

Mecânica Quântica Avançada - Lista 5

Professor: Gabriel T. Landi

Data de entrega: 30/04/2015 (quinta-feira).

Lista com peso 2!

1) **Efeito Stark para o átomo de H com $n = 3$: vide Stark.nb**

2) **Teste de sanidade**

Considere um oscilador harmônico com Hamiltoniano

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (1)$$

Suponha que este Hamiltoniano é perturbado com uma modificação da frequência

$$V = \frac{1}{2}m\omega^2 \lambda x^2 \quad (2)$$

onde λ é um parâmetro pequeno. Isso é comum em física atômica: átomos são aprisionados em armadilhas harmônicas e um experimento comum é mudar rapidamente a frequência e ver como o sistema reage.

- Use teoria de perturbação de **segunda ordem** para calcular os autovalores e autovetores de $H = H_0 + V$ (ou seja, você deve ir até ordem λ^2 na energia e λ nos autovetores).
- Resolva exatamente para os autovalores e autovetores de H e compare com os resultados do item (a).

3) **Perturbação no poço infinito 3D**

Considere o poço infinito 3D com x, y, z indo de 0 até a . Suponha que aplicamos uma perturbação correspondente a uma “lombada” em $(\frac{a}{4}, \frac{a}{2}, \frac{3a}{4})$:

$$V = a^3 V_0 \delta(x - a/4) \delta(y - a/2) \delta(z - 3a/4) \quad (3)$$

Calcule a correção de primeira ordem para a energia do

- Estado fundamental.
- Primeiro estado excitado.

4) **Problema perturbado**

Considere um sistema de 3 níveis descrito pelo Hamiltoniano

$$H_0 = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & 2a \end{pmatrix} \quad (4)$$

com uma perturbação

$$V = \lambda \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

- Encontre os autovalores e autovetores do Hamiltoniano não perturbado H_0 .
- Encontre os autovalores e autovetores do Hamiltoniano perturbado $H = H_0 + V$ exatamente. Expanda os seus resultados em uma série de potências em λ .
- Use teoria de perturbação para encontrar os autovalores e autovetores de H . Note que existem estados degenerados e não degenerados. No caso degenerado vá até primeira ordem e no caso não degenerado até segunda ordem.

5) Oscilador harmônico relativístico

Use teoria de perturbação de primeira ordem para encontrar a primeira correção relativística para a energia do oscilador harmônico unidimensional.

6) Teorema de Hellmann-Feynman

Suponha que um Hamiltoniano depende de um certo parâmetro λ ; ou seja, temos $H(\lambda)$. Consequentemente tanto a energia quanto os autovetores vão ser funções de λ : $E_n(\lambda)$ e $|n(\lambda)\rangle$.

(a) Mostre que

$$\frac{\partial E_n(\lambda)}{\partial \lambda} = \left\langle n(\lambda) \left| \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right| n(\lambda) \right\rangle \quad (6)$$

Este resultado é conhecido como teorema de Hellmann-Feynman. Detalhe: Feynman o demonstrou enquanto trabalhava no seu TCC na graduação.

(b) Considere o teorema de Hellmann-Feynman para o oscilador harmônico unidimensional. Use $\lambda = \omega$ para encontrar uma fórmula para $\langle \hat{x}^2 \rangle$.

(c) Considere agora o caso do átomo de H (não perturbado). Use $\lambda = q$ para mostrar que

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle = \frac{1}{a_0 n^2} \quad (7)$$

7) Força de Van der Waals

Na aula vimos como a força de Van der Waals surge naturalmente ao considerarmos a interação entre dois átomos de hidrogênio. Aqui veremos uma versão simplificada do mesmo problema. Suponha que os dois átomos podem ser modelados como dois osciladores harmônicos (vide figura).



O Hamiltoniano não perturbado é, portanto,

$$H_0 = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{1}{2} k x_1^2 + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2} k x_2^2$$

ao passo que a interação entre os dois átomos pode ser descrita pela perturbação

$$V = q^2 \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{R - x_1} - \frac{1}{R + x_2} + \frac{1}{R - x_1 + x_2} \right)$$

(Vide as notas de aula sobre o princípio variacional para mais informações.)

(a) Mostre que, se $R \gg x_{1,2}$, então podemos aproximar

$$V \simeq \frac{2q^2}{R^3} x_1 x_2$$

(b) Mostre que $H = H_0 + V$, usando a aproximação do item (a), pode ser separado no Hamiltoniano de dois osciladores harmônicos independentes através de uma mudança de variáveis. Para saber se eles são independentes, você deve verificar as relações de comutação de suas novas variáveis. Quais as frequências de cada um desses osciladores?

