

# Mecânica Quântica – Série 12

## Curso de Engenharia Biomédica – 2008/2009

(Versão de 25 de Novembro de 2008)

**\* 12.1** *Gasiorowicz 12.5*

Notas:

1. O oscilador harmónico a 3D é dado pelo Hamiltoniano não perturbado

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$$

2. Guiados pelo problema a uma dimensão, e pelo átomo de Hidrogénio, concluimos que o estado fundamental deve ser esfericamente simétrico ( $l = 0$ ) e sua função de onda deve ser

$$u_0(r) = Ne^{-\beta r^2}$$

e que as energias devem ser

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{3}{2} \right)$$

3. Use a equação de Schrödinger ( $l = 0$ )

$$\frac{d^2 u_0}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{du_0}{dr} = \frac{2m}{\hbar^2} (V(r) - E_0) u_0$$

para mostrar que

$$E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega, \quad \beta = \frac{m\omega}{2\hbar}$$

4. Use a condição de normalização para mostrar que a função de onda do estado fundamental deve ser

$$u_0(r) = \left( \frac{2}{\pi} \right)^{3/4} \left( \frac{m\omega}{2\hbar} \right)^{3/4} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} r^2}$$

5. Mostre que

$$\langle 0|V(r)|0\rangle = \frac{3}{4}\hbar\omega, \quad \langle 0|V(r)^2|0\rangle = \frac{15}{16}\hbar^2\omega^2,$$

e a partir daí obtenha a resposta

$$E_0^{(1)} = -\frac{15}{32} \frac{(\hbar\omega)^2}{mc^2}$$

**\* 12.2** Compare a ordem de grandeza dos desdobramentos fino (só a parte spin-órbita, as correcções relativistas são da mesma ordem de grandeza) e hiperfino no átomo de hidrogénio, com a correcção ao tamanho finito do próton, Problema 11.3. Os hamiltonianos são, respectivamente,

$$H_{\text{SO}} = \frac{a}{\hbar^2} \vec{S}_e \cdot \vec{L}, \quad H_{\text{HF}} = \frac{b}{\hbar^2} \left( 3\vec{e}_r (\vec{e}_r \cdot \vec{S}_p) - \vec{S}_p + \frac{8\pi}{3} \vec{S}_p r^3 \delta(\vec{r}) \right) \cdot (\vec{L} + 2\vec{S}_e)$$

onde  $m_e$  e  $m_p$  são, respectivamente as massas do electrão e protão,  $\vec{S}_p$  o spin do protão,  $g_p = 5.56$  o factor  $g$  para o protão, e

$$a = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\hbar^2}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r^3}, \quad b = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{g_p \hbar^2}{4m_p m_e c^2} \frac{1}{r^3}$$

Notar que da maneira que estão definidas,  $a$  e  $b$ , têm as dimensões duma energia e portanto os seus valores médios dão a ordem de grandeza dos respectivos desdobramentos.

**12.3** O resultado exacto da equação de Dirac para a energia no átomo de hidrogénio é

$$E_{nj} = mc^2 \left( \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{\nu_{nj}^2}}} - 1 \right), \quad \text{onde } \nu_{nj} = n - \left(j + \frac{1}{2}\right) + \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - \alpha^2}$$

Faça o desenvolvimento em potências de  $\alpha$  até à ordem  $\alpha^4$ , inclusive, e veja que está de acordo com a estrutura fina mais correcções relativistas encontradas na aula. De fora, ficam só as correcções do desdobramento hiperfino, pois a equação de Dirac continua a considerar o protão como um centro de força sem estrutura.

**\* 12.4** *Adaptado de Griffiths 6.20*

No *efeito de Zeeman* há normalmente duas situações a considerar: ou o campo  $\vec{B}$  é muito menor que  $\vec{B}_{\text{int}}$ , o campo sentido pelo electrão no seu referencial próprio, e então o efeito spin-órbita domina e as funções próprias devem ser as funções próprias de  $L^2, S^2, J^2$  e  $J_z$ , ou quando  $|\vec{B}| \gg |\vec{B}_{\text{int}}|$  então as boas funções próprias devem ser as funções de  $L^2, S^2, L_z$  e  $S_z$ .

a) Explique porque é que na presença dum campo exterior *forte* o momento angular total não é um bom número quântico.

b) Sabendo que o campo no referencial do electrão, já incluindo a correcção da *precessão de Thomas* (que corrige pelo facto do referencial do electrão não ser um referencial de inércia), é dado por

$$\vec{B}_{\text{int}} = \frac{e}{8\pi\epsilon_0} \frac{1}{m_e c^2 r^3} \vec{L}$$

faça uma estimativa do valor do campo  $\vec{B}$  que dá origem ao efeito de Zeeman *fraco* e *forte*, também designado por *efeito de Paschen-Back*. Para fazer as contas é útil introduzir o chamado *magnetão de Bohr*

