

FI-002 Mecânica Quântica II  
Lista # 3  
Teoria de Perturbações e Métodos Variacionais

**Prof. G. Cabrera**  
cabrera@ifi.unicamp.br

**Data de entrega:** 24 de junho de 2020  
Entregar apenas os exercícios destacados com \*

**1. Oscilador Harmônico unidimensional**

Use a Teoria de Perturbações (R-S) para calcular as correções da energia em primeira e segunda ordem para potenciais perturbativos do tipo

$$V = \lambda x, \quad V = \lambda x^2, \quad V = \lambda x^3 .$$

Lembre que os dois primeiros casos são resolúveis de maneira exata e compare com o resultado perturbativo. ■

**2. Estrutura Fina de Átomos Hidrogenoides**

Átomos hidrogenoides são aqueles que têm um elétron de valência fora de camadas completamente cheias, com número atômico não muito grande. Exemplos:  $Na$ ,  $K$ ,...

O elétron externo movimenta-se em um potencial eletrostático  $V_C(x, y, z)$  que não é mais da forma pura de Coulomb, pois além da contribuição do núcleo, temos a contribuição das nuvens de carga negativas dos elétrons internos. Neste caso, a degenerescência característica do átomo de hidrogênio é removida, e a energia dos estados ligados do elétron dependem do número quântico  $l$  do momentum angular orbital. A estrutura *grossa* dos níveis é determinada pelo potencial central  $V_C(x, y, z)$ . Neste problema, queremos estudar um efeito relativístico que determina a chamada *Estrutura Fina* do espectro. Este último efeito pode ser visualizado como sendo consequência do acoplamento do spin do elétron com seu momento orbital, na forma

$$\vec{S} \cdot \vec{L} .$$

Aplice a Teoria de Perturbações para o cálculo da *Estrutura Fina*, considerando como Hamiltoniano não perturbado

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V_C(\vec{r}) , \tag{1}$$

e um termo de perturbação da forma

$$\mathcal{H}_1 = \frac{1}{2m^2c^2r} \left[ \frac{dV_C}{dr}(r) \right] (\vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{\mathbf{L}}) . \quad (2)$$

(a) Para o Hamiltoniano não perturbado  $\mathcal{H}_0$  temos duas escolhas possíveis para os kets da base, como sendo auto-kets dos observáveis:

$$\text{I : } \quad \left( \vec{\mathbf{L}}^2, \mathbf{L}_z, \vec{\mathbf{S}}^2, \mathbf{S}_z \right) ,$$

$$\text{II : } \quad \left( \vec{\mathbf{L}}^2, \vec{\mathbf{S}}^2, \vec{\mathbf{J}}^2, \mathbf{J}_z \right)$$

onde  $\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{L}} + \vec{\mathbf{S}}$  é o momentum angular total. Diga qual das escolhas é mais vantajosa para o tratamento da perturbação. Explique!

(b) Calcule os deslocamentos em primeira ordem para a energia e as funções de onda em ordem zero para a Teoria de Perturbações R-S. Escreva seus resultados em termos da parte radial da função de onda (que não é **conhecida**).

**Dica.** Para adicionar momenta use a tabela anexa de coeficientes de Clebsh-Gordan:

$\langle j_1, 1/2, m_1 m_2   JM \rangle$	$m_z = 1/2$	$m_z = -1/2$
$j = j_1 + 1/2$	$\sqrt{\frac{j_1 + M + 1/2}{2j_1 + 1}}$	$\sqrt{\frac{j_1 - M + 1/2}{2j_1 + 1}}$
$j = j_1 - 1/2$	$-\sqrt{\frac{j_1 - M + 1/2}{2j_1 + 1}}$	$\sqrt{\frac{j_1 + M + 1/2}{2j_1 + 1}}$

