PGF5001 - Mecânica Quântica I - 1^o semestre, 2019
Segunda prova com uma solução - 03 de julho

1. - Um íon de carga elétrica $+Ze$ é levado a uma distância R de um átomo de hidrogênio (carga total zero), inicialmente em seu estado fundamental. Suponha que $R \gg a_0$, sendo a_0 o raio de Bohr do hidrogênio, de modo que o campo elétrico devido à presença do íon que é sentido pelo átomo possa ser tratado como sendo essencialmente uniforme, embora dependendo da distância R.

a) Obtenha, na menor ordem perturbativa não nula, uma expressão para a variação da energia do estado fundamental do hidrogênio devida à presença do íon. Qual é a dependência dessa energia com R? Você não precisa explicitar a forma das funções de onda, etc., na expressão, mas apenas trabalhá-la até um ponto que permita identificar a sua dependência com R.

b) Essa energia pode ser vista como um potencial de interação entre o íon e o átomo. Tratando-a desse modo, a *força* entre o átomo e o íon devido a essa interação é atrativa ou repulsiva? Ela depende do sinal da carga do íon? Qual é a sua dependência com R?

c) Qual é a sua (da força!) dependência com R?

Solução: a) Nas condições declaradas o campo elétrico devido à presença do íon é essencialmente uniforme sobre o átomo e é dado por $\vec{E} = Ze\hat{z}/R^2$, onde $\hat{z}$ é um vetor unitário dirigido do íon para o átomo. A perturbação H' a ser adicionada ao hamiltoniano H_0 em que o íon não está presente é então

$$H' = \frac{Ze^2}{R^2}\hat{z}\cdot(\vec{r}_p - \vec{r}_e) \equiv -\frac{Ze^2}{R^2}\hat{z}\cdot\vec{r} \quad \text{com} \quad \vec{r} \equiv \vec{r}_e - \vec{r}_p$$

onde $\vec{r}$ corresponde à posição relativa no átomo de hidrogênio. O valor médio de H' no estado fundamental se anula por simetria (H' troca de sinal sob $\vec{r} \to -\vec{r}$, enquanto o produto da função de onda por sua complexo conjugada não se altera sob a mesma transformação), de modo que não há correção de primeira ordem à energia (o que corresponde ao fato de que o efeito Stark no estado fundamental é *quadrático* no valor do campo elétrico aplicado).

A correção de segunda ordem não se anula e tem a forma

$$\Delta E^{(2)} = \frac{Z^2e^4}{R^4}\sum_{j\neq 0}\frac{|\langle e_j|\hat{z}\cdot\vec{r}|e_0\rangle|^2}{e_0 - e_j} \equiv -C\frac{Z^2e^4}{R^4}, \qquad C > 0$$

onde os $|e_j\rangle$ são autoestados de H_0 e e_j as respectivas energias.

b) Como $e_0 < e_{j\neq 0}$ a somatória tem sinal *negativo*, o que corresponde a uma correção de segunda ordem à energia que tem caráter *atrativo.* Isso é claramente independentemente do sinal da carga do íon, pois ele aparece com a potência 2 na correção de segunda ordem. A dependência com R é do tipo R^{-4}.

c) A *força* correspondente tem uma dependência com R do tipo R^{-5}.

d) (Item opcional, bônus de até 30% sobre o valor da questão Como se modificariam os resultados da primeira parte do problema se o átomo se encontrasse inicialmente no estado $2s\frac{1}{2}$, que é essencialmente degenerado com o estado $2p\frac{1}{2}$? Discuta especialmente a dependência da força com R e seu caráter atrativo ou repulsivo.

Neste caso há correções perturbativas não nulas para a energia dos estados degenerados que são de primeira ordem em H'. Elas levam a dois estados deslocados proporcionalmente a Ze^2/R^2, um repulsivamente e outro atrativamente. A função de onda correspondente ao estado que é deslocado atrativamente depende do sinal da carga do íon, e as forças têm uma dependência com R do tipo R^{-3}.

2. - Os estados de dois spins 1/2, $\vec{S}^{(1)}$ e $\vec{S}^{(2)}$, na representação em que $S_3^{(1)}$ e $S_3^{(2)}$ são diagonais, são os quatro estados $|1/2\, m_1;\ 1/2\, m_2\rangle,\ m_i = \pm 1/2$.

a) Determine explicitamente o autovetor do quadrado do spin total $\vec{I} = \vec{S}^{(1)} + \vec{S}^{(2)}$ com autovalor *nulo*, dando sua decomposição em termos dos $|1/2\, m_1;\ 1/2\, m_2\rangle$.

b) Esse estado é um autovetor também da terceira componente $S_3^{(1)}$ do spin $\vec{S}^{(1)}$? Em caso afirmativo dê o autovalor correspondente, e em caso negativo diga porque não é autovetor.

Solução: a) Em geral, $J_\pm|JM\rangle = \sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)}|JM \pm 1\rangle$, o que para $J = 1/2$ dá simplesmente $J_\pm|\frac{1}{2} \mp \frac{1}{2}\rangle = |\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle$ e $J_\pm|\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle = 0$. O autovetor de I^2 e de I_3 com autovalores 1 e $+1$, $|\frac{1}{2}\frac{1}{2}1, +1\rangle$, é o único vetor da base produto com esse autovalor de I_3, $|\frac{1}{2}\frac{1}{2}; \frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle$. Então

$$I_-|\frac{1}{2}\frac{1}{2}1, +1\rangle = \sqrt{2}|\frac{1}{2}\frac{1}{2}1, 0\rangle$$

de modo que $|\frac{1}{2}\frac{1}{2}1, 0\rangle = (S_-^{(1)} + S_-^{(2)})|\frac{1}{2}\frac{1}{2}; \frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle/\sqrt{2} = (|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle + |\frac{1}{2}\frac{1}{2}; \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle)/\sqrt{2}$.

