2 como uma perturbação obtenha

- (a) A correção de segunda ordem para os autovalores;
- (b) a correção de primeira ordem para os estados.

Compare os seus resultados com a resposta exata.

4. Repita o problema anterior mas substituindo λx^2 por λx^4 .
5. Estime a energia do estado fundamental de um oscilador harmônico tridimensional utilizando o método variacional coma função de onda

$$\Psi = e^{-\alpha r} .$$

6. Utilizando o método LCAO (linear combination of atomic orbitals) estime a energia do estado fundamental do H_2^+ como função da distância entre os núcleos. Para tanto considere apenas dois estados, a saber, estados $1s$ do átomo de hidrogênio centrados nos dois núcleos.