Mecânica Quântica Avançada— 7600037

Segunda Lista — para praticar para a prova no dia 20/3/2017

1. Encontre a energia e a função de onda do estado ligado de um potencial $V(x) = -V_0\delta(x)$, onde V_0 é uma constante positiva.
2. Encontre a expressão do operador X na base das autofunções do Hamiltoniano
$$H = \frac{P^2}{2m} + m\omega_0^2 X^2,$$
de um oscilador harmônico. *Dica: expresse X como combinação dos operadores de criação e de destruição, e use duas completezas.*
3. Encontre a expressão do operador X^2 na base das autofunções do Hamiltoniano do problema anterior de duas maneiras:
   (a) A partir dos operadores de criação e destruição;
   (b) A partir do resultado do problema 2.
4. Encontre a expressão do operador P na base das autofunções do Hamiltoniano do problema 2.
5. Encontre a expressão do próprio Hamiltoniano na mesma base.
6. Trabalhando na mesma base, encontre o comutador $[X, P]$.
7. Verifique se os operadores $\mathcal{T}_{\hat{i}}$ e $\mathcal{T}_{\hat{j}}$ comutam. O que significa, fisicamente, o resultado?
8. A partir da expressão $\mathcal{T}_{\vec{\Delta x}} = e^{-i\vec{P}\cdot\vec{\Delta x}a}$, verifique se as três propriedades do operador $\mathcal{T}$ encontradas em classe,
$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{d\vec{x}}^{\dagger}\mathcal{T}_{d\vec{x}} &= \mathbb{1} \\ \mathcal{T}_{d\vec{x}}\mathcal{T}_{d\vec{x}'} &= \mathcal{T}_{d\vec{x}+d\vec{x}'} \\ \mathcal{T}_{d\vec{x}}^{-1} &= \mathcal{T}_{-d\vec{x}'}, \end{aligned}$$
são também satisfeitas para deslocamentos finitos.
9. (a) Expanda $\mathcal{T}_{a\hat{i}} = e^{-iPa}$ em série de Taylor
   (b) A partir do resultado do item anterior, calcule $\langle x|\mathcal{T}_{a\hat{i}}|\varphi\rangle$ e interprete o resultado.
10. Num modelo simples para uma molécula de hidrogênio, consideram-se dois estados eletrônicos $|\varphi_E\rangle$ e $|\varphi_D\rangle$ para representar os dois átomos que constituem a molécula. Mais precisamente, cada estado representa um elétron preso a um dos núcleos atômicos. O núcleo do átomo E está na posição $\vec{x}_E = -a\hat{i}$ e o núcleo do átomo D, na posição $\vec{x}_D = a\hat{i}$. Cada átomo tem um elétron. Assim, se os átomos estivessem infinitamente distantes um do outro, a energia de cada um deles seria $E_\infty = -13.6\,\text{eV}$. Como eles não estão tão separados, o elétron de um átomo é atraído pelo núcleo do outro. Assim, cada elétron pode ser transferido de um estado para o outro. O Hamiltoniano que descreve a molécula, nessa base de dois estados, é uma matriz 2×2:
$$H = \begin{bmatrix} E_\infty & V \\ V & E_\infty \end{bmatrix},$$
onde V é a energia com que o núcleo de um dos átomos atrai o elétron preso ao outro núcleo.
   (a) Encontre os autovalores da matriz H. Cada um deles representa um nível de energia da molécula.
   (b) No estado fundamental, o princípio de Pauli permite acomodar dois eelétrons no nível de menor energia. Calcule a energia do estado fundamental e verifique que ela é mais baixa do que a energia dos dois átomos infinitamente distantes.
   (c) Uma vez que nosso modelo é simétrico por inversão, isto é, fisicamente nada muda quando trocamos o estado $|\varphi_E\rangle$ pelo estado $|\varphi_D\rangle$, os autoestados devem ser pares ou ímpares. Identifique a paridade (par ou ímpar) do autoestado que corresponde ao nível de energia mais baixa. Esse estado é conhecido como o estado *ligante*. Verifique que o outro estado, que é conhecido como *antiligante*, tem a paridade oposta.