(c) Escreva a energia do estado fundamental deste sistema e expanda o seu resultado assumindo que R é grande. Com isso eu quero que você mostre que (i) a energia de interação escala com $1/R^6$ e (ii) ela é sempre negativa e, portanto, sempre atrativa. Essa é a força de Van der Waals.

8) Rotor rígido

Um corpo rígido restrito a rodar em torno de um eixo que passa pelo seu centro de massa é conhecido como um *rotor rígido*. O Hamiltoniano é

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} = \frac{\hbar^2}{2I} L_z^2 \quad (8)$$

onde I é o momento de inércia do rotor. Este modelo é apropriado para descrever a rotação de moléculas, contanto que possamos desprezar os modos vibracionais.

- (a) Mostre que as autofunções e autoenergias deste problema, sujeito à condição de contorno $\psi(\phi+2\pi) = \psi(\phi)$ são

$$\psi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

e

$$E_m^0 = \frac{m^2 \hbar^2}{2I}$$

- (b) Considere agora que este sistema está sujeito a um campo elétrico uniforme \mathcal{E} paralelo ao eixo de rotação. A energia correspondente pode ser descrita como uma perturbação:

$$V = -\mu \mathcal{E} \cos \phi$$

onde μ é o momento de dipolo elétrico do corpo. Encontre os elementos de matriz de $V_{m,m'}$ de V na base $|m\rangle$. Mostre que V não possui elementos diagonais e, portanto, a correção de primeira ordem para a energia será nula.

- (c) Use teoria de perturbação de segunda ordem para mostrar que a energia corrigida vale

$$E_m = E_m^0 + \frac{I\mu^2 E^2}{\hbar^2(4m^2 - 1)} \quad (9)$$

Nota: A energia de interação entre um dipolo elétrico e o campo elétrico pode ser escrita como $-\frac{1}{2}\alpha E^2$, onde α é a polarizabilidade do rotor. Portanto

$$\alpha = -\frac{2I\mu^2}{\hbar^2(4m^2 - 1)}$$

Quando $m = 0$, $\alpha > 0$ o que significa que o dipolo se orienta na mesma direção do campo elétrico. Por outro lado, para qualquer $m \neq 0$, $\alpha < 0$ e, conseqüentemente, o dipolo se orienta na direção oposta ao campo. Este efeito ocorre classicamente também: se um rotor estiver rodando com baixa energia, ele tenderá a se alinhar com o campo. Mas se ele estiver rodando com alta energia, ele vai ser acelerado quando estiver paralelo ao campo e desacelerado quando estiver anti-paralelo a ele.

- (d) Considere agora o Hamiltoniano completo

$$H = H_0 + V = -\frac{\hbar^2}{2I} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} - \mu \mathcal{E} \cos \phi$$

Use o princípio variacional para estimar a energia do estado fundamental. Escolha como função de onda tentativa $\psi = A + B \cos \phi + C \sin \phi$, onde A , B , e C são parâmetros que devem ser minimizados. Expanda o seu resultado em série supondo que $\mu \mathcal{E}$ é pequeno, e compare o seu resultado com o obtido da Eq. (9) para o estado fundamental.

9) Princípio variacional para o estado fundamental do oscilador harmônico

Use o princípio variacional para determinar a melhor estimativa para a energia do estado fundamental do oscilador harmônico unidimensional, com a função de onda tentativa

$$\psi(x) = \frac{A}{(x^2 + b^2)^n} \quad (10)$$

Você pode usar o Mathematica para realizar as integrais, mas simplifique os resultados!

10) Potencial de Yukawa

O potencial de Yukawa generaliza o potencial de Coulomb para o caso onde a partícula mediadora da interação possui massa m . Neste caso

$$V(r) = -\frac{q^2 e^{-\mu r}}{r} \quad (11)$$

onde $\mu = mc/\hbar$. No caso do potencial eletrostático, como o fóton possui massa zero, temos $\mu = 0$ e $e^{-\mu r} = 1$; ou seja, recuperamos a lei de Coulomb. Escolha uma função de onda tentativa para estimar a energia do estado fundamental do átomo de hidrogênio com o potencial de Yukawa ao invés do potencial de Coulomb. Você pode assumir que $\mu a_0 \ll 1$, mas dê sua resposta de forma correta até ordem $(\mu a_0)^2$.