■

### 3. Efeito Zeeman

No sistema do problema anterior, considere a aplicação de um campo magnético uniforme (na direção  $z$ ), que pode ser tratado como uma pequena perturbação

$$\mathcal{H}_B = \frac{|e|\hbar B}{2mc} (\mathbf{L}_z + 2\mathbf{S}_z) ,$$

onde  $e$  é a carga do elétron e  $B$  a intensidade do campo magnético. Note a presença do fator 2 na frente do operador de spin, é o fator  $g = 2$  do elétron. Calcule o deslocamento dos níveis de energia do Hamiltoniano  $\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$ , em 1a. ordem de teoria de perturbações R-S. O resultado obtido é chamado fórmula de Landé (em honor a Alfred Landé). ■

### 4. Brillouin-Wigner para o oscilador harmônico

Faça teoria de perturbações de B-W para um caso que é resolúvel exatamente, com Hamiltoniano não-perturbado

$$\mathcal{H}_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 ,$$

e perturbação

$$V = \frac{1}{2}m\omega^2\varepsilon x^2,$$

onde  $\varepsilon \ll 1$ . Considere o caso do nível com  $n = 2$  e calcule até segunda ordem.

- (a) De que grau será a equação para as energias perturbadas? Tente generalizar;
- (b) Como deve ser escolhida a solução? ■

### 5. Caso degenerado

Desenvolva a Teoria de Perturbações de Rayleigh-Schrödinger no caso degenerado até segunda ordem. Assuma que todos os elementos de matriz da perturbação entre estados do nível degenerado são nulos, isto é

$$\langle n_\alpha^{(0)} | V | n_\beta^{(0)} \rangle = 0,$$

para  $\alpha, \beta = 1, 2, \dots, d_n$ . Assim a degenerescência não é removida em primeira ordem. ■

### 6. Efeito Stark para o átomo de hidrogênio [E. Schrödinger, *Quantisierung als Eigenwertproblem*, Annalen der Physik, vol. 385 Issue 13, 437–490 (1926)]

Estudamos o efeito da aplicação de um campo elétrico uniforme sobre os níveis do átomo. Escolhendo a coordenada  $z$  ao longo da direção do campo, o potencial perturbativo fica como

$$V = |e| zE,$$

onde  $e$  é a carga do elétron e  $E$  a intensidade do campo aplicado. Sem considerar spin, os níveis de energia do átomo de hidrogênio são descritos pelos números quânticos  $(n, l, m)$ , onde  $n$  é chamado de número quântico principal ( $n = 1, 2, \dots, \infty$ ) e  $(l, m)$  são os números usuais do momentum angular. Os níveis de energia só dependem de  $n$  e são degenerados em  $(l, m)$ , com  $l = 0, 1, \dots, (n - 1)$  e  $-l \leq m \leq l$ . A degenerescência total dos estados  $|nlm\rangle$ , para um dado  $n$ , é  $n^2$ .

- (a) Mostre que o estado fundamental,  $n = 1$ , não tem correção de Stark de 1ª ordem.
- (b) Considere então o primeiro estado excitado com  $n = 2$ . As autofunções do átomo de hidrogênio podem ser escritas em coordenadas polares, na forma

$$\langle r\theta\varphi | nlm \rangle = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta, \varphi),$$

onde  $R_{nl}$  é a parte radial e  $Y_l^m$  é um harmônico esférico. Usando teoria de perturbações de Rayleigh-Schrödinger degenerada, encontre a correção dos níveis de energia em 1ª ordem (efeito Stark linear). Facilite seu trabalho usando argumentos de simetria.

- (c) Se toda a degenerência não for levantada, explique a origem da nova degenerência.
- (d) Encontre as funções de onda que diagonalizam a perturbação.
- (e) Que acontece quando incluímos o spin do elétron? ■

## 7. Teoria de Perturbações degenerada

Consideremos um nível  $p$  de um átomo hidrogenoide (a definição de *átomo hidrogenoide* é dada no problema # 2). Este nível, sem considerar o spin, é três vezes degenerado, sendo que a parte orbital das funções de onda é dada por

$$Y_0^1(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta ,$$

$$Y_1^1(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin \theta ,$$

$$Y_{-1}^1(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\varphi} \sin \theta .$$

O átomo é sometido a diversos potenciais de diferentes simetrias. Diga, em primeira ordem, como se separam os estados correspondentes para:

- (a) Potencial de simetria cúbica

$$V_c(x, y, z) = A(r)(x^2y^2 + z^2x^2 + z^2y^2) ;$$

- (b) Potencial de simetria tetragonal

$$V_t(x, y, z) = A(r)(x^2y^2) + B(r)(z^2x^2 + z^2y^2) ;$$

- (c) Potencial de simetria ortorrômbica

$$V_o(x, y, z) = A(r)(x^2y^2) + B(r)(z^2x^2) + C(r)(z^2y^2) .$$

Discuta o resultado em termos da simetria.

