Universidade de São Paulo em São Carlos 15.6.2011

Mecânica Quântica Aplicada Lista 5

Exercício 1: Considere o átomo de hidrogênio imerso num campo magnético uniforme, descrito pelo hamiltoniano $H = H_0 + H_1$, sendo $H_0 = \mathbf{P}^2/2m + V(r)$ e $H_1 = -(\mu_B/\hbar)\mathbf{L}\cdot\mathbf{B}$ (veja detalhes no Cohen-Tannoudji, Complemento D_VII).

a. Dada a função inicial, $|\Psi_m(0)\rangle = \cos\alpha|\phi_{000}\rangle + \sin\alpha|\phi_{210}\rangle$, obtenha a sua forma no tempo t.

b. Calculo o valor médio $\langle\mathbf{D}\rangle_m(t) = \langle\Psi_m(t)|\mathbf{D}|\Psi_m(t)\rangle$ do operador dipolo elétrico do átomo $\mathbf{D} = q\mathbf{R}$.

c. Analise as frequências e polarizações da radiação emitida a partir da transição dos estados excitados $|\phi_{21m}\rangle$ para o estado fundamental.

Exercício 2: Utilizando as propriedades das funções associadas de Laguerre, obtenha para um átomo hidrogenóide com número atômico Z, os valores médios

$$\langle r\rangle_{nlm} = \frac{n^2 a_B}{Z}\left[1 + \frac{1}{2}\left(1 - \frac{l(l+1)}{n^2}\right)\right] \ ,$$
$$\langle\frac{1}{r}\rangle_{nlm} = \frac{Z}{n^2 a_B} \ .$$

Exercício 3: A partir dos resultados acima, obtenha o valor esperado $\langle r\rangle$ para os estados Ψ_{100}, Ψ_{210} e Ψ_{320} do átomo de hidrogênio. Compare os resultados com aqueles do modelo de Bohr.

Exercício 4: Calcule, para o estado Ψ_{320} do átomo de hidrogênio, os valores esperados $\langle\frac{1}{r}\rangle$ e $\langle p^2\rangle$.

A partir dos resultados, obtenha os valores esperados das energias cinética e potencial, $\langle T\rangle$ e $\langle V\rangle$, e mostre que, de acordo com o teorema virial, $\langle T\rangle = -(1/2)\langle V\rangle$. Compare os resultados com o modelo de Bohr.

Exercício 5: Considere um sistema de duas partículas, de massas μ_1 e μ_2, submetidas a um potencial central $V(r)$ e a uma energia potencial de interação $V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$ que depende apenas da distancias entre as partículas. O hamiltoniano do sistema na representação de interação é $H = H_1 + H_2 + V(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$, com $H_\ell = -\frac{\hbar^2}{2\mu_\ell} + \nabla_\ell^2 + V(r_\ell)$, $\ell = 1, 2, ...$ Mostre que os momentos angulares individuais $\mathbf{L}_\ell$ não são, em geral, constantes de movimento, diferentemente do momento angular total $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1 + \mathbf{L}_2$.

Exercício 6: Considere uma partícula de massa μ descrita pelo hamiltoniano $H = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V(r) + \xi(r)\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$, sendo $V(r)$ um potencial central, $\mathbf{L}$ e $\mathbf{S}$ os seus momentos angulares orbitais e de spin. Obtenha as relações de comutação $[\mathbf{L}, H]$, $[\mathbf{S}, H]$ e $[\mathbf{L}+\mathbf{S}, H]$ quando consideramos ou não a interação spin-órbita $\xi(r)\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ introduzido via correções relativísticas.

Exercício 7: a. Mostre que o operador $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ associado ao acoplamento spin-órbita, satisfaz a relação $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} = L_z S_z + (L_+ S_- + L_- S_+)/2$.
A partir dos resultados do problema anterior, obtenha a representação matricial do operador $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$, considerando as bases:
b. $\{|m_{j1}\rangle \otimes |m_{j2}\rangle\}$ dos autoestados comuns aos operadores $\mathbf{J}_1^2$, $\mathbf{J}_2^2$, J_{1z}, J_{2z};
c. $\{|J, M\rangle\}$, associada aos operadores $\mathbf{J}_1^2$, $\mathbf{J}_2^2$, $\mathbf{J}^2$, J_z.

Exercício 8: Considere o problema da adição do momento angular orbital l e de um spin 1/2. Obtenha os $2l+1$ estados $|l+1/2, M\rangle$, além dos $2l$ estados $|l-1/2, M\rangle$ (que constituem uma base comum aos operadores $\mathbf{l}_1^2$, $\mathbf{s}_2^2$, $\mathbf{J}^2$, J_z), expandidos na base $|m, \epsilon\rangle$ dos autoestados dos operadores $\mathbf{l}_1^2$, $\mathbf{s}_2^2$, l_{1z}, s_{1z} Você pode simplificar o procedimento derivando duas relações de recorrência das quais decorrem os estados desejados.[1]

Exercício 9: Utilize o modelo vetorial para a soma de momentos angulares para a derivação do valor do ângulo entre os vetores que representam
a. dois spins $\alpha(= |+\rangle)$;
b. um spin α e outro β num estado com $S = 1$ e $M_S = 0$;
c. um spin α e outro β num estado com $S = 0$ e $M_S = 0$.
d. Derive os resultados dos itens a., b. e c. considerando os correspondentes valores esperados do operador $\mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2$.

Exercício 10: Considere um sistema de dois elétrons. Mostre que lo operador $(hJ/\hbar^2)\mathbf{s}_1\cdot\mathbf{s}_2$ distingue os estados tripletos do singleto. Considere agora, que os elétrons sejam expostos a um campo magnético B aplicado na direção $\mathbf{e}_z$, de forma que adquiram as energias de interação com o campo $(\mu_B B/\hbar)(g_1 s_{1z} + g_2 s_{2z})$. Obtenha a matriz associada ao hamiltoniano total e demonstre que no regime $hJ \gg \mu_B B$, a representação que privilegia o momento total é mais adequada, enquanto que no regime $hJ \ll \mu_B B$, é conveniente a utilização da representação que privilegia as componentes do momento total.

[1] Veja Cohen-Tannoudji, Vol.2, Complemento A_X.