Mecânica Quântica II - 4300404

7ª lista

1) a) Prove o Teorema virial em três dimensões:

$$2\langle T\rangle = \langle \vec{r}.\vec{\nabla}V\rangle$$

b) Use esse teorema para mostrar que nas autofunções do átomo de hidrogênio obtemos:

$$\left\langle \frac{1}{r}\right\rangle_n = \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2}\frac{1}{n^2}$$

2) Usando o seguinte resultado para a correção relativística de primeira ordem:

$$E_r^1 = -\frac{1}{2mc^2}\left[E^2 - 2E\langle V\rangle + \langle V^2\rangle\right]$$

mostre que essa correção , para o caso de um oscilador harmônico unidimensional, é dada por:

$$E_r^1 = -\frac{3}{32}\left(\frac{\hbar^2\omega^2}{mc^2}\right)(2n^2+2n+1)$$

3) Mostre as seguinte relações : a) $[\vec{L}.\vec{S},\vec{L}] = i\hbar(\vec{L}\times\vec{S})$, b)$[\vec{L}.\vec{S},\vec{S}] = -i\hbar(\vec{L}\times\vec{S})$, c) $[\vec{L}.\vec{S},\vec{J}] = 0$, d) $[\vec{L}.\vec{S},L^2] = 0$, e) $[\vec{L}.\vec{S},S^2] = 0$ e d) $[\vec{L}.\vec{S},J^2] = 0$. Dica: lembre-se que $[\vec{L},\vec{S}] = 0$.

4) Mostre que partindo da expressão geral para a correção de estrutura fina:

$$E_{sf}^1 = \frac{E_n^2}{mc^2(l+1/2)}\left[-2n + \frac{3(l+1/2)}{2} + \frac{n}{l(l+1)}\left(j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}\right)\right]$$

e usando $j = l - 1/2$ voce também chega no resultado final

$$E_{sf}^1 = \frac{E_n^2}{2mc^2}\left(3 - \frac{4n}{j+1/2}\right).$$

5) A linha mais característica do espectro de emissão do átomo de hidrogênio na região visível vem da transição : $n = 3 \to n = 2$.
a) Encontre, sem considerar as correções de estrutura fina, o comprimento de onda e a frequência dessa linha.
b) Calcule as correções de estrutura fina para as linhas com $n = 2$ e $n = 3$. Essas linhas ficam mais ou menos ligadas devido a essas correções ?
c) Devido à essas correções de estrutura fina a linha com $n = 2$ se abre em duas e a com $n = 3$ se abre em 3. Assim exitem na realidade 6 transições possíveis entre essas duas linhas originais. Calcule essas seis diferenças de energias: $\Delta E = E_3^1 - E_2^1$ em eV, e indique numa figura as várias transições possíveis.

6) Considere os oito estados com $n = 2$ no átomo de hidrogênio: $|2\ j\ l\ s\ m\rangle$. Encontre a energia de cada estado, para as separações causadas pelo efeito Zeeman fraco. Expresse cada

resposta como uma soma de três termos: a energia de Bohr, a estrutura fina (proporcional a α^2 e a contribuição Zeeman (proporcional a $\mu_B B_{ext}$). Se voce ignorar a estutura fina, quantos níveis distintos existem e qual a degenerescência?

7) Considere os oito estados com $n = 2$ no átomo de hidrogênio: $|2\ l\ s\ m_l\ m_s\rangle = |l\ m_l\rangle|1/2\ m_s\rangle$. Encontre a energia de cada estado, para as separações causadas pelo efeito Zeeman forte. Expresse cada resposta como uma soma de três termos: a energia de Bohr, a estrutura fina (proporcional a α^2 e a contribuição Zeeman (proporcional a $\mu_B B_{ext}$). Se voce ignorar a estutura fina, quantos níveis distintos existem e qual a degenerescência?

