Exame de Qualificação - Mecânica Quântica
02/03/21
Nome: ______________________________
Semestre 2021.1
Limite de tempo: 4 horas e 30 minutos Professor Italo Nunes de Oliveira

---

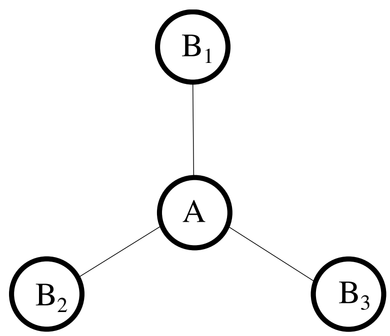
1) Considere o Hamiltoniano para uma partícula de momento angular orbital $\ell = 1$

$$H = \omega_1 \frac{L_x^2 - L_y^2}{\hbar} + \omega_0 L_z. \tag{1}$$

(a) Determine os autovalores e os autovetores de H. (b) Considere que o sistema está no estado $|\psi(t_0 = 0)\rangle = |1,0\rangle$. Qual a probabilidade de uma medida de L_z resultar em $-\hbar$? (c) Calcule $\Delta L_x^2 + \Delta L_y^2$ para um estado arbitrário $|\ell, m\rangle$. (d) Para um estado arbitrário $|\ell, m\rangle$, calcule $\frac{d\langle L_x\rangle}{dt}$ e $\frac{d\langle L_x\rangle}{dt}$.

---

2) Considere uma molécula com quatro átomos, como mostrado na figura.



Na ausência de interação entre primeiros vizinhos, o Hamiltoniano H_0 para um elétron é:

$$H_0 = E_A|\phi_A\rangle\langle\phi_A| + E_B|\phi_{B1}\rangle\langle\phi_{B1}| + E_B|\phi_{B2}\rangle\langle\phi_{B2}| + E_B|\phi_{B3}\rangle\langle\phi_{B3}| \tag{2}$$

A interação entre primeiros vizinhos pode ser vista como uma perturbação, sendo dada por:

$$W = a\left[|\phi_A\rangle\langle\phi_{B1}| + |\phi_A\rangle\langle\phi_{B2}| + |\phi_A\rangle\langle\phi_{B3}| + |\phi_{B1}\rangle\langle\phi_A| + |\phi_{B2}\rangle\langle\phi_A| + |\phi_{B3}\rangle\langle\phi_A|\right] \tag{3}$$

a) Para o estado não degenerado de H_0, calcule as correções da energia em primeira e segunda ordem.
b) Para os estados degenerados com energia E_B, mostre que a diagonalização da perturbação no subespaço de estados não remove a degenescência.
c) Vamos supor agora há uma interação de longo alcance, dada por

$$W_1 = t\left[|\phi_{B1}\rangle\langle\phi_{B2}| + |\phi_{B2}\rangle\langle\phi_{B1}| + |\phi_{B1}\rangle\langle\phi_{B3}| + |\phi_{B3}\rangle\langle\phi_{B1}| + |\phi_{B2}\rangle\langle\phi_{B3}| + |\phi_{B3}\rangle\langle\phi_{B2}|\right] \tag{4}$$

Mostre que a diagonalização de W_1 no subespaço de estados degenerados de H_0 remove parcialmente a degenerescência.

---

3) Considere um sistema de 2 níveis, $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$, acoplados por uma perturbação W. Vamos supor que, na ausência da pertubação, o estado $|\varphi_1\rangle$ é instável, com um tempo de vida τ_1. Suponha que as energias do

sistema não perturbado são:

$$\begin{aligned}\varepsilon_1 &= E_1 - i\hbar\gamma/2 \qquad (5)\\ \varepsilon_2 &= E_2, \qquad (6)\end{aligned}$$

onde $\gamma = 1/\tau_1$. Neste caso, o sistema possui um "Hamiltoniano" H_0 não Hermitiano. (a) Sabendo que $W|\varphi_2\rangle = W_{12}|\varphi_1\rangle$ e $W|\varphi_1\rangle = W_{12}^*|\varphi_2\rangle$, calcule as novas energias do sistema a partir da diagonalização direta de $H = H_0 + W$, com $|W_{12}| \ll (E_2 - E_1)$. Interprete o resultado obtido.
(b) Suponha que $E_2 = E_1$. Mostre que o "Hamiltoniano" H pode ser escrito como

$$H = \left(E_1 - i\frac{\hbar\gamma}{4}\right)\mathbf{I} + K, \qquad (7)$$

onde I é a identidade e o operador K é dado por

$$(K) = \begin{pmatrix} -i\frac{\hbar\gamma}{4} & W_{12} \\ W_{12}^* & i\frac{\hbar\gamma}{4} \end{pmatrix} \qquad (8)$$

c) Diagonalize a matriz de K e mostre que as energias do sistema são

$$\varepsilon_1' = E_1 - i\frac{\hbar\gamma}{4} + k_1 \qquad (9)$$

$$\varepsilon_2' = E_1 - i\frac{\hbar\gamma}{4} - k_1, \qquad (10)$$

com $k_1 = \sqrt{|W_{12}|^2 - (\hbar\gamma/4)^2}$.
d) Mostre que os autovetores não normalizados de H e K são dados por:

$$|\psi_1\rangle = W_{12}|\varphi_1\rangle + \left(k_1 + i\frac{\hbar\gamma}{4}\right)|\varphi_2\rangle \qquad (11)$$

$$|\psi_2\rangle = W_{12}|\varphi_1\rangle - \left(k_1 - i\frac{\hbar\gamma}{4}\right)|\varphi_2\rangle \qquad (12)$$

e) Supondo que, em $t = 0$, o estado do sistema é $|\Psi(0)\rangle = |\varphi_2\rangle$, calcule $|\Psi(t)\rangle$. Determine a probabilidade de $P_{12}(t) = |\langle\varphi_1|\Psi(t)\rangle|^2$. Analise os casos em que k_1 é puramente real ou puramente imaginário.

---

4) Um oscilador harmônico unidimensional é composto por uma partícula de massa m e carga q_0 que está sob a ação de um potencial $V(X) = m\omega^2X^2/2$. Considere que a partícula é submetida a um campo elétrico dependente do tempo $E(t)$, paralelo ao eixo Ox. Desta forma, um termo W_E deve ser adicionado ao potencial $V(X)$, dado por

$$W_E = -qE(t)X \qquad (13)$$

a) Escreva o Hamiltoniano do sistema em termos dos operadores a e $a^\dagger$. Calcule os comutadores de $[a, H(t)]$ e $\left[a^\dagger, H(t)\right]$.
b) Vamos definir $\alpha(t) = \langle\psi(t)|a|\psi(t)\rangle$, onde $|\psi(t)\rangle$ é o vetor de estado na partícula em $t > 0$. Use as relações de comutação do item anterior para mostrar que $\alpha(t)$ satisfaz a equação:

$$\frac{d\alpha(t)}{dt} = -i\omega\alpha(t) + i\lambda(t) \quad , \qquad (14)$$

onde

$$\lambda(t) = \frac{q_0}{\sqrt{2m\hbar\omega}} E(t) \quad . \tag{15}$$

c) Determine o valor médio da posição e do momento da partícula.
d) Vamos definir

$$|\phi(t)\rangle = [a - \alpha(t)]\,|\psi(t)\rangle \quad . \tag{16}$$

Mostre que $|\phi(t)\rangle$ satisfaz a equação:

$$i\hbar \frac{d|\phi(t)\rangle}{dt} = [H(t) + \hbar\omega]\,|\phi(t)\rangle \quad . \tag{17}$$