MECÂNICA QUÂNTICA I – OSCILADOR HARMÔNICO, PARTÍCULA NA CAIXA E TEORIA DE PERTURBAÇÕES INDEPENDENTES DO TEMPO

Sandro Dias Pinto Vitenti

Departamento de Física – CCE – UEL

---

1. Considere a Hamiltoniana de um oscilador harmônico unidimensional:

$$\hat{\mathrm{H}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2,$$

Definindo $\hat{\boldsymbol{v}} \equiv \begin{pmatrix}\hat{x}\\ \hat{p}\end{pmatrix}$ e estendendo o produto interno para operadores,

$$(\hat{\boldsymbol{v}}_{c1}, \boldsymbol{v}_{c2}) \equiv \frac{1}{i\hbar}\mathrm{W}(\hat{\boldsymbol{v}}_{c1}^{\dagger}, \boldsymbol{v}_{c2}),$$

onde $\hat{\boldsymbol{v}}_{c1}$ é um operador par de operadores e $\hat{\boldsymbol{v}}_{c2}$ é uma solução complexa. Mostre que:

(a) Dado o operador

$$\hat{a} \equiv (\hat{\boldsymbol{v}}, \boldsymbol{v}_c) = \frac{\hat{x}p_c - \hat{p}x_c}{i\hbar}.$$

Mostre que seu adjunto é dado por

$$\hat{a}^{\dagger} = -\frac{\mathrm{W}(\hat{\boldsymbol{v}}, \boldsymbol{v}_c^*)}{i\hbar} = -\frac{\hat{x}p_c^* - \hat{p}x_c^*}{i\hbar}.$$

Mostre também que o comutador entre $\hat{a}$ e $\hat{a}^{\dagger}$ é dado por

$$[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}] = (\boldsymbol{v}_c, \boldsymbol{v}_c) = \frac{2m\omega}{\hbar}\left(\mathrm{A}^*\mathrm{A} - \mathrm{B}^*\mathrm{B}\right).$$

Para impor a comutação canônica, escolhemos $(\boldsymbol{v}_c, \boldsymbol{v}_c) = 1$.

(b) Mostre que o operador $\hat{\mathrm{N}} \equiv \hat{a}^{\dagger}\hat{a}$ é auto-adjunto e que seu espectro é não negativo.

(c) Dado um autoestado de $\hat{\mathrm{N}}$, denotado por $|n\rangle$, demonstre que o operador de aniquilação $\hat{a}$ satisfaz a relação:

$$\hat{a}\,|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle.$$

Discuta também a convenção de fase adotada. Em seguida, mostre que o operador de criação $\hat{a}^\dagger$ age da seguinte forma sobre o estado $|n\rangle$:

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1}\, |n+1\rangle .$$

Por fim, verifique que o número de ocupação $\hat{\mathrm{N}}$ atua sobre o estado $|n\rangle$ da seguinte maneira:

$$\hat{\mathrm{N}} |n\rangle = n\, |n\rangle ,$$

onde n é um número inteiro não negativo.

2. Considere a Hamiltoniana de uma partícula em uma caixa unidimensional:

$$\mathrm{H} = \frac{p^2}{2m} + \mathrm{V}(x),$$

onde $\mathrm{V}(x) = 0$ para $|x| < \mathrm{L}/2$ e $\mathrm{V}(x) = \mathrm{V}_0$ para $|x| \geq \mathrm{L}/2$.

   (a) Considere as três regiões do espaço:

   I $x \leq -\mathrm{L}/2$,

   II $-\mathrm{L}/2 < x < \mathrm{L}/2$,

   III $x \geq \mathrm{L}/2$.

   Encontre as soluções da equação de Schrödinger independente do tempo em cada região.

   (b) No limite $\mathrm{V}_0 \to \infty$, quais são os valores permitidos de E? Mostre que a energia é quantizada.

3. Considere um sistema cuja Hamiltoniana é dada por

$$\hat{\mathrm{H}} = \hat{\mathrm{H}}^0 + \hat{\mathrm{H}}^1,$$

onde $\hat{\mathrm{H}}^0$ é a Hamiltoniana de um sistema cujas soluções são conhecidas, $\hat{\mathrm{H}}^1$ é uma perturbação fraca. Suponhamos que os autoestados de $\hat{\mathrm{H}}^0$ sejam não degenerados, isto é:

$$\hat{\mathrm{H}}^0 |n^0\rangle = \mathrm{E}_n^0 |n^0\rangle , \quad \mathrm{E}_n^0 \neq \mathrm{E}_m^0 \iff n \neq m.$$

Os autoestados de $\hat{\mathrm{H}}$ e as energias do sistema perturbado, i.e., $\hat{\mathrm{H}} |n\rangle = \mathrm{E}_n |n\rangle$ podem ser escritos na forma $|n\rangle = |n^0\rangle + |n^1\rangle + \dots$ e $\mathrm{E}_n = \mathrm{E}_n^0 + \mathrm{E}_n^1 + \dots$. Faça as seguintes questões:

   (a) Mostre que a correção de primeira ordem na energia é dada por

$$\mathrm{E}_n^1 = \langle n^0 | \hat{\mathrm{H}}^1 | n^0 \rangle .$$

   (b) Mostre que a correção de primeira ordem na função de onda é dada por

$$|n^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^0 | \hat{\mathrm{H}}^1 | n^0 \rangle}{\mathrm{E}_n^0 - \mathrm{E}_m^0} |m^0\rangle .$$

   onde a uma escolha de fase foi feita.