Exercício para Entrega VI

Escolha um dos exercícios abaixo e entregue

① Considere duas partículas de spin 1/2 interagindo segundo um potencial harmônico de acordo com o hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2}\left(\frac{p_1^2}{m} + \alpha r_1^2\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{p_2^2}{m} + \alpha r_2^2\right) + \frac{\kappa}{2}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2. \tag{1}$$

(a) Encontre a energia do estado fundamental E e sua função de onda $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$. *Para isso utilize as variáveis* $\vec{R} = (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/\sqrt{2}$ *3* $\vec{r} = (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)/\sqrt{2}$.

(b) Determine a equação de Hartree-Fock para esse problema.

Agora, assuma que o estado fundamental do problema de Hartree-Fock é um singleto, onde a função de onda é

$$\Psi_{HF}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \phi(\vec{r}_1)\phi(\vec{r}_2), \tag{2}$$

onde $\phi(\vec{r})$ é esfericamente simétrico.

(c) Resolva o problema para $\phi(\vec{r})$ e determine o autovalor de Hartree-Fock ϵ e a energia do estado fundamental E_{HF}. *Para isso, utilize a função teste* $\Phi(r) = A\exp(-\beta r^2)$.

(d) Faça um gráfico da razão E_{HF}/E e da expressão

$$\int \Psi^*(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\Psi_{EF}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\mathrm{d}^3r_1\mathrm{d}^3r_2, \tag{3}$$

em suas partes real e imaginária como função de κ. O que ocorre nos limites $\kappa \to 0$ e $\kappa \to \infty$? Qual das quantidades de Hartree-Fock estão em melhor acordo com resultado, a energia ou a função de onda?

② Considere um oscilador harmônico unidimensional de massa m, frequência ω_0 e carga q. Seja $|\varphi_n\rangle$ e $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0$ os autovetores e autovalores do Hamiltoniano H_0. Para $t < 0$, o oscilador está no estado fundamental $|\varphi_0\rangle$. Em $t = 0$, submetemos o oscilador a um campo elétrico durante o intervalo de tempo τ; a perturbação correspondente pode ser descrita por

$$W(t) = \begin{cases} -q\mathcal{E}\,X & \text{para} \quad 0 \le t \le \tau \\ 0 & \text{para} \quad t < 0 \text{ e } t > \tau \end{cases}$$

onde $\mathcal{E}$ é a amplitude do campo e X é o operador de coordenada. Seja $\mathcal{P}_{0n}$ a probabilidade de encontrar o oscilador com a energia correspondente ao estado $|\varphi_n\rangle$ após o intervalo de tempo τ.

(a) Calcule $\mathcal{P}_{01}$ usando teoria de perturbações dependente do tempo até primeira ordem. Como varia $\mathcal{P}_{01}$ com τ, para ω_0 fixo?

(b) Mostre que para obter $\mathcal{P}_{02}$ é necessário fazer o cálculo até segunda ordem na teoria de perturbações. Calcule $\mathcal{P}_{02}$ nessa ordem.

(c) Usando o operador de deslocamento é possível encontrar o resultado exato para $\mathcal{P}_{01}$ e $\mathcal{P}_{02}$. Encontre esse resultado. Faça uma expansão do resultado exato em potências de $\mathcal{E}$ para re-encontrar os resultados dos itens (a) e (b).