Quarta Lista de Mecânica Quântica: 18/Novembro/2020

1. Mostre que:
   (a) o Hamiltoniano do átomo de hidrogênio pode ser escrito como
   $$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2\frac{\partial}{\partial r})) - \frac{e^2}{r} + \frac{L^2}{2mr^2} ,$$
   sendo $\vec{L}$ o operador momento angular, cujo quadrado está escrito nas notas de aula e só depende das variáveis θ e ϕ;
   (b) $[H, L^2]f = 0$, qquer que seja f, logo, $[H, L^2] = 0$;
   (c) $[L_x, L_y] = i\hbar L_z$ (e demais relações cíclicas em xyz) utilizando apenas a definição $\vec{L} = \vec{r}\times\vec{p}$.
   (d) $[L^2, L_i] = 0$, sendo $i \equiv x, y$ ou z.
   (e) $L_z = xp_y - yp_x$ em coordenadas esféricas é escrito como $L_z = -i\hbar\partial/\partial\phi$.

   Sendo assim, H, L^2 e L_z tem em comum um conjunto completo de autofunções. Mas cuidado, note que as componentes não comutam entre si.

2. Sendo $L_\pm = L_x \pm iL_y$, mostre as seguintes relações:
   $[L_+, L_-] = 2\hbar L_z$, $\quad [L_z, L_\pm] = \pm\hbar L_\pm$, $\quad [L^2, L_\pm] = 0$, $\quad L^2 = L_\pm L_\mp + L_z^2 \mp \hbar L_z$.

3. O Hamiltoniano de um disco em rotação livre ao redor de um eixo fixo é dado por (recorde o caso clássico: $E = I\omega^2/2 = L_z^2/2I$)
   $$H = \frac{L_z^2}{2I} = -\frac{\hbar^2}{2I}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \;\; , \text{ onde } I \text{ é o momento de inércia do disco e } 0 \le \phi \le 2\pi \; .$$
   Encontre as autofunções e imponha que elas sejam periódicas em ϕ para achar os autovalores. Resposta: $\psi_m(\phi) = Ae^{im\phi}$ e $E_m = \hbar^2 m^2/2I$, com $m = 0, \pm1, \pm2, ...$ Normalize as ψ_m. Observe que o espectro é degenerado.

4. Ache as autofunções e autovalores de um oscilador harmônico em duas dimensões, cuja energia potencial é dada por
   $$V(x, y) = \frac{1}{2}k(x^2 + y^2) \; .$$
   Expresse o resultado em termos das funções de onda ϕ_n do oscilador unidimensional. Discuta a degenerescência de cada nível de energia.

5. Na teoria de Bohr, as órbitas foram consideradas circulares. Na nova mecânica quântica isso corresponde a tomar o maior valor do momento angular, isto é, $l = n - 1$ (os outros valores correspondem a órbitas elíticas; o valor $l = 0$ corresponde a que órbita?). Para esses valores de l, a densidade radial de probabilidade $r^2|R(r)_{n,l}|^2$, isto é, a probabilidade entre r e $r + dr$, para quaisquer direções, toma a forma
   $$P(r) = (r/a_0)^{2n}\, e^{-2r/na_0} \; .$$
   Mostre, então, que essa probabilidade radial tem um máximo em $r_n = n^2 a_0$, justamente o raio calculado na teoria de Bohr para o n-ésimo nível de energia.

6. Calcule o valor da probabilidade do elétron, no estado fundamental do hidrogênio, ser encontrado dentro de uma esfera de raio R. Se R for igual ao raio de Bohr, que valor tem essa probabilidade? Para qual valor de R essa probabilidade alcança 50 % ?

7. Mostre que $\Delta L_x = \Delta L_y = \sqrt{l/2}\,\hbar$ quando calculada na autofunção $Y_{l,l}$ de L^2 e L_z. Qual o valor de ΔL_z nessa mesma autofunção?

8. Sabendo que $Y_{1,0}(\theta,\phi) = (3/4\pi)^{1/2}\cos\theta$, obtenha pela aplicação dos operadores $L_\pm$ os harmônicos esféricos $Y_{1,\pm}$.

9. Um sistema está num estado caracterizado pelo momento angular $l = 2$. Qual o módulo de $\vec{L}$? Quais são os possíveis valores da componente z desse operador? Qual o menor ângulo entre o vetor $\vec{L}$ e o eixo $\hat{z}$? Veja que jamais $\vec{L}$ aponta exatamente numa dada direção. Isso se deve ao princípio de incerteza, reflexo da não comutatividade entre as componentes L_x, L_y e L_z. Se $\vec{L}$ apontasse numa direção dada, eu saberia com exatidão as suas componentes!

10. Considere um sistema físico num autoestado de L^2 e de L_z, ou seja, com autofunção $Y_{lm}(\theta,\phi)$. Determine o valor médio dos observáveis: L_z, L_z^2 e L^2. Calcule a incerteza ΔL_z (pense na resposta; dá para saber sem álgebra!) Mostre que o valor médio de L_x se anula, mas o de L_x^2 não. Sendo assim, determine a incerteza ΔL_x. Repita para ΔL_y.

11. Determine os níveis de energia resultantes da ação de um campo magnético $B\hat{z}$ atuante na camada $l = 2$ de um átomo. Não considere spin. Idem para um campo $B\hat{x}$. Comente o resultado.

12. Dado que um elétron esteja num estado de spin 1/2 descrito pelo ket $|\chi\rangle = 3|1/2\rangle + 4i|-1/2\rangle$, determine (obs.: $|\pm 1/2\rangle$ denotam autovetores de S_z).
    (a) as probabilidades das possíveis medidas do observável S_z. Não esqueça de normalizar $|\chi\rangle$.
    (b) Idem para S_x. Sugestão: escreva $|\pm 1/2\rangle$ como combinação linear dos autovetores $|\pm 1/2\rangle_x$ de S_x (feito em classe). Use também que $S_x = (S_+ + S_-)/2$.
    (c) os valores médios dos observáveis S_z e S_x.

13. Ache os autovalores e os autovetores $|\uparrow\rangle_y$ e $|\downarrow\rangle_y$ de S_y para um spin 1/2 (escrito na forma matricial em classe). Expresse esses autovetores como combinação linear dos autovetores de S_z.

14. Se S_y for medido num estado geral $|\chi\rangle = a|\uparrow\rangle + b|\downarrow\rangle$, com a e b constantes complexas, que valores podem ser encontrados e com quais probabilidades? Sugestão: use o item anterior e reescreva $|\chi\rangle$ em termos dos autovetores de S_y.

15. Um elétron se encontra em $t = 0$ no estado $|\chi(0)\rangle = (|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle)/\sqrt{2}$, que também pode ser indicado pelo vetor $\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$. Sua evolução temporal é governada pelo Hamiltoniano (escrito na base dos autovetores de S_z) dado por $H = \hbar\omega(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|)$, ou, na forma matricial, $H = \hbar\omega\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$. Determine o estado de spin num instante qualquer, isto é, o vetor $|\chi(t)\rangle$. Quais os valores médios das componentes x e z do spin nesse estado $|\chi(t)\rangle$? Justifique se os operadores S_x, S_y e S_z são constantes de movimento.