



DEPARTAMENTO DE FÍSICA
UNIVERSIDADE FEDERAL DE PERNAMBUCO

Exame Geral de Doutorado

Primeiro Semestre de 2016

Teoria Quântica

10/3/2016 - 9h às 12h

Atenção:

- Escolha três dentre as quatro questões.
- Identifique sua Prova apenas com o número de seu CPF.
- Consulte as Informações Auxiliares no final da Prova.

Questão 1: Fundamentos da Mecânica Quântica

Considere o estado inicial ($t = 0$) de um oscilador harmônico quântico *unidimensional* com frequência ω dado por

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\phi_0\rangle + |\phi_1\rangle],$$

onde $|\phi_n\rangle$ são os autoestados do hamiltoniano \hat{H} do oscilador e $n = 0, 1, 2, \dots$ numeram os possíveis níveis do espectro de energia.

Para um dado instante de tempo $t > 0$:

- (a) (30%) Calcule o vetor de estado $|\psi(t)\rangle$ e os *valores esperados* dos operadores de posição $\langle \hat{X} \rangle(t)$ e de momento $\langle \hat{P} \rangle(t)$.

Quais as condições iniciais que um oscilador harmônico *clássico* equivalente deve possuir para que sua posição $x(t)$ e seu momento $p(t)$ obedeam às mesmas equações de movimento dos *valores esperados* $\langle \hat{X} \rangle(t)$ e $\langle \hat{P} \rangle(t)$.

- (b) (20%) Mostre que o princípio da incerteza de Heisenberg

$$\Delta \hat{X} \Delta \hat{P} \geq \hbar/2$$

permanece válido para todo instante de tempo t , onde $(\Delta \hat{A})^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$.

- (c) (50%) Obtenha a função de onda do sistema no instante t na representação das posições, i.e. $\psi(x, t) = \langle x | \psi(t) \rangle$.

Sugestão: utilize as seguintes relações: $\hat{a}|\phi_0\rangle = 0$ para obter a função de onda do estado fundamental $\phi_0(x) = \langle x | \phi_0 \rangle$, e $\hat{a}^\dagger |\phi_0\rangle = |\phi_1\rangle$ para obter a função de onda do primeiro estado excitado $\phi_1(x) = \langle x | \phi_1 \rangle$, onde \hat{a} e \hat{a}^\dagger são os operadores de *abaxamento* e *elevação* dos auto-estados com relação ao espectro da energia.

Obs: Não é necessário normalizar a função de onda.

Questão 2: Átomo de Hidrogênio - Interação Spin-Órbita

Considere um átomo de hidrogênio, no qual o elétron possui um momento magnético intrínseco $\vec{\mu}_S = -\frac{e}{m}\vec{S}$, onde m é a massa, e é a carga, e \vec{S} , o spin.

Usando uma abordagem *semi-clássica*, esse elétron percorre uma órbita circular fechada de raio r , com velocidade v , em torno do núcleo.

No referencial do elétron, o campo magnético gerado pelo núcleo é

$$\vec{B} = -\frac{1}{c^2}\vec{v} \times \vec{E}, \quad (v \ll c)$$

onde \vec{E} representa o campo elétrico *coulombiano* gerado pelo núcleo e c é a velocidade da luz no vácuo.

- (a) (30%) A partir do hamiltoniano de interação do elétron com o campo magnético no referencial do elétron, obtenha a expressão para a interação spin-órbita

$$H_{\text{so}} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{e}{mc}\right)^2 \frac{1}{r^3} \vec{L} \cdot \vec{S}.$$

- (b) (30%) Obtenha, em primeira ordem perturbativa, a expressão geral para as correções de energia causadas pela interação spin-órbita para um dado nível n , em termos de (j, ℓ, s) , que são respectivamente os números quânticos de \hat{L}^2 , \hat{S}^2 e \hat{J}^2 , onde $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$.

Dados:

$$\int_0^\infty \frac{dr}{r} [R_{n\ell}(r)]^2 = \left(\frac{1}{a_0 n}\right)^3 \frac{1}{\ell(\ell + 1/2)(\ell + 1)},$$

onde $R_{n\ell}(r)$ é a parte radial da autofunção do átomo hidrogênio não perturbado e a_0 é o raio de Bohr.

- (c) (40%) Considere o nível de energia $n = 2$ com momento angular orbital $\ell = 1$. Obtenha, a partir do resultado em (b), as possíveis correções de energia.

Indique também as possíveis degenerescências de cada um desses subníveis.

Questão 3: Potencial Central

Considere uma partícula de massa m com energia $E < 0$ (estados *ligados*) submetida a um potencial central da forma

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r < a, \\ 0, & r > a. \end{cases} \quad \text{com } V_0 > 0.$$

denominado de *poço* de potencial *esférico*.