## 8. Método Variacional

Nos métodos variacionais, uma função de onde de prova é testada, minimizando a energia do sistema. Temos usado o método na aproximação de Hartree-Fock para férmions e na determinação do perfil do condensado de Bose para bósons interagentes. Aqui tratamos o caso de uma partícula num particular potencial. Seja um exemplo unidimensional com o potencial de paredes infinitas abaixo:

$$V(x) = \begin{cases} 0 , & \text{para } |x| < a ; \\ \infty , & \text{para } |x| > a . \end{cases}$$

Queremos aproximar a função de onda no intervalo  $x \in [-a, a]$ , sendo esta sempre nula fora do intervalo. A forma polinomial mais simples  $(a^2 - x^2)$  fornece uma boa aproximação da energia (ver Sakurai, *MQM*, Cap. 5). Este caso tem o inconveniente de não possuir nenhum parâmetro variacional. Tentamos uma outra aproximação

$$\psi(x) = \begin{cases} (a^2 - x^2)(a^2 - \alpha x^2) , & \text{para } |x| < a ; \\ 0 , & \text{para } |x| > a . \end{cases}$$

onde  $\alpha$  é um parâmetro real.

- (a) Determine  $\alpha$  variacionalmente. Mostre que ele satisfaz uma equação de segundo grau, com duas soluções;
- (b) mostre que uma das soluções fornece um valor da energia mais preciso que a função de prova  $(a^2 - x^2)$ . A outra solução aproxima que valor próprio? Podíamos prever esse fato? Afira a precisão do valor obtido;
- (c) explique porque o polinômio mais simples que permite aproximar o primeiro estado excitado é  $x(a^2 - x^2)$ . Qual é a energia obtida com este estado e qual a precisão? ■

## 9. Equações de Hartree-Fock

Na elaboração da aproximação de Hartree-Fock, usando o estado teste de Hartree-Fock, temos construído a Ação  $S$  que deverá ser minimizada para variações dos orbitais-teste:

$$\begin{aligned} \varphi_{\mathbf{k}\sigma} &\rightarrow \varphi_{\mathbf{k}\sigma} + \delta\varphi_{\mathbf{k}\sigma} , \\ \varphi_{\mathbf{k}\sigma}^* &\rightarrow \varphi_{\mathbf{k}\sigma}^* + \delta\varphi_{\mathbf{k}\sigma}^* , \end{aligned} \tag{3}$$

onde  $\varphi_{\mathbf{k}\sigma}$  e  $\varphi_{\mathbf{k}\sigma}^*$  são considerados como independente. A Ação  $S$  se escreve como uma integral de uma densidade Lagrangiana  $\mathcal{L}$ , na forma:

$$S = \int d^3x \mathcal{L}(\varphi_{\mathbf{k}\sigma}, \varphi_{\mathbf{k}\sigma}^*, \nabla\varphi_{\mathbf{k}\sigma}, \nabla\varphi_{\mathbf{k}\sigma}^*) \tag{4}$$

onde  $\mathcal{L}$  é dado pela soma dos seguintes termos:

- (a) um termo de uma partícula, que inclui um potencial externo  $U(\mathbf{x})$

$$\sum_{\mathbf{k}, \sigma} n_{\mathbf{k}\sigma} \left[ \frac{\hbar^2}{2m} \nabla\varphi_{\mathbf{k}\sigma}^* \cdot \nabla\varphi_{\mathbf{k}\sigma} + U(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}\sigma}^* \varphi_{\mathbf{k}\sigma} \right] ;$$

- (b) um **termo direto** de duas partículas que interagem por Coulomb, com contribuição de dois spins  $(\sigma, \sigma')$ :

