MECÂNICA QUÂNTICA II
Curso de Eng. Física
Série 4

1. Mostre as seguintes relações:

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]}$$

se se verificar

$$[[A,B],A] = [[A,B],B] = 0$$

b)

$$D^{-1}(\beta)D(\alpha) = D(\alpha-\beta)e^{\frac{1}{2}(\beta^*\alpha-\alpha^*\beta)}$$

$$Tr(D^{-1}(\beta)D(\alpha)) = \delta^2(\alpha-\beta)$$

em que $\delta^2(\alpha-\beta) = \delta(\alpha_r-\beta_r)\delta(\alpha_i-\beta_i)$

c)

$$\lambda^{a^\dagger a} =: e^{(\lambda-1)a^\dagger a} :$$

d)

$$a^\dagger f(N) = f(N-1)a^\dagger$$

$$af(N-1) = f(N)a$$

2. Mostre os seguintes resultados em que $|\alpha>$ é um estado coerente

a)

$$\int \frac{d^2\eta}{\pi} < \alpha|D(\eta)|\beta >< \gamma|D^{-1}(\eta)|\delta > = < \alpha|\delta >< \gamma|\beta > .$$

Verifique que

$$f(\alpha) = \int \frac{d^2\eta}{\pi} e^{-|\eta|^2+\eta^*\alpha} f(\eta).$$

b)

$$\hat{F} = \int \frac{d^2\eta}{\pi} Tr\left(\hat{F}D(\eta)\right) D^{-1}(\eta)$$

c)

$$Tr(\hat{F}\hat{G}) = \int \frac{d^2\eta}{\pi} Tr\left(\hat{F}D(\eta)\right) Tr\left(D^{-1}(\eta)\hat{G}\right)$$

3. a) Numa rotação infinitesimal um vector $\vec{A}$ transforma-se de acordo com $\delta\vec{A} = \delta\phi\vec{n} \times \vec{A}$ em que $\delta\phi$ é o ângulo infinitesimal de rotação e $\vec{n}$ o eixo da rotação. Mostre que os geradores L^i das rotações, em coordenadas cartesianas, são portanto representados pelas matrizes $L^i_{jk} = -i\epsilon^{ijk}$. Verifique que estas matrizes constituem uma representação de momento angular com $l = 1$, verificando que as relações de comutação $[L^i, L^j] = i\epsilon^{ijk}L^k$ e a relação $\vec{L}^2 = 2$, são satisfeitas, e verificando que esta é a forma que os operadores $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ tomam na base $\psi_i(\vec{r}) = x^i$.

b) Dada uma matriz $A = a_0 + \vec{a} \cdot \vec{\sigma}$, em que σ são as matrizes de Pauli, mostre que a_0 e $\vec{a}$ são dados por:

$$a_0 = \frac{1}{2} Tr A, \vec{a} = \frac{1}{2} Tr \vec{\sigma} A$$

4. Considere um spin em interacção com um campo magnético dado por $\vec{h} = (h_1 \cos\omega t, h_1 \sin\omega t, h_0)$. Dado que o efeito de um campo magnético sobre um spin é uma precessão em torno desse campo, é possível tratar exactamente este problema passando para um referencial que roda em torno do eixo dos z com velocidade angular ω.

Obtenha a expressão do spinor em função do tempo. Admitindo que estava inicialmente no estado $|+>$, vector próprio de S_z, determine a probabilidade de transição para o estado $|->$ e determine quando é que essa probabilidade é máxima (condição de ressonância em ressonância magnética nuclear).

5. Considere um oscilador harmónico, cuja função de onda no instante de tempo inicial $t = t_i$ é dada por uma função de onda gausseana $\psi(x) = e^{-\frac{a}{2}x^2+bx+c}$, sendo a, b, c constantes complexas, com $\Re a > 0$, ou, equivalentemente, dada por

$$\psi(x) = \left(\frac{a_r}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{a}{2}(x-<x>)^2+\frac{i}{\hbar}<p>x-\frac{i}{2}<p><x>+id}$$

em que $d = c_i + \frac{i}{2} b_i < x >$, e sendo $< x >, < p >$ o valor expectável dos operadores x, p respectivamente. As fluctuações destes operadores são dadas por $(\Delta x)^2 = \frac{1}{2a_r}$ e $(\Delta p)^2 = \frac{\hbar^2 |a|^2}{2a_r}$. A função de onda vai evoluir no tempo continuando a ser gausseana (pois o elemento de matriz do operador de evolução é gausseano, por exemplo).

a) Verifique que esta função é solução da equação de Schödinger e determine as equações de evolução dos parâmetros a, b, c.

