Sexta Lista de Mecânica Quântica: 5/12/2023

1. Teoria de Perturbação, formalismo. Há um jeito simples de se obter a correção de primeira ordem na energia. Escreva $H = H^0 + H'$ e parta da seguinte igualdade (trivial): $E_n = \langle \psi_n | H | \psi_n \rangle$. Escreva $\psi_n \approx \psi_n^0 + \psi_n^{(1)}$ e considere que, por construção, a correção $\psi_n^{(1)}$ não contenha o termo $\psi_n^{(0)}$. Em duas linhas sai que a correção na energia até primeira ordem é o valor médio da perturbação no estado que se está corrigindo.

2. Considere uma partícula de massa m numa caixa de potencial definida por $V(x) = 0$ se $|x| \leq L/2$ e $V(x) = \infty$ para $|x| \geq L/2$. Determine a correção de primeira ordem na energia considerando $H'(x) = \alpha x$ como perturbação. Repita para $H'(x) = \alpha |x|$.

3. Um sistema físico é descrito por um Hamiltoniano cuja representação matricial é

$$H = \begin{pmatrix} 1 & C & 0 \\ C & 3 & 0 \\ 0 & 0 & C-2 \end{pmatrix} ,$$

   onde $C << 1$ é uma contante. Por teoria de perturbação, ache os autovalores até segunda ordem em C. Em seguida, diagonalize exatamente essa matriz e compare os valores exatos expandidos até essa ordem. Observe, e explore, o fato da matriz ser bloco-diagonal ao diagonalizá-la exatamente; isso facilita bastante!

4. A constante de mola de um oscilador sofre a alteração k para $(1+\epsilon)k$. Escreva as novas autoenergias, exatas, desse oscilador (é trivial). Expanda até segunda ordem em ϵ. Em seguida, determine as energias de todos os níveis usando teoria de perturbação até segunda ordem. É conveniente escrever x em termos dos operadores a e $a^\dagger$.

5. Considere o seguinte Hamiltoniano de um sistema de dois níveis na base ortonormal $\{|1\rangle, |2\rangle\}$:

$$\hat{H} = |1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| + 1.1(|1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|) .$$

   (a) Escreva a representação matricial, H, desse operador na base $\{|1\rangle, |2\rangle\}$.

   (b) Ache os autovalores exatos desse Hamiltoniano, diagonalizando H.

   (c) Agora ache seus autovalores por teoria de perturbação, até segunda ordem. Aqui você terá que identificar que matriz é conveniente ser a não perturbada, H^0, e qual é a de perturbação, H'. A escolha é bem intuitiva neste caso.

   (d) Compare os resultados dos itens acima. O que de interessante acontece?

6. Uma partícula com spin 1 é regida pelo Hamiltoniano (escrito na base dos autoestados de S_z, isto é, na base $\{|0\rangle, |-1\rangle, |1\rangle\}$)

$$H^0 = \alpha S_z^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & \alpha & 0 \\ 0 & 0 & \alpha \end{pmatrix} .$$

Uma perturbação $H' = \beta S_z$ passa a atuar nessa partícula. Obtenha as correções até segunda ordem (em β) no autovalor não degenerado e em ordem mais baixa nos autovalores e autovetores degenerados. É fácil e você ainda pode comparar os resultados com a diagonalização exata. Repita, mas com a perturbação dada por $H' = \beta S_x$. Pesquise na literatura qual é a matriz que reprsenta S_x para um spin 1.

7. Uma partícula com spin $s = 1$ encontra-se num estado de momento angular $l = 1$. Quais os valores, e respectivas componentes z, para o momento angular total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$?

8. O teorema do virial afirma que $2\langle T \rangle = -\langle V \rangle$, sendo que $H = T + V$. Aplicado ao potencial do hidrogênio resulta na igualdade: $\langle E_c \rangle = -E_n$ e $\langle V \rangle = 2E_n$. Com isso, determine o valor médio de $1/r$ em qualquer estado ψ_{nlm}. Ele é utilizado na correção relativística. (Cuidado, não escreva que $\langle 1/r \rangle$ seja igual a $1/\langle r \rangle$; são bem diferentes!).