- (a) (30%) Considere que o operador hamiltoniano \hat{H} em coordenadas esféricas (r, θ, ϕ) é escrito na forma

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r) \quad \text{com} \quad \nabla^2 \dots = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r \dots) - \frac{1}{\hbar^2 r^2}\hat{L}^2 \dots$$

onde \hat{L}^2 a parte angular do operador laplaciano e \hat{L} o operador momentum angular.

Restrinja-se ao caso particular dos *orbitais s*, isto é, das autofunções de \hat{L}^2 com número quântico $\ell = 0$, e obtenha a equação diferencial ordinária que governa a função $U(r) = rR_0(r)$, sendo $R_0(r)$ a parte radial da função de onda os orbitais s .

- (b) (40%) Resolva a equação para $U_0(r)$ considerando o potencial $V(r)$ dado acima e mostre que as possíveis energias são determinadas pela equação transcendental

$$q \cot qa = -\kappa,$$

onde

$$q = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - |E|)} \quad \text{e} \quad \kappa = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m|E|}$$

- (c) (30%) Mostre que para existir pelo menos um estado *ligado* o potencial dever ter uma intensidade mínima:

$$V_0 > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8ma^2}.$$

QUESTÃO 4: Partículas idênticas e teoria de espalhamento

Um átomo de hélio contém dois elétrons, rotulados 1 e 2, em coordenadas espaciais \vec{r}_1 e \vec{r}_2 em relação ao referencial do núcleo.

Considere, inicialmente, a situação em que os elétrons não interagem entre si.

Nessa aproximação, os autoestados eletrônicos do He podem ser escritos, na base $|n, \ell, m\rangle \otimes |S, m_S\rangle$ dos autovetores de $\{\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z\}$, ou seja como *produto direto* dos autoestados eletrônicos do átomo de hidrogênio (hamiltoniano \hat{H}), i.e.

$$\Phi_{S_1, S_2}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \chi_{m_{S_1}, m_{S_2}} = \Phi_{n_1 \ell_1 m_1}(\vec{r}_1) \Phi_{n_2 \ell_2 m_2}(\vec{r}_2) \chi_{m_{s_1}} \chi_{m_{s_2}}$$

na qual Φ e χ representam, respectivamente, as partes espacial (n , ℓ , e m são os números quânticos) e de spin (m_s é o número quântico de spin) dos autoestados eletrônicos do átomo de hidrogênio.

Considere que os elétrons são *indistinguíveis* e use as *regras de simetrização*.

- (a) (30%) Obtenha os possíveis autoestados para o conjunto dos dois elétrons no *estado fundamental* do átomo de hélio. Explique qual seria o efeito da aplicação de um campo magnético uniforme nesse estado.
- (b) (30%) Obtenha os possíveis autoestados para o conjunto de dois elétrons no *primeiro estado excitado* do átomo de hélio.
- (c) (40%) Suponha agora os elétrons interagindo entre si de forma coulombiana. Obtenha a correção em primeira ordem perturbativa de energia do sistema em seu estado fundamental original, i.e.

$$\Delta E = \frac{5}{8} \frac{Ze^2}{a_0}$$

onde $a_0 = \hbar^2 / me^2$.

Sugestão: ao considerar o termo $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^{-1}$ escolha a orientação de \vec{r}_1 ao longo do eixo de simetria azimutal \hat{z} .

Dado:

$$\int_0^\infty \int_0^\infty dr_1 dr_2 r_1 r_2 (r_1 + r_2 - |r_1 - r_2|) e^{-2(r_1 + r_2)/a_0} = \frac{5a_0^5}{64}$$

Informações Auxiliares:**Operadores para o Oscilador Harmônico Quântico:**

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \quad \text{e} \quad \hat{P} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{a}^\dagger - \hat{a})$$

$$\hat{a}^\dagger |\phi_n\rangle = \sqrt{n+1} |\phi_{n+1}\rangle \quad \text{e} \quad \hat{a} |\phi_n\rangle = \sqrt{n} |\phi_{n-1}\rangle$$

Átomos Hidrogenóides:

$$\int_0^\infty \frac{dr}{r} [R_{n\ell}(r)]^2 = \left(\frac{Z}{a_0 n} \right)^3 \frac{1}{\ell(\ell+1/2)(\ell+1)},$$

onde $R_{n\ell}(r)$ é a parte radial das autofunções de um átomo hidrogenóide.

$$R_{10}(r) = \frac{2}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}$$

Z denota o número de carga nuclear, e a_0 é o raio de Bohr.

Operador Laplaciano:

Parte angular do operador laplaciano em coordenadas esféricas:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]$$