b) Particularize para uma partícula livre, fazendo a frequência do oscilador harmónico $\omega_0 = 0$. Obtenha a expressão de a em função do tempo, e obtenha $(\Delta x)^2$ e $(\Delta p)^2$ em função do tempo, mostrando o espalhamento da função de onda.

c) Passe a considerar variáveis adimensionais $X = \sqrt{\frac{m\omega_0}{\hbar}} x, P = \frac{p}{\sqrt{m\omega_0 \hbar}}$, bem como $u = \frac{\hbar}{m\omega_0} a, v = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}} b$. Mostre que $(\Delta x)^2, (\Delta P)^2$ oscilam no tempo com uma frequência $2\omega_0$, mantendo a sua soma constante. Determine $(\Delta x)^2 (\Delta P)^2$.

d) Verifique que $< X >, < P >$ satisfazem as equações clássicas de movimento

$$< X >' = < P >$$

$$< P >' = - < X >$$

sendo a derivação em ordem a $\omega_0 t$.

e) Verifique que a equação de evolução para c_r é automaticamente satisfeita por $e^{c_r} = \left(\frac{a_r}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \exp(-\frac{b_r^2}{2a_r})$, pois a norma da função de onda é conservada.

f) Obtenha a equação de evolução da fase d_i.

g) Compare os resultados obtidos com os encontrados no caso de um estado coerente.

6. Considere o estado $|0 >_\lambda$ de um oscilador harmónico a uma dimensão representado pela função de onda

$$\psi_\lambda(x) = < x|0 >_\lambda = \frac{1}{(\pi\lambda)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{X^2}{2\lambda}}$$

em que X é a coordenada adimensional. Calcule a sua projecção $< \alpha|0 >_\lambda$ sobre o estado coerente $|\alpha >$ e mostre que aquele estado pode ser obtido a partir do estado fundamental pela seguinte expressão:

$$|0>_\lambda = \frac{1}{\sqrt{\frac{1}{2}(\sqrt{\lambda}+\frac{1}{\sqrt{\lambda}})}} \exp\left(\frac{1}{2}\frac{\lambda-1}{\lambda+1}(a^\dagger)^2\right)|0> .$$

A função de onda do estado coerente $|\alpha>$ é dada por:

$$\psi_\alpha(x) =< x|\alpha >= \frac{1}{(\pi)^{\frac{1}{4}}} \exp\left(-\frac{X^2}{2} + \sqrt{2}\alpha X - \frac{1}{2}(|\alpha|^2+\alpha^2)\right)$$

7. As matrizes de Pauli satisfazem a identidade

$$(\vec{a}.\vec{\sigma})\left(\vec{b}.\vec{\sigma}\right) = \vec{a}.\vec{b} + i\left(\vec{a}\times\vec{b}\right).\vec{\sigma}$$

se todas as componentes de $\vec{a}$ e $\vec{b}$ comutarem com as componentes de $\vec{\sigma}$. Se as componentes de $\vec{a}$ comutarem entre si então $\vec{a}\times\vec{a} = 0$. Como as componentes de $\vec{p}$ comutam, é possível na ausência de um campo magnético escrever a energia cinética de uma partícula de spin $\frac{1}{2}$ na forma $(\vec{\sigma}.\vec{p})^2/2m$. No entanto, na presença de um campo as componentes de $\vec{p} - e\vec{A}/c$ não comutam entre si. Mostre que

$$\frac{1}{2m}\left[\vec{\sigma}.\left(\vec{p}-\frac{e\vec{A}}{c}\right)\right]^2 = \frac{1}{2m}\left(\vec{p}-\frac{e\vec{A}}{c}\right)^2 - \frac{e}{mc}\frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}.\vec{H},$$

que dá portanto as contribuições de spin e orbital numa forma compacta (desde que $g_0 = 2$).

8. Considere o Hamiltoniano do átomo de hidrogénio

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{r}$$

Mostre que o vector de Runge-Lenz

$$\vec{K} = \frac{1}{2me^2}\left[\vec{L}\times\vec{p} - \vec{p}\times\vec{L}\right] + \frac{\vec{r}}{r}$$

é um operador vectorial que comuta com H e que tem as propriedades $\vec{L}.\vec{K} = \vec{K}.\vec{L} = 0$ e

$$[K_i, K_j] = i\hbar \frac{-2H}{me^4} \epsilon_{ijk} L_k.$$

Mostre que o operador vectorial $\vec{A} = \sqrt{-me^4/2E}\vec{K}$ definido no subespaço dos estados ligados com energia $E(\leq 0)$ satisfaz as relações de comutação

$$[A_i, A_j] = i\hbar\epsilon_{ijk} L_k.$$

Verifique que os operadores $\vec{J} = 1/2(\vec{L} + \vec{A})$ e $\vec{J}' = 1/2(\vec{L} - \vec{A})$ obedecem a relações de comutação de momento angular e à condição $\vec{J}^2 = \vec{J}'^2$. Verifique a identidade

$$\vec{J}^2 + \vec{J}'^2 = -1/2\hbar^2 - \frac{1}{2}\frac{me^4}{2E}$$

e deduza dela a fórmula de Balmer-Bohr para os níveis de energia do átomo de hidrogénio.