Como o estado procurado deve ter autovalor 0 de I^2, deve ser ortogonal a esse estado, sendo portanto (a menos de uma fase convencional)

$$|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle - |\frac{1}{2}\frac{1}{2}; \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle).$$

b) O estado $|\frac{1}{2}\frac{1}{2}0, 0\rangle$ *não é* autovetor de $S_3^{(1)} \equiv S_3^{(1)} \otimes \hat{1}^{(2)}$, porque é uma combinação linear de dois estados produto que são autovetores desse operador com autovalores *diferentes*.

3. Partícula sujeita a um campo magnético externo uniforme - A dinâmica de uma partícula com massa M e carga elétrica e, sujeita a um campo magnético externo $\vec{B}$, uniforme e independente do tempo, pode ser descrita fazendo a substituição mínima $\vec{p} \to \vec{p} - e\vec{A}(\vec{r})/c$ no hamiltoniano livre $H = p^2/2M$, usando o potencial vetor

$$\vec{A}(\vec{r}) = \frac{1}{2}\vec{B} \times \vec{r}.$$

Note que $\vec{\nabla} \times \vec{A}(\vec{r}) = \vec{B}$, como devido, e que $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$.

a) Tomando a direção z como sendo a direção do campo externo $\vec{B}$, isto é, $\vec{B} \equiv B\hat{z}$, onde $\hat{z}$ é um vetor unitário na direção z, mostre que isso leva a um hamiltoniano que contém, além da energia cinética, um termo linear em B e na componente z do momento angular $\vec{L}$ e a um termo quadrático em B que corresponde a um potencial harmônico nas direções x e y associado à frequência $\omega_B = eB/2Mc$

b) Mostre que p_z e L_z são constantes do movimento, mas p_x, p_y e L^2 *não* são constantes do movimento. **Sugestão:** Use, se assim lhe parecer, argumentos de simetria, em um ou nos dois casos.

c) Como você atacaria o problema de determinaras autofunções simultâneas de p_z, L_z e H? (Por favor, resposta o mais específica possível, de tamanho compatível com Twitter).

Solução: a) Como o potencial vetor escolhido satisfaz $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$, segue que $[\vec{p}, \vec{A}] = 0$ e então

$$
\begin{aligned}
H_B \equiv \frac{1}{2M}\left(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A}(\vec{r})\right)^2 &= \frac{p^2}{2M} - \frac{e}{2Mc}\vec{B} \times \vec{r} \cdot \vec{p} + \frac{e^2}{8Mc^2}(\vec{B} \times \vec{r})^2 = \\
&= \frac{p^2}{2M} - \frac{eB}{2Mc}\hat{z} \cdot \vec{r} \times \vec{p} + \frac{e^2B^2}{8Mc^2}(\hat{z} \times \vec{r})^2.
\end{aligned}
$$

O operador no segundo termo é $L_z \equiv \hat{z} \cdot \vec{L}$. Por outro lado, se as componentes cartesianas de $\vec{r}$ são x, y e z,

$$
\hat{z} \times \vec{r} = x\,\hat{y} - y\,\hat{x} \qquad \text{e portanto} \qquad (\hat{z} \times \vec{r})^2 = x^2 + y^2.
$$

O termo quadrático em B corresponde portanto a um potencial harmônico proporcional a $\rho^2 \equiv x^2 + y^2$ com constante elástica $K \equiv e^2b^2/4Mc^2$, à qual está associada a frequência $\omega_B = \sqrt{K/M} = eB/2Mc$.

b) O primeiro e o último termos evidentemente comutam com p_z, pois $[p_z, \vec{p}] = [p_z, x] = [p_z, y] = 0$. Estes mesmos comutadores mostram ainda que p_z comuta com $L_z = xp_y - yp_x$. O primeiro e o último termos também comutam com L_z, pois esse operador gera rotações em torno do eixo z e esses dois termos são invariantes por essas rotações. Portanto $[H_B, p_z] = 0$ e $[H_B, L_z] = 0$.

Por outro lado, p_x e p_y não comutam com os dois últimos termos de H_B, enquanto $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ não comuta com $\rho^2 \equiv x^2 + y^2$. Um modo de ver isto:

$$
[L^2, x^2 + y^2] = [L^2, r^2] - [L^2, z^2] = -[L_x^2 + L_y^2, z^2], \qquad \text{pois} \qquad [L^2, r^2] = [L_z, z^2] = 0.
$$

Os dois comutadores $[L_x^2, z^2]$ e $[L_y^2, z^2]$ resultantes desse cálculo não são nulos e tampouco sua soma é nula. Explicitamente

$$
[L_x^2, z^2] = L_x[L_x, z^2] + [L_x, z^2]L_x \qquad \text{e} \qquad [L_x, z^2] = [yp_z - zp_y, z^2] = -2i\hbar yz;
$$

então

$$
L_x[L_x, z^2] + [L_x, z^2]L_x = -2i\hbar(yp_z - zp_y)yz + yz(yp_z - zp_y) = -2i\hbar\{y^2(p_z z + zp_z) - z^2(p_y y + yp_y)\}.
$$

Analogamente, $[L_y^2, z^2] = 2i\hbar\{z^2(p_x x + xp_x) - x^2(p_z z + zp_z)\}$.

c) Equação de autovalores para o hamiltoniano como equação a derivadas parciais em coordenadas cilíndricas $\{\rho, \varphi, z\}$.