

Física Atómica e Molecular (2009-2010)

dúvidas	qualquer dia	9h00-18h00 (gab D43)
entregar	terça feira 27/10	(gab D43)
discussão	quarta feira 28/10	(sala D6)

7. Considere um átomo de hidrogénio colocado num campo eléctrico homogéneo ao longo do eixo dos zz , $e|\vec{E}|z$. Seja este sistema descrito pelo Hamiltoniano

$$H = H_0 + e|\vec{E}|z \quad ,$$

onde H_0 representa a dinâmica do sistema de electrão-protão não perturbado, dado por

$$H_0 = \frac{p^2}{2\mu_e} + V_{\text{Coulomb}}(r) \quad .$$

Os graus de liberdade de spin do electrão são desprezados neste exercício. O espectro dos níveis energéticos, designados por $E_{n\ell m}$, e as associadas funções de onda, $\psi_{n\ell m}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | n\ell m \rangle$, são considerados conhecidos.

- a Mostre que a perturbação $\Delta E_{n\ell m}$ do nível energético $E_{n\ell m}$, induzida por um campo eléctrico fraco, é dada por

$$\Delta E_{n\ell m} = e|\vec{E}| \langle n\ell m | z | n\ell m \rangle + e^2 |\vec{E}|^2 \sum_{n'\ell'm' \neq n\ell m} \frac{|\langle n\ell m | z | n'\ell'm' \rangle|^2}{E_{n\ell m} - E_{n'\ell'm'}} \quad .$$

- b Utilizando $[L_z, z] = 0$, mostre que $(m - m') \langle n\ell m | z | n'\ell'm' \rangle = 0$ e deduza a regra de selecção do número quântico magnético para transições devidas a um campo eléctrico fraco.
- c Mostre que $[L^2, [L^2, z]] = 2\hbar^2(L^2 z + z L^2)$, a seguir que

$$(\ell + \ell' + 2)(\ell + \ell')(\ell - \ell' + 1)(\ell - \ell' - 1) \langle n\ell m | z | n'\ell'm' \rangle = 0$$

e ainda que $\langle n00 | z | n'00 \rangle = 0$. Deduza a regra de selecção do número quântico do momento angular orbital, $\ell \rightarrow \ell'$, para transições devidas a um campo eléctrico fraco.

- d Utilizando as regras de selecção obtidas, mostre que

$$\sum_{n>1} |\langle 100 | z | n10 \rangle|^2 = \sum_{n'\ell'm'} \langle 100 | z | n'\ell'm' \rangle \langle n'\ell'm' | z | 100 \rangle \quad .$$

Utilizando ainda a propriedade de complitude das funções de onda de hidrogénio, dada por $\mathbf{1} = \sum_{n'\ell'm'} |n'\ell'm' \rangle \langle n'\ell'm'|$, mostre que

$$\sum_{n>1} |\langle 100 | z | n10 \rangle|^2 = \langle 100 | z^2 | 100 \rangle \quad .$$

8. O modelo de hidrogénio de Bohr, H_0 , tem vários estados $|n, \ell, m\rangle$ com o mesmo valor próprio E_n (degenerescência). Portanto, para o modelo de hidrogénio de Bohr, a expressão

$$\sum_{n'\ell'm' \neq n\ell m} \frac{|\langle n\ell m | z | n'\ell'm' \rangle|^2}{E_{n\ell m} - E_{n'\ell'm'}}$$

contém singularidades quando $E_{n\ell m} = E_{n'\ell'm'}$ (o somatório apenas exclui os casos para os quais o conjunto $n'\ell'm'$ é igual ao conjunto $n\ell m$).

No entanto, dentro de um espaço de estados degenerados (energia E_n), é sempre possível escolher uma base ortonormal assim que

$$\langle n, X | z | n, X' \rangle = \lambda(n, X) \delta_{X, X'} \quad ,$$

com $\lambda(n\ell m)$ uma constante e onde X e X' representam novos números quânticos.

- a Mostre que dos quatro estados do nível $n = 2$ apenas os dois elementos de matriz $\langle 2, 0, 0 | z | 2, 1, 0 \rangle$ e $\langle 2, 1, 0 | z | 2, 0, 0 \rangle$ são diferentes de zero e igual a $3a_0$ (a_0 : raio de Bohr).
- b Determine quatro novos estados, combinações lineares dos quatro estados $|2, \ell, m\rangle$, que sejam estados próprios do operador z .
- c Determine ΔE da perturbação $e |\vec{E}| z$ para os quatro novos estados, até à primeira ordem.

9. Considere uma perturbação da forma

$$H_I = V e^{i\omega t} + V^\dagger e^{-i\omega t}$$

e as definições

$$\omega_{ni} = \frac{E_n - E_i}{\hbar} \quad , \quad V_{ni} = \langle n | V | i \rangle \quad \text{e} \quad V_{ni}^\dagger = \langle n | V^\dagger | i \rangle = \langle i | V | n \rangle^* .$$

Para um sistema inicialmente num estado próprio $|i\rangle$ do Hamiltoniano não-perturbado H_0 , mostre que

$$c_{ni}^{(1)}(t) = \frac{1}{\hbar} \left\{ \frac{1 - e^{i(\omega_{ni} + \omega)t}}{\omega_{ni} + \omega} V_{ni} + \frac{1 - e^{i(\omega_{ni} - \omega)t}}{\omega_{ni} - \omega} V_{ni}^\dagger \right\} .$$