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} = 5.788 \times 10^{-5} \text{ eV/T}$$

e mostrar que

$$B_{\text{int}} = \frac{1}{4} \frac{m_e c^2 \alpha^4}{\mu_B}$$

**\* 12.5** *Gasiorowicz 12.3*

Notas:

1. Neste problema  $l = 0$  e portanto não há o acoplamento spin órbita.
2. Discuta o que é campo fraco e forte neste problema.

3. É conveniente escolher a base das combinações tripleto e singleto. Assim

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= |1, +1\rangle = |1/2, +1/2\rangle_e |1/2, +1/2\rangle_p \\ |\psi_2\rangle &= |1, -1\rangle = |1/2, -1/2\rangle_e |1/2, -1/2\rangle_p \\ |\psi_3\rangle &= |1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1/2, +1/2\rangle_e |1/2, -1/2\rangle_p + \frac{1}{\sqrt{2}} |1/2, -1/2\rangle_e |1/2, +1/2\rangle_p \\ |\psi_4\rangle &= |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |1/2, +1/2\rangle_e |1/2, -1/2\rangle_p - \frac{1}{\sqrt{2}} |1/2, -1/2\rangle_e |1/2, +1/2\rangle_p \end{aligned}$$

4. Mostre que nesta base o hamiltoniano se escreve

$$H' = \begin{bmatrix} \frac{A}{4} + \frac{a}{2} + \frac{b}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{A}{4} - \frac{a}{2} - \frac{b}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{A}{4} & \frac{a}{2} - \frac{b}{2} \\ 0 & 0 & \frac{a}{2} - \frac{b}{2} & -\frac{3A}{4} \end{bmatrix}$$

com valores próprios  $\frac{A}{4} \pm \left(\frac{a}{2} + \frac{b}{2}\right)$  e  $-\frac{A}{4} \pm \sqrt{\frac{A^2}{4} + \left(\frac{a}{2} - \frac{b}{2}\right)^2}$ .

5. Este é um problema para fazer exactamente. Compare com a teoria das perturbações para o caso de campo fraco e forte.

### 12.6 Adaptado de Griffiths 6.27

Mostre o seguinte resultado

$$\int d\Omega (\vec{a} \cdot \vec{e}_r)(\vec{b} \cdot \vec{e}_r) = \frac{4\pi}{3}(\vec{a} \cdot \vec{b})$$

para vectores  $\vec{a}$  e  $\vec{b}$  constantes, isto é que não dependam das coordenadas angulares. Usámos na aula este resultado para o acoplamento hiperfino.

Nota:

$$\vec{e}_r = \sin \theta \cos \varphi \vec{e}_x + \sin \theta \sin \varphi \vec{e}_y + \cos \theta \vec{e}_z$$

12.7 Calcule as energias dos estados  $2P$  do átomo de hidrogénio num campo magnético exterior quando o campo muda dum campo fraco  $B \ll B_{\text{int}}$  para um campo forte  $B \gg B_{\text{int}}$ . Compare com os resultados de teoria de perturbações nos limites fraco e forte que vimos na aula. Inclua as correcções relativistas e o acoplamento spin-órbita.

Notas:

1. Para fazer o problema tem que diagonalizar o seguinte Hamiltoniano

$$H' = H'_{\text{rel}} + \frac{a}{\hbar^2} \vec{S} \cdot \vec{L} + \frac{\mu_B B}{\hbar} (L_z + 2S_z) \equiv H'_{\text{FS}} + \frac{\mu_B B}{\hbar} (L_z + 2S_z)$$

onde

$$a = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\hbar^2}{2m_e^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle, \quad H'_{\text{rel}} = -\frac{1}{2m_e c^2} \left( \frac{p^2}{2m_e} \right)^2$$

e  $H_{\text{FS}}$  é o hamiltoniano de estrutura fina, soma da correcção relativista com o acoplamento spin-órbita.