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} n_{\mathbf{k}\sigma} n_{\mathbf{k}'\sigma'} \varphi_{\mathbf{k}\sigma}^*(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{x}) \int d^3x' \frac{e^2 \varphi_{\mathbf{k}'\sigma'}^*(\mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}'\sigma'}(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} ;$$

(c) um **termo de troca** de duas partículas, com contribuição de um spin só:

$$- \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\sigma} n_{\mathbf{k}\sigma} n_{\mathbf{k}'\sigma} \varphi_{\mathbf{k}\sigma}^*(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}'\sigma}(\mathbf{x}) \int d^3x' \frac{e^2 \varphi_{\mathbf{k}'\sigma}^*(\mathbf{x}') \varphi_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{x}')}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|};$$

(d) adicionamos um termo com multiplicadores de Lagrange, que levam em conta as condições de ortonormalidade dos orbitais

$$\sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\sigma, \sigma'} \lambda_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \varphi_{\mathbf{k}\sigma}^*(\mathbf{x}) \varphi_{\mathbf{k}'\sigma'}(\mathbf{x}).$$

Em todas partes, os  $n_{\mathbf{k}\sigma}$  são os números de ocupação do estado de Hartree-Fock. Calcule a variação de  $S$  induzida pelas variações das funções-teste (3), para a ação  $S$  estacionária, isto é para  $\delta S = 0$ . Obtenha assim as equações de Hartree-Fock de maneira direta, sem usar as equações de Lagrange. ■

## 10. Aproximação de Hartree-Fock (HF) para um gás de elétrons

A aproximação mais simples de um metal consiste em negligenciar o potencial periódico da rede, ou considerar ele constante, e supor que os elétrons de condução se comportam como um gás de elétrons livres no interior de uma caixa de volume  $V$ . O potencial positivo dos íons é aproximado como sendo um fundo de carga positiva, de maneira que o sistema completo (íons mais elétrons) é neutro. Este modelo é chamado de *jellium*. As funções de onda são ondas planas normalizadas no volume da caixa (assumindo condições periódicas de contorno) e o sistema tem simetria de translação. Escolhemos como números quânticos o vetor de onda  $\vec{\mathbf{k}}$  da onda plana e o spin  $\sigma$  do elétron.

- Mostre que as equações de Hartree-Fock são satisfeitas por estas funções e encontre a energia total de HF, no caso em que temos diferentes números de partículas para os dois estados de spin,  $N_{\uparrow}$  e  $N_{\downarrow}$ , com  $N = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$ . Isto significa que a Superfície de Fermi é composta de duas esferas, uma para cada spin, de raios diferentes  $k_{F\uparrow}$  e  $k_{F\downarrow}$ .
- Argumente no sentido de mostrar que o ‘termo direto’ da interação eletrônica se cancela com o efeito do potencial constante do fundo positivo e que, além do termo de partícula livre, só temos a contribuição do termo de troca.
- Mostre que a aproximação de HF prediz uma densidade de estado **nula** no nível de Fermi e comente. ■

## 11. \* A Teoria BCS da Supercondutividade

Ref: J. Bardeen, L. N. Cooper e J. R. Schrieffer (BCS), *Phys. Rev.* **108**, 175 (1957)

O estado supercondutor é um efeito cooperativo que aparece como resultado das interações dos elétrons em um sólido. No modelo da supercondutividade convencional, as interações elétron-elétron são mediadas pelas vibrações da rede cristalina (*fônons*), mas o suposto básico da teoria é a formação de pares de elétrons por alguma interação fracamente **atractiva**. Estes pares constituem as unidades básicas do estado supercondutor e são chamados “*Pares de Cooper*” (por razões óbvias). O estado fundamental acopla em pares singletos, elétrons nos estados  $(\vec{k}, \uparrow)$  e  $(-\vec{k}, \downarrow)$ , onde  $\vec{k}$  é o número quântico do momentum do elétron, e  $(\uparrow, \downarrow)$  são os estados do spin. Por conveniência, definimos operadores de pares por:

**Definition 1**

$$\begin{aligned} b_k &\equiv c_{-\vec{k}\downarrow} c_{\vec{k}\uparrow} , \\ b_k^\dagger &\equiv c_{\vec{k}\uparrow}^\dagger c_{-\vec{k}\downarrow}^\dagger , \end{aligned} \quad (5)$$

A notação da definição (5) mostra que os  $b$ 's não dependem do spin (estado singlete), e os vetores  $\vec{k}$  e  $-\vec{k}$  são considerados equivalentes. Os  $(c, c^\dagger)$  são os operadores usuais para estados de um elétron.

