Universidade Federal do Paraná
Setor de Ciências Exatas
Departamento de Física
CF373: Mecânica Quântica II

Terceira Lista de Exercícios
Teoria estacionária de perturbações

1. Uma partícula de massa m encontra-se confinada num poço infinito de potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } 0 < x < a \\ \infty & \text{se } |x| \geq a \end{cases}$$

(a) Determine os autovalores de energia e as autofunções normalizadas correspondentes; (b) Considere uma perturbação

$$W(x) = \alpha\delta\left(x - \frac{a}{2}\right)$$

Determine a correção de primeira ordem na energia de todos os autoestados. (c) Ache a correção de segunda ordem.

2. Considere um sistema quântico com apenas dois autoestados de energia: $|\varphi_1\rangle$ e $|\varphi_2\rangle$, correspondendo aos autovalores E_1^0 e E_2^0, respectivamente. É dada uma perturbação $W = \lambda\hat{W}$, onde

$$\hat{W} = \Delta|\varphi_1\rangle\langle\varphi_2| + \Delta|\varphi_2\rangle\langle\varphi_1|$$

(a) Resolva exatamente o problema, isto é, determine os autovalores e autokets do hamiltoniano perturbado $H = H_0 + W$; (b) Use a teoria de perturbação para calcular a correção em primeira ordem na energia dos estados, supondo que $\lambda \ll 1$; (c) Compare os resultados dos ítens (a) e (b).

3. (a) Use a função tentativa $\psi_\alpha(x) = Ae^{-\alpha x^2}$ para estimar, pelo método variacional, a energia do estado fundamental de uma partícula de massa m sujeita ao potencial $V(x) = -V_0\delta(x)$. (b) Compare com o resultado exato (obtido pela solução da equação de Schrödinger).

4. Use o método variacional para determinar a energia do nível 1s do átomo de Hidrogênio, empregando a função tentativa $\psi_\alpha(r) = Ae^{-\alpha r}$.

5. No decaimento beta, um nêutron é transformado num próton pela emissão de um elétron, de forma que o número atômico do núcleo aumenta em uma unidade. Use a teoria de perturbação para estimar a correção em primeira ordem à energia dos níveis 1s, 2s e 2p de um átomo Hidrogenóide quando este sofre um decaimento beta.

6. Estime (pelo método variacional) a energia do estado fundamental do poço quadrado infinito, usando a seguinte função tentativa

$$\psi(x) = \begin{cases} Ax & \text{se } 0 \leq x \leq a/2 \\ A(a-x) & \text{se } a/2 \leq x \leq a \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases}$$

7. Considere um poço cúbico infinito tridimensional:

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0 & \text{se } 0 < x < a, 0 < y < a, 0 < z < a \\ \infty & \text{caso contrário} \end{cases}$$

(a) Obtenha as autofunções e autovalores de energia para o estado fundamental e o primeiro estado excitado; (b) Introduzindo a perturbação

$$W(x,y,z) = \begin{cases} V_0 & \text{se } 0 < x < a/2, 0 < y < a/2, \\ \infty & \text{caso contrário} \end{cases}$$

obtenha as correções de primeira ordem para a energia do estado fundamental (não-degenerado) e do primeiro estado excitado (triplamente degenerado). No segundo caso, obtenha os kets de estado correspondentes (em ordem zero).

8. Considere um sistema quântico com somente três estados linearmente independentes: $|\varphi_1\rangle$, $|\varphi_2\rangle$, $|\varphi_3\rangle$. Suponha que o Hamiltoniano seja representado, na base destes três autovetores, pela matriz

$$H = V_0 \begin{pmatrix} 1-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \lambda \\ 0 & \lambda & 2 \end{pmatrix}, \qquad (\lambda \ll 1).$$

(a) Obtenha os autovalores e autokets de energia do sistema não-perturbado; (b) Obtenha os autovalores exatos do sistema perturbado, e expanda cada um deles em série de potências até segunda ordem em λ; (c) Use a teoria de perturbação de primeira e segunda ordens para encontrar os autovalores aproximados para o estado que surge a partir dos estados não-degenerados do hamiltoniano não-perturbado. Compare seu resultado com o ítem (a); (d) Use a teoria de perturbação degenerada para calcular a correção de primeira ordem para os dois autovalores inicialmente degenerados. Compare com os resultados exatos.