2. Deve trabalhar na base de estados próprios de  $J^2$  e  $J_z$ , pois então o  $H'_{\text{FS}}$  é diagonal, isto é, como vimos na aula,

$$H'_{\text{FS}} |j, m_j\rangle = \frac{1}{8} m_e c^2 \frac{\alpha^4}{n^4} \left[ 3 - \frac{4n}{j + 1/2} \right] |j, m_j\rangle$$

o que dá para os estados  $2P_{3/2}$  e  $2P_{1/2}$

$$H'_{\text{FS}} |3/2, m_j\rangle = -\gamma |3/2, m_j\rangle, \quad H'_{\text{FS}} |1/2, m_j\rangle = -5\gamma |1/2, m_j\rangle,$$

com

$$\gamma = \frac{1}{2} m_e c^2 \left( \frac{\alpha^2}{8} \right)^2$$

3. Construa agora a matriz Hamiltoniana na base dos estados  $2P$ , isto é, na base

$$|\psi_1\rangle = |3/2, +3/2\rangle = |1, +1\rangle_l |1/2, +1/2\rangle_s$$

$$|\psi_2\rangle = |3/2, -3/2\rangle = |1, -1\rangle_l |1/2, -1/2\rangle_s$$

$$|\psi_3\rangle = |3/2, +1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle_l |1/2, +1/2\rangle_s + \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 1\rangle_l |1/2, -1/2\rangle_s$$

$$|\psi_4\rangle = |1/2, +1/2\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} |1, 0\rangle_l |1/2, +1/2\rangle_s + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 1\rangle_l |1/2, -1/2\rangle_s$$

$$|\psi_5\rangle = |3/2, -1/2\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |1, -1\rangle_l |1/2, +1/2\rangle_s + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle_l |1/2, -1/2\rangle_s$$

$$|\psi_6\rangle = |1/2, -1/2\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}} |1, -1\rangle_l |1/2, +1/2\rangle_s + \sqrt{\frac{1}{3}} |1, 0\rangle_l |1/2, -1/2\rangle_s$$

e mostre que é dada por

$$H' = \begin{bmatrix} -\gamma + 2\beta & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\gamma - 2\beta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\gamma + \frac{2}{3}\beta & -\frac{\sqrt{2}}{3}\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3}\beta & -5\gamma + \frac{1}{3}\beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\gamma - \frac{2}{3}\beta & -\frac{\sqrt{2}}{3}\beta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3}\beta & -5\gamma - \frac{1}{3}\beta \end{bmatrix}$$

onde  $\beta = \mu_B B$ .

4. Encontre os valores próprios desta matriz
5. Faça um gráfico dos níveis exactos em função de  $\frac{\beta}{\gamma}$  comparando com os resultados da teoria de perturbações nos dois limites.

6. Na alínea 3) considerou-se só a base dos estados  $2P$ . No entanto os dois estados  $2S$  também são degenerados com os estados  $2P$  para o Hamiltoniano  $H_0$ , não perturbado. Mostre que o Hamiltoniano  $H'$  é diagonal para esses estados e portanto eles não se misturam com os seis estados  $2P$ , justificando o procedimento anterior.

**\* 12.8** *Adaptado de Griffiths 6.33*

Em muitos dos cálculos de teoria de perturbações no átomo de hidrogénio é necessário saber os valores médios de potencias de  $r$ , isto é,

$$\langle r^k \rangle_{nl} \equiv \int_0^\infty dr r^{2+k} R_{nl}^2(r)$$

Embora estes integrais se possam sempre fazer para cada  $k, n, l$ , ter expressões gerais é útil, mas mais difícil. Aqui pode ser útil o Teorema devido a Pauli, Problema 8.4 (também designado por Teorema de Feynman-Hellmann, pois foi independentemente descoberto por estes dois físicos, no caso de Feynman no seu trabalho final de licenciatura no MIT)

O Hamiltoniano para o problema radial é

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} - \frac{\alpha \hbar c}{r}$$

e os valores próprios da energia podem ser expressos como

$$E_n = -\frac{1}{2} \mu c^2 \alpha^2 \frac{1}{(n_r + l + 1)^2}$$

e o referido teorema escreve-se

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = \left\langle \frac{\partial H}{\partial \lambda} \right\rangle$$

onde  $\lambda$  é qualquer parâmetro de que o Hamiltoniano dependa.

a) Reveja o Problema 8.4 onde calculou  $\langle 1/r \rangle$ . Aqui deve escolher  $\lambda = \alpha$ .

b) Use  $\lambda = l$  para calcular  $\langle 1/r^2 \rangle$ .