8) Efeito Zeeman intermediário: considere os oito estados com $n = 2$ no átomo de hidrogênio. Os estados da base acoplada, $|2\ j\ l\ 1/2\ m\rangle = |j\ l\ m\rangle$, podem ser expressos em termos da base produto, $|l\ m_l\rangle|1/2\ m_s,\rangle$ através dos coeficientes de Clebsch-Gordon:

$$|1\rangle = \left|\frac{1}{2}\ 0\ \frac{1}{2}\right\rangle = |0\,0\rangle\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle,\ \ |2\rangle = \left|\frac{1}{2}\ 0\ -\frac{1}{2}\right\rangle = |0\,0\rangle\left|\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle,\ \ |3\rangle = \left|\frac{3}{2}\ 1\ \frac{3}{2}\right\rangle = |1\,1\rangle\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle,$$

$$|4\rangle = \left|\frac{3}{2}\ 1\ -\frac{3}{2}\right\rangle = |1\ -1\rangle\left|\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle,\ \ |5\rangle = \left|\frac{3}{2}\ 1\ \frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|1\ 0\rangle\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|1\ 1\rangle\left|\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle,$$

$$|6\rangle = \left|\frac{1}{2}\ 1\ \frac{1}{2}\right\rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}}|1\ 0\rangle\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1\ 1\rangle\left|\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle,$$

$$|7\rangle = \left|\frac{3}{2}\ 1\ -\frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}|1\ -1\rangle\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1\ 0\rangle\left|\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle,$$

$$|8\rangle = \left|\frac{1}{2}\ 1\ -\frac{1}{2}\right\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}}|1\ -1\rangle\left|\frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|1\ 0\rangle\left|\frac{1}{2}\ -\frac{1}{2}\right\rangle.$$

Na base acoplada os elementos de matriz de H'_{sf} estão todos na diagonal e são dados por

$$E^1_{sf} = \frac{13.6\text{ eV}}{4n^4}\alpha^2\left(3 - \frac{4n}{j+1/2}\right) = \frac{13.6\text{ eV}}{64}\alpha^2\left(3 - \frac{8}{j+1/2}\right) = \gamma\left(3 - \frac{8}{j+1/2}\right),$$

já que $n = 2$ e definimos $\gamma = 13.6\text{ eV}\alpha^2/64$. Mostre que a matrix $H' = H'_{sf} + H'_Z$ onde $H'_Z = \frac{e}{2m}B_{ext}(L_z + 2S_z)$ é dada por:

$$-H' = \begin{pmatrix} 5\gamma-\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 5\gamma+\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma-2\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \gamma+2\beta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma-\frac{2}{3}\beta & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta & 5\gamma-\frac{1}{3}\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \gamma+\frac{2}{3}\beta & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{3}\beta & 5\gamma+\frac{1}{3}\beta \end{pmatrix}$$

onde $\beta = \mu_B B_{ext}$. Encontre as energias em primeira ordem devido a H' e compare teus resultados com os obtidos nos exercícios 6) e 7).

9) Quando um átomo é colocado em um campo elétrico externo uniforme, $\vec{E}_{ext}$, os níveis de energia são alterados. Esse fenômeno é conhecido como efeito Stark, e é o análogo elétrico

do efeito Zeeman. Considere o campo $\vec{E}_{ext}$ apontando na direção z, de forma que a energia potencial do elétron é:

$$H'_S = eE_{ext}z = eE_{ext}r\cos\theta.$$

Trate isso como uma perturbação no hamiltoniano do átomo de hidrogênio (neste caso o spin é irrelevante, portanto ignore as correções de estrutura fina). Vamos então considerar o efeito Stark para os estados com $n = 1$ e $n = 2$.

a) Mostre que a energia do estado fundamental não é alterada por essa perturbação em primeira ordem.

b) O primeiro estado excitado tem degenerescência 4: $\psi_{200},\ \psi_{211},\ \psi_{210},\ \psi_{21-1}$. Usando teoria de perturbação degenerada, determine as correções de primeira ordem na energia nos estados com $n = 2$. Mostre que o nível E_2 se divide em três.

c) Mostre que os novos auto-estados em ordem zero são:

$$\psi_{211},\ \psi_{21-1},\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{200} + \psi_{210}),\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{200} - \psi_{210})$$