9. Considere o poço cúbico infinito do problema 7. Substitua a perturbação pela seguinte função

$$W = a^3 V_0 \delta\left(x - \frac{a}{2}\right) \delta\left(y - \frac{a}{2}\right) \delta\left(z - \frac{3a}{4}\right).$$

Calcule as correções de primeira ordem para a energia do estado fundamental e dos primeiros estados excitados (triplamente degenerados).

Respostas e sugestões

1. (a) $E_n^0 = \pi^2\hbar^2 n^2/8ma^2$, com $n = 1, 2, \ldots$.

$$\varphi_n(x) = \langle x|\varphi_n\rangle = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

(b)

$$\varepsilon_1 = \begin{cases} 0 & \text{se } n \text{ é par} \\ \frac{2\alpha}{a} & \text{se } n \text{ é ímpar} \end{cases}$$

(c)

$$\varepsilon_2 = \begin{cases} 0 & \text{se } n \text{ é par} \\ -2m\left(\frac{\alpha}{\pi\hbar n}\right)^2 & \text{se } n \text{ é ímpar} \end{cases}$$

2. (a)

$$E_{1,2} = \frac{E_1^0 + E_2^0}{2} \pm \sqrt{\frac{\left(E_1^0 - E_2^0\right)^2}{4} + \lambda^2\Delta^2}, \qquad |\psi_1\rangle = |\varphi_1\rangle - \left(\frac{E_1^0 - E_1}{\lambda\Delta}\right)|\varphi_2\rangle,$$

3.

$$\langle H\rangle = -\frac{mV_0^2}{\pi\hbar^2}, \qquad E = -\frac{mV_0^2}{2\hbar^2},$$

4.

$$\langle H\rangle = E_1 = -\frac{e^2}{2a_0},$$

5.

$$\varepsilon_{1s} = -\frac{Ze^2}{a_0}, \qquad \varepsilon_{2s} = \varepsilon_{2p} = -\frac{Ze^2}{4a_0},$$

6. $6\hbar^2/ma^2$. Dica: a derivada da função degrau de Heaviside é uma função delta de Dirac.

7. (a)

$$\varphi_0 = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{\pi y}{a}\sin\frac{\pi z}{a}, \qquad E_0^0 = 3\pi^2\hbar^2/ma^2.$$

(b) $\varepsilon_1 = V_0/4$ para o estado fundamental. Para o primeiro estado excitado

$$\varphi_1^{(1)} = \left(\frac{2}{a}\right)^{3/2} \sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{\pi y}{a}\sin\frac{2\pi z}{a}, \qquad E_1^0 = 3\pi^2\hbar^2/ma^2 + \frac{V_0}{4},$$

$$\varphi_1^{(2,3)} = \frac{2}{a^{3/2}}\left(\sin\frac{\pi x}{a}\sin\frac{2\pi y}{a} \pm \sin\frac{2\pi x}{a}\sin\frac{\pi y}{a}\right)\sin\frac{\pi z}{a}, \qquad E_1^{2,3} = 3\pi^2\hbar^2/ma^2 + \frac{V_0}{4}(1\pm\kappa),$$

8. (a)

$$E_1^0 = V_0, |\varphi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad E_2^0 = V_0, |\varphi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad E_3^0 = V_0, |\varphi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

(b)

$$\varepsilon_1 = V_0(1-\lambda), \quad \varepsilon_2 = V_0(1-\lambda^2), \quad \varepsilon_3 = V_0(2+\lambda^2),$$

(c) $E_3 = V_0(2+\lambda^2)$

(d) $E_1 = V_0$, $E_2 = V_0(1-\lambda)$.

9.

$$\varepsilon_0 = 2V_0; \qquad \varepsilon_1^1 = \varepsilon_1^2 = 0, \varepsilon_1^3 = 2V_0$$