9. Considere o efeito Stark para o estado $n = 3$ do hidrogênio (sem spin) com campo elétrico na direção $\hat{z}$. Monte a matriz de perturbação (9×9), identifique e justifique (não precisa calcular) todos os elementos nulos.

10. Em termos práticos, um dos mais importantes teoremas da Mecânica Quântica é o que afirma o seguinte: se A e B são dois observáveis tais que $[A, B] = 0$, qualquer um deles tem elemento de matriz nulo entre autoestados não degenerado do outro. Isso bloco diagonaliza um dos operadores, o que facilita enormemente sua diagonalização. Entenda a prova desse teorema seguindo as notas de aula.

11. Uma aplicação do resultado enunciado na questão anterior. Sejam A e B observáveis dados pelas seguintes representações matriciais na base ortonormal $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$:

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 4 \\ 0 & 5 & 0 \\ 4 & 0 & -3 \end{pmatrix} \text{ e } B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

   (a) verifique que $[A, B] = 0$.
   (b) Diagonalize A. Você deverá achar um autovalor igual a -5 e dois outros iguais a 5 (degenerados, portanto).
   (c) Calcule a matriz B na base dos autoestados de A (encontrados no item (a)). Note que de fato B tem elemento nulo entre autoestados não degenerados de A, ou seja, B será bloco diagonal: ela terá um bloco 1×1 e um outro 2×2.
   (d) Como A e B comutam, eles tem uma base comum de autoestados. Quer tentar achar? Os itens acima ajudam muito.

12. Responda, sucintamente, e com desenhos se adequados, as seguintes perguntas:

   (a) qual a origem física da interação spin-órbita? Qual sua ordem de grandeza?
   (b) quais são as ordens de grandeza envolvidas nas interações Coulombiana, fina e hiperfina? Expresse seus resultados em função de mc^2 e constantes fundamentais. Em seguida, expresse-os também em elétron-volts.

(c) Qual (quais) termo(s) da interação fina não remove(m) a degenerescência do nível 2s e por quê?

(d) Por que a interação fina não levanta a degenerescência do nível 1s do hidrogênio?

(e) Por que a interação fina não tem elementos de matriz entre os estados 2s e 2p?

(f) O átomo de hidrogênio emite a radiação de 21 cm, famosa em rádio-astronomia. Quais são os níveis de energia envolvidos e a origem dos mesmos (ou seja, as interações responsáveis)?

OPCIONAIS

13. No termo de correção relativística é necessário o cálculo da média $\langle 1/r \rangle$, que pode ser feita através do teorema de Hellmann-Feymann, que afirma a igualdade:

$$\frac{\partial E_n}{\partial \lambda} = \langle \psi_n | \frac{\partial H}{\partial \lambda} | \psi_n \rangle \ ,$$

onde ψ_n são autofunções normalizadas de H com autovalor E_n. O parâmetro λ pode ser, por exemplo, a carga e, a massa m, o momento angular l, enfim, uma constante presente em H. Prove esse teorema, começando com a simples igualdade $E_n = \langle \psi_n | H | \psi_n \rangle$. Lembre que ψ_n também depende de λ.
Agora considere o caso do hidrogênio, em que $H = p^2/2m - e^2/r$ e $E_n = -me^4/(2\hbar^2 n^2)$.

(a) Calcule a média $\langle 1/r \rangle$, para qualquer estado n, tomando para λ o termo e^2.

(b) Como você procede para calcular o valor médio de p^2?

(c) Tente deduzir o termo de correção de primeira ordem, $E_n^{(1)}$, utilizando esse teorema. Basta uma linha.

14. Pesquise sobre a origem física do termo de Darwin, presente na interação fina. Para quais níveis de energia ele é relevante e qual a ordem de grandeza do mesmo?

15. Considere o efeito Stark para o estado $n = 2$ do hidrogênio (sem spin) com campo elétrico na direção $\hat{x}$. Monte a matriz de perturbação (4×4), identifique e justifique (não precisa calcular) todos os elementos nulos. Proceda como em classe, analisando a paridade dos termos.