9. Um sistema quântico magnético é perturbado acoplando-o a um campo magnético externo, de acordo com o Hamiltoneano

$$\delta H = -\vec{h(t)} \cdot \vec{S}$$

Mostre que a alteração da magnetização é dada, na chamada resposta linear, por

$$\delta \vec{m(t)} = \delta < \vec{S_H}(t) >= \frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t} dt' < [S_H(t), \vec{S}_H(t') \cdot \vec{h}(t')] >$$

em que $< \cdots >$ representa a média com a matriz densidade. Obtenha a expressão da susceptibilidade.

10. Demonstre as seguintes identidades, válidas para dois operadores quaisquer$A$ e B:

$$\begin{aligned}
B(\lambda) &= e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} \\
&= B + \int_0^{\lambda} d\lambda' [A, B(\lambda')] \\
&= B + \lambda [A, B] + \frac{\lambda^2}{2!}[A,[A,B]] + \frac{\lambda^3}{3!}[A,[A,[A,B]]] + \cdots
\end{aligned}$$

$$[B, e^{-\lambda A}] = \int_0^\lambda d\lambda' e^{-(\lambda-\lambda')A}[A, B]e^{-\lambda' A}$$

Como exemplo, calcule

$$[J_z, e^{-\alpha J_\pm}] = \mp\alpha J_\pm e^{-\alpha J_\pm}$$

11. Demonstre que, se o hamiltoneano $H(t)$ depender de um parâmetro λ, se verifica:

$$\frac{\partial U(t, t_i)}{\partial \lambda} = -\frac{i}{\hbar}\int_{t_i}^t dt' U(t, t')\frac{\partial H(t')}{\partial \lambda}U(t', t_i)$$

em que $U(t, t')$ é o operador de evolução relativo ao hamiltoneano $H(t)$.

12. a) Mostre que as representações de spin $\frac{1}{2}$ das rotações podem ser escritas da forma

$$e^{-i\frac{\phi}{2}\vec{n}.\vec{\sigma}} = \cos\frac{\phi}{2} - i\vec{n}.\vec{\sigma}\sin\frac{\phi}{2}$$

em que $\vec{\sigma}$ são as matrizes de Pauli e o vector $\vec{n}$ é unitário, $|\vec{n}|^2 = 1$, usando $(\vec{a}.\vec{\sigma})^2 = |\vec{a}|^2$.

b) Mostre que as representações de spin 1 das rotações podem ser escritas da forma

$$e^{-i\phi\vec{n}.\vec{L}} = \delta^{||} + \cos\phi\delta^{\perp} - i\sin\phi\vec{n}.\vec{L}$$

em que as componentes de $\vec{L}$ são dadas por $L^i_{lm} = -i\epsilon_{ilm}$ e o vector $\vec{n}$ é unitário, $|\vec{n}|^2 = 1$. As matrizes $\delta^{||}, \delta^{\perp}$ são definidas por $\delta^{||}_{lm} = n_l n_m$ e $\delta^{\perp}_{lm} = \delta_{lm} - \delta^{||}_{lm}$. Verifique que $(\vec{n}.\vec{L})^2 = \delta^{\perp}$ e que $(\vec{n}.\vec{L})\delta^{\perp} = \vec{n}.\vec{L}$.

Particularize para uma rotação em torno do eixo dos z.

c) Mostre, usando o resultado da alínea b), que o operador momento angular $\vec{J}$ na representação J tem, em virtude de ser um operador vectorial, de satisfazer a

$$\exp\left(\frac{i}{\hbar}\vec{n}.\vec{J}\phi\right)\vec{J}\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\vec{n}.\vec{J}\phi\right) = \vec{n}(\vec{n}.\vec{J}) - \vec{n}\times(\vec{n}\times\vec{J})\cos\phi + \vec{n}\times\vec{J}\sin\phi$$

verificando que o lado direito da equação é o vector obtido rodando $\vec{J}$ em torno de $\vec{n}$ por um ângulo ϕ.

Verifique explicitamente esta relação para spin $\frac{1}{2}$ usando os resultados da alínea a).

13) No efeito de Zeeman a interação de um átomo com um campo magnético $\vec{h}$ é descrita pelo Hamiltoneano

$$\Delta H = -\frac{e}{2mc}\vec{h} \cdot (\vec{L} + 2\vec{S})$$

sendo a alteração dos níveis de energia dada por $\Delta E = -Mg\mu_B h$, em que $M = -J, -J+1, \cdots, +J$, $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$ e g é o factor de Landé.