**12.9** *Adaptado de Griffiths 6.34*

Prove a seguinte relação de recorrência entre os valores médios de potências de  $r$  no átomo de hidrogénio, conhecida por *relação de Kramers*:

$$\frac{k+1}{n^2} \langle r^k \rangle - (2k+1)a_0 \langle r^{k-1} \rangle + \frac{k}{4} [(2l+1)^2 - k^2] a_0^2 \langle r^{k-2} \rangle = 0$$

Para isso siga os passos seguintes:

1. Comece por mostrar que a equação radial se escreve, para  $u_{nl}(r) = rR_{nl}(r)$ , na forma seguinte (omitindo as dependências e os índices)

$$u'' = \left[ \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{a_0 r} + \frac{1}{n^2 a_0^2} \right] u \tag{1}$$

2. Verifique que

$$\langle r^k \rangle = \int_0^\infty dr r^{2+k} R_{nl}^2(r) = \int_0^\infty dr r^k u_{nl}^2(r) \equiv \int dr ur^k u$$

omitindo índices e limites por simplicidade.

3. Use a Eq. (1) para mostrar que

$$\int dr ur^k u'' = l(l+1) \langle r^{k-2} \rangle - \frac{2}{a_0} \langle r^{k-1} \rangle + \frac{1}{n^2 a_0^2} \langle r^k \rangle \quad (2)$$

4. Mostre agora que

$$\int dr ur^k u'' = - \int dr u' r^k u' - k \int dr ur^{k-1} u' \quad (3)$$

5. Mostre agora que

$$\int dr ur^k u' = -\frac{k}{2} \langle r^{k-1} \rangle \quad (4)$$

e que

$$\begin{aligned} \int dr u' r^k u' &= -\frac{2}{k+1} \int dr u'' r^{k+1} u' \\ &= -\frac{2}{k+1} l(l+1) \int dr ur^{k-1} u' + \frac{2}{k+1} \frac{2}{a_0} \int dr ur^k u' \\ &\quad - \frac{2}{k+1} \frac{1}{n^2 a_0^2} \int dr ur^{k+1} u' \end{aligned} \quad (5)$$

6. Introduzindo as Eq. (5) e Eq. (4) na Eq. (3) e igualando à Eq. (2) obtenha finalmente a relação de Kramers.

### 12.10 Adaptado de Griffiths 6.35

a) Escolhendo  $k = 0, 1, 2, 3$  obtenha fórmulas para  $\langle r^{-1} \rangle$ ,  $\langle r \rangle$ ,  $\langle r^2 \rangle$ ,  $\langle r^3 \rangle$ , notando que  $\langle r^0 \rangle = 1$ . Observe que pode continuar indefinidamente para qualquer potência positiva.

b) Verifique que no sentido das potências negativas há um impasse. De facto se escolher  $k = -1$ , só obtém uma relação entre  $\langle r^{-2} \rangle$  e  $\langle r^{-3} \rangle$

c) Mas se for possível encontrar  $\langle r^{-2} \rangle$  por qualquer outro meio (ver Problema 12.7) então é possível encontrar  $\langle r^{-3} \rangle$  e qualquer outra potência negativa.

d) Mostre que  $\langle r^{-k} \rangle$  só existe para  $l \geq k - 2$ . Em particular  $\langle r^{-3} \rangle$ , utilizado no cálculo da estrutura fina do hidrogénio só existe para  $l > 0$ .

**12.11** No estudo da estrutura fina do átomo de hidrogénio utilizou-se o resultado do acoplamento spin-órbita para  $j = l + 1/2$

$$E_{\text{SO}}^{(1)} = \frac{1}{4} m_e c^2 \alpha^4 \frac{2l}{n^3 l(l+1)(2l+1)}$$

dizendo que o resultado, indeterminado, para  $l = 0$  podia ser utilizado, simplificando  $l$  no numerador e denominador. Obtinha-se assim, para  $l = 0$

$$E_{\text{SO}}^{(1)} = \frac{1}{2} m_e c^2 \frac{\alpha^4}{n^3}$$

Este resultado parece um pouco estranho, pois como é que o acoplamento spin-órbita é diferente de zero para um momento angular orbital nulo? A explicação é que, por acidente, o resultado final está certo. De facto, quando se faz o limite não relativista da equação de Dirac, percebe-se que há mais um Hamiltoniano perturbado que deve ser tomado em linha de conta, o chamado termo de Darwin

$$H'_{\text{Darwin}} = \frac{\hbar^2}{8m_e^2 c^2} \nabla^2 V(r) = \frac{\pi \alpha \hbar^3}{2m_e^2 c} \delta^3(\vec{r})$$

Mostre que este termo só contribui para  $l = 0$  e dá exactamente

$$E_{\text{Darwin}}^{(1)} = \frac{1}{2} m_e c^2 \frac{\alpha^4}{n^3} \delta_{l0}$$

justificando o *acidente* acima mencionado. A origem do termo de Darwin só pode ser compreendida em mecânica quântica relativista. Deve-se a correcções ao potencial de Coulomb devido a flutuações quânticas a distâncias muito pequenas.