- a) Encontre as relações de **comutação** entre os  $b$ 's e  $b^\dagger$ 's, e mostre que elas são aproximadamente do tipo *bósons*, se assumimos que no estado fundamental, todas as configurações de muitas partículas podem ser descritas em termos de ocupação de pares (isto é, se  $(\vec{k}, \uparrow)$  está ocupado (desocupado),  $(-\vec{k}, \downarrow)$  também está ocupado (desocupado));
- b) a Teoria BCS assume que o estado supercondutor é descrito por um Hamiltoniano *efetivo* onde apenas são incluídas as interações entre pares, da forma

$$\mathcal{H} = \sum_k 2\varepsilon_k b_k^\dagger b_k + \sum_{k \neq k'} V_{k',k} b_{k'}^\dagger b_k , \quad (6)$$

onde  $\varepsilon_k$  é a energia de um elétron. Por sua vez, o estado fundamental é procurado na forma (de acordo com a idéia inicial de ocupação de pares)

$$|\psi\rangle = \prod_k \left( u_k + v_k b_k^\dagger \right) |0\rangle , \quad (7)$$

onde  $(u_k, v_k)$  são coeficientes reais, e  $|0\rangle$  é o *vácuo* dos operadores fermiônicos  $(c, c^\dagger)$ . **O programa do paper BCS consiste em determinar os coeficientes  $(u_k, v_k)$  de maneira variacional para o Hamiltoniano (6)**, isto é, minimizando a energia associada com  $|\psi\rangle$ . Notemos que na produtória (7), os fatores podem ser escritos em qualquer ordem, já que eles comutam. Determine então os coeficientes  $(u_k, v_k)$ , requerendo que

$$F = \frac{\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

seja mínimo. Para isso, proceda com algum cuidado, pois o nosso problema é condicional. A primeira condição que devemos impor corresponde a fixar o número de partículas da teoria. Assim devemos ter

$$\frac{\langle \psi | \sum_k c_k^\dagger c_k | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = 2 \frac{\langle \psi | \sum_k b_k^\dagger b_k | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = N, \quad (8)$$

onde  $N$  é o número total de partículas. Esta condição introduz um multiplicador de Lagrange  $\mu$  no processo de minimização ( $\mu$  será identificado mais tarde com o potencial químico), de maneira que equivalentemente, teremos que minimizar o funcional:

$$W = F - \mu \left( 2 \frac{\langle \psi | \sum_k b_k^\dagger b_k | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} - N \right). \quad (9)$$

No seu cálculo, precisará de  $\langle \psi | \psi \rangle$ . No momento não imponha nenhuma condição sobre a normalização.

**Resultados:**

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \prod_k (u_k^2 + v_k^2) \\ W &= \sum_k 2(\varepsilon_k - \mu) \frac{v_k^2}{u_k^2 + v_k^2} + \\ &\quad + \sum_{k \neq k'} V_{k',k} \frac{u_{k'} u_k v_{k'} v_k}{(u_k^2 + v_k^2)(u_{k'}^2 + v_{k'}^2)} \end{aligned} \quad (10)$$