Obtenha a expressão

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}.$$

para o factor de Landé.

14. Considere os operadores $J_+ = J_x + iJ_y$ e $J_- = J_x - iJ_y$, onde J_x, J_y, J_z são as componentes do operador momento angular e $|jm_j>$ os vectores próprios de J^2, J_z.

a) Prove que satisfazem às relações de comutação $[J^2, J_+] = 0$, $[J^2, J_-] = 0$, $[J_z, J_+] = \hbar J_+$, $[J_z, J_-] = -\hbar J_-$, $[J_+, J_-] = 2\hbar J_z$.

b) Obtenha as equações que exprimem a acção de J_+ e J_- em $|jm_j>$.

15. Considere um sistema de duas partículas com momento angular J_1 e J_2, e momento angular total J. Os estados deste sistema podem ser representados em duas bases distintas, embora não independentes, conforme acoplamos ou não os momentos individuais.

a) Represente essas bases.

b) Como poderá expandir um vector de uma base, em função dos elementos da outra base?

c) Supondo que os vectores são ortogonais e os coeficientes da expansão reais obtenha uma relação de ortogonalidade para esses coeficientes.

d) Usando os operadores $J_{1+}, J_{2+}, J_{1-}, J_{2-}, J_+, J_-$, obtenha uma relação de recorrência para os coeficientes.

e) A partir de d) obtenha o coeficiente para $j_1 = j_2$ e $j = 0$.

16. Construir os estados de spin total de dois electrões independentes.

17. Construir os estados de momento angular total de duas partículas independentes, com $j_1 = 1$ e $j_2 = 1/2$.

18. Considere o vector $\vec{\sigma}$, que tem as propriedades de um tensor irredutível de primeira ordem, com $\sigma_0 = \sigma_z$, onde σ_z é a matriz de Pauli satisfazendo $\sigma_z|sm_s = 1/2 >= |sm_s = 1/2 >$ e $\sigma_z|sm_s = -1/2 >= -|sm_s = -1/2 >$. Usando o teorema de Wigner-Eckart, determine os elementos de matrix de σ_z na base $|nlsjm_j >$.

19. A componente do momento angular L_z é uma das componentes de um tensor irredutível de primeira ordem. Usando o teorema de Wigner-Eckart, determine os elementos de matrix de L_z na base $|nlsjm_j >$.

20. O vector posição $\vec{r}$ é um tensor irredutível de primeira ordem, quando definido por $r_0 = z$, $r_+ = -(x+iy)/\sqrt{2}$, $r_- = (x-iy)/\sqrt{2}$, o que equivale a $r_\mu = \left(\frac{4\pi}{3}\right)^{1/2} rY_{1\mu}$. Usando o teorema de Wigner-Eckart, determine os elementos de matrix de r_μ na base $|nlm >$.

Tabela

$(j\frac{1}{2}mm'|IM)$

I	$m' = +\frac{1}{2}$	$m' = -\frac{1}{2}$
$j+\frac{1}{2}$	$\left(\frac{j+M+\frac{1}{2}}{2j+1}\right)^{\frac{1}{2}}$	$\left(\frac{j-M+\frac{1}{2}}{2j+1}\right)^{\frac{1}{2}}$
$j-\frac{1}{2}$	$-\left(\frac{j-M+\frac{1}{2}}{2j+1}\right)^{\frac{1}{2}}$	$\left(\frac{j+M+\frac{1}{2}}{2j+1}\right)^{\frac{1}{2}}$

		$(j1mm'\|IM)$	
I	$m'=+1$	$m'=0$	$m'=-1$
$j+1$	$\left\{\frac{(j+M)(j+M+1)}{(2j+1)(2j+2)}\right\}^{\frac{1}{2}}$	$\left\{\frac{(j-M+1)(j+M+1)}{(2j+1)(j+1)}\right\}^{\frac{1}{2}}$	$\left\{\frac{(j-M)(j-M+1)}{(2j+1)(2j+2)}\right\}^{\frac{1}{2}}$
j	$-\left\{\frac{(j+M)(j-M+1)}{2j(j+1)}\right\}^{\frac{1}{2}}$	$\frac{M}{\sqrt{j(j+1)}}$	$\left\{\frac{(j-M)(j+M+1)}{2j(j+1)}\right\}^{\frac{1}{2}}$
$j-1$	$\left\{\frac{(j-M)(j-M+1)}{2j(2j+1)}\right\}^{\frac{1}{2}}$	$-\left\{\frac{(j-M)(j+M)}{j(2j+1)}\right\}^{\frac{1}{2}}$	$\left\{\frac{(j+M+1)(j+M)}{2j(2j+1)}\right\}^{\frac{1}{2}}$