- c) a minimização de  $W$  acima é complicada pela presença dos denominadores. Uma maneira de simplificar o trabalho é a seguinte. Se impormos que

$$(u_k^2 + v_k^2) = 1, \quad (11)$$

para todo  $k$ , estas condições asseguram a normalização de  $|\psi\rangle$ . No novo processo de variação, devemos introduzir um novo multiplicador de Lagrange por cada condição de (11) e desconsiderar os denominadores em (10). Sejam  $\lambda_k$  estes multiplicadores. Minimizamos um novo funcional

$$\begin{aligned} W' &= \sum_k [2(\varepsilon_k - \mu)v_k^2 + \lambda_k (u_k^2 + v_k^2)] + \\ &\quad + \sum_{k \neq k'} V_{k',k} u_{k'} u_k v_{k'} v_k \end{aligned}$$

em relação às variáveis  $(u_k, v_k)$  e às condições (8) e (11). Este processo fornece no total quatro equações para as incógnitas  $(u_k, v_k)$  e  $(\mu, \lambda_k)$ . Na sua solução é conveniente usar as seguintes definições:



### Definition 2 Parâmetro do Gap de energia

$$\Delta_k \equiv - \sum_{k' \neq k} V_{k',k} u_{k'} v_{k'} \quad , \quad (12)$$

onde o sinal é escolhido notando que o potencial  $V_{k',k}$  é atrativo.

### Definition 3 Energia das quase-partículas

$$E_k \equiv (\varepsilon_k - \mu) + \lambda_k \quad . \quad (13)$$

- d) Encontre o ramo físico do espectro das quase-partículas, notando que  $v_k^2$  é proporcional à probabilidade de encontrar um elétron no estado  $k$ . Esperamos que esta probabilidade seja nula para altas energias. Mostre que  $v_k^2$  reproduz a distribuição de Fermi, no limite  $\Delta_k \rightarrow 0$ , a temperatura nula, identificando  $\mu$  com a energia de Fermi  $E_F$ . Faça um gráfico esboçando a forma de  $v_k^2$  para o caso geral com  $\Delta_k \neq 0$ . Mostre, que para energias perto do nível de Fermi, a relação de dispersão representa partículas relativísticas massivas, com a massa sendo proporcional ao gap supercondutor. Mostre também que a solução para o gap é dada na forma de uma equação integral. ■

## 12. Hartree-Fock para a Molécula Homopolar de dois elétrons

Considere o problema da molécula homopolar de dois centros (sítios) e dois elétrons da lista anterior (Problema #13 da Lista #2). Construa soluções aproximadas do problema no esquema de Hartree-Fock. Da solução **exata** obtida, sabemos que o estado fundamental é um singlete. Construa portanto, soluções variacionais na forma

$$|\Psi\rangle = \left( \cos \theta_1 C_{1\uparrow}^\dagger + e^{i\chi_1} \sin \theta_1 C_{2\uparrow}^\dagger \right) \left( \cos \theta_2 C_{1\downarrow}^\dagger + e^{i\chi_2} \sin \theta_2 C_{2\downarrow}^\dagger \right) |0\rangle \quad ,$$

onde  $(\theta_1, \theta_2, \chi_1, \chi_2)$  são parâmetros variacionais. Eles podem ser obtidos minimizando a energia total (Hamiltoniano do Problema #13 da Lista #2). Mostre que estas soluções variacionais coincidem com  $|MO\rangle$ , para valores do parâmetro  $\lambda$  no intervalo  $-2 \leq \lambda \leq 2$ . Mostre também, que assintoticamente, elas reproduzem os estados de Heitler-London, isto é os neutros para  $\lambda \rightarrow +\infty$  e os polares para  $\lambda \rightarrow -\infty$ . Veja que as soluções obtidas interpolam continuamente, em função do parâmetro  $\lambda$  entre os estados de Molecular Orbital e Heitler-London! Calcule a energia de Hartree-Fock e compare com o resultado exato. ■

## 13. Teoria de perturbações dependente do tempo

Considere um oscilador harmônico (OH) unidimensional de frequência  $\omega$  e com Hamiltoniano não perturbado dado por

$$\mathcal{H}_0 = \hbar\omega \left( a^\dagger a + 1/2 \right) \quad ,$$

onde  $a$  e  $a^\dagger$  são os operadores de destruição e criação do OH. No tempo  $t = 0$  ligamos uma perturbação (dependente do tempo), da forma

$$V(t) = \lambda [f(t)a + f^*(t)a^\dagger] ,$$

onde  $\lambda$  é uma constante real ‘pequena’ e  $f(t)$  é uma função com valores complexos que é não nula somente em um intervalo finito de tempo. Essa última hipótese garante, entre outras coisas, que existe sua transformada de Fourier

$$F(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt f(t) \exp(-i\omega t) .$$

- (a) Na Teoria de Perturbações dependente do tempo, operamos na *versão de Interação*. Encontre a dependência temporal dos operadores de criação e destruição na versão de Interação. Lembre que, em geral, operadores transformam como

$$A_I(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_0 t\right) A \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_0 t\right) ;$$

- (b) No tempo inicial  $t = 0$ , o OH é preparado no estado fundamental  $|0\rangle$ . Usando teoria de perturbações a primeira ordem, encontre a probabilidade de transição  $|0\rangle \rightarrow |n\rangle$ , para  $t > 0$ . Considere tempos suficientemente grandes, onde  $f(t)$  já é nula. Compare com o resultado exato e discuta. ■

#### 14. Problemas do livro do Sakurai.

Resolva os problemas do Cap. 5 do livro do Sakurai *MQM* (revised edition), em anexo. Note que alguns problemas têm superposição com os enunciados acima. ■

## PROBLEMS

1. A simple harmonic oscillator (in one dimension) is subjected to a perturbation

$$\lambda H_1 = bx$$

where  $b$  is a real constant.

- a. Calculate the energy shift of the ground state to *lowest nonvanishing order*.

- b. Solve this problem *exactly* and compare with your result obtained in (a).

[You may assume without proof

$$\langle u_{n'} | x | u_n \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left( \sqrt{n+1} \delta_{n', n+1} + \sqrt{n} \delta_{n', n-1} \right).$$

2. In nondegenerate time-independent perturbation theory, what is the probability of finding in a perturbed energy eigenstate ( $|k\rangle$ ) the corresponding unperturbed eigenstate ( $|k^{(0)}\rangle$ )? Solve this up to terms of order  $g^2$ .
3. Consider a particle in a two-dimensional potential

$$V_0 = \begin{cases} 0 & \text{for } 0 \leq x \leq L, 0 \leq y \leq L, \\ \infty & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Write the energy eigenfunctions for the ground and first excited states. We now add a time-independent perturbation of the form

$$V_1 = \begin{cases} \lambda xy & \text{for } 0 \leq x \leq L, 0 \leq y \leq L, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Obtain the zeroth-order energy eigenfunctions and the first-order energy shifts for the ground and first excited states.

4. Consider an isotropic harmonic oscillator in *two* dimensions. The Hamiltonian is given by

$$H_0 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2).$$

- a. What are the energies of the three lowest-lying states? Is there any degeneracy?
- b. We now apply a perturbation

$$V = \delta m \omega^2 xy,$$

where  $\delta$  is a dimensionless real number much smaller than unity. Find the zeroth-order energy eigenket and the corresponding energy to first order [that is, the unperturbed energy obtained in (a) plus the first-order energy shift] for each of the three lowest-lying states.

- c. Solve the  $H_0 + V$  problem *exactly*. Compare with the perturbation results obtained in (b).

[You may use  $\langle n' | x | n \rangle = \sqrt{\hbar/2m\omega} (\sqrt{n+1} \delta_{n', n+1} + \sqrt{n} \delta_{n', n-1})$ .]

5. Establish (5.1.54) for the one-dimensional harmonic oscillator given by (5.1.50) with an additional perturbation  $V = \frac{1}{2} \epsilon m \omega^2 x^2$ . Show that all other matrix elements  $V_{k0}$  vanish.
6. A slightly anisotropic three-dimensional harmonic oscillator has  $\omega_z \approx \omega_x = \omega_y$ . A charged particle moves in the field of this oscillator and is at the same time exposed to a uniform magnetic field in the  $x$ -direction. Assuming that the Zeeman splitting is comparable to the splitting produced by the anisotropy, but small compared to  $\hbar\omega$ , cal-

culate to first order the energies of the components of the first excited state. Discuss various limiting cases. (From Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 2/e, © 1970. Reprinted by permission of Ellis Horwood, Ltd.)

7. A one-electron atom whose ground state is nondegenerate is placed in a uniform electric field in the  $z$ -direction. Obtain an approximate expression for the induced electric dipole moment of the ground state by considering the expectation value of  $ez$  with respect to the perturbed state vector computed to first order. Show that the same expression can also be obtained from the energy shift  $\Delta = -\alpha|E|^2/2$  of the ground state computed to second order. (*Note:*  $\alpha$  stands for the polarizability.) Ignore spin.
8. Evaluate the matrix elements (or expectation values) given below. If any vanishes, explain why it vanishes using simple symmetry (or other) arguments.
- $\langle n = 2, l = 1, m = 0 | x | n = 2, l = 0, m = 0 \rangle$ .
  - $\langle n = 2, l = 1, m = 0 | p_z | n = 2, l = 0, m = 0 \rangle$ .  
[In (a) and (b),  $|nlm\rangle$  stands for the energy eigenket of a nonrelativistic hydrogen atom with spin ignored.]
  - $\langle L_z \rangle$  for an electron in a central field with  $j = \frac{9}{2}$ ,  $m = \frac{7}{2}$ ,  $l = 4$ .
  - $\langle \text{singlet}, m_s = 0 | S_z^{(e^-)} - S_z^{(e^+)} | \text{triplet}, m_s = 0 \rangle$  for an  $s$ -state positronium.
  - $\langle \mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)} \rangle$  for the ground state of a hydrogen *molecule*.
9. A  $p$ -orbital electron characterized by  $|n, l = 1, m = \pm 1, 0\rangle$  (ignore spin) is subjected to a potential

$$V = \lambda(x^2 - y^2) \quad (\lambda = \text{constant}).$$

- Obtain the “correct” zeroth-order energy eigenstates that diagonalize the perturbation. You need not evaluate the energy shifts in detail, but show that the original threefold degeneracy is now completely removed.
  - Because  $V$  is invariant under time reversal and because there is no longer any degeneracy, we expect each of the energy eigenstates obtained in (a) to go into itself (up to a phase factor or sign) under time reversal. Check this point explicitly.
10. Consider a spinless particle in a two-dimensional infinite square well:

$$V = \begin{cases} 0 & \text{for } 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq a, \\ \infty & \text{otherwise.} \end{cases}$$

- What are the energy eigenvalues for the three lowest states? Is there any degeneracy?
- We now add a potential

$$V_1 = \lambda xy, \quad 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq a.$$

Taking this as a weak perturbation, answer the following:

- (i) Is the energy shift due to the perturbation linear or quadratic in  $\lambda$  for each of the three states?
- (ii) Obtain expressions for the energy shifts of the three lowest states accurate to order  $\lambda$ . (You need not evaluate integrals that may appear.)
- (iii) Draw an energy diagram with and without the perturbation for the three energy states. Make sure to specify which unperturbed state is connected to which perturbed state.

11. The Hamiltonian matrix for a two-state system can be written as

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} E_1^0 & \lambda\Delta \\ \lambda\Delta & E_2^0 \end{pmatrix}.$$

Clearly the energy eigenfunctions for the unperturbed problems ( $\lambda = 0$ ) are given by

$$\phi_1^{(0)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \phi_2^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

- a. Solve this problem *exactly* to find the energy eigenfunctions  $\psi_1$  and  $\psi_2$  and the energy eigenvalues  $E_1$  and  $E_2$ .
- b. Assuming that  $\lambda|\Delta| \ll |E_1^0 - E_2^0|$ , solve the same problem using time-independent perturbation theory up to first order in the energy eigenfunctions and up to second order in the energy eigenvalues. Compare with the exact results obtained in (a).
- c. Suppose the two unperturbed energies are “almost degenerate,” that is,

$$|E_1^0 - E_2^0| \ll \lambda|\Delta|.$$

Show that the exact results obtained in (a) closely resemble what you would expect by applying *degenerate* perturbation theory to this problem with  $E_1^0$  set exactly equal to  $E_2^0$ .

12. (This is a tricky problem because the degeneracy between the first and the second state is not removed in first order. See also Gottfried 1966, 397, Problem 1.) This problem is from Schiff 1968, 295, Problem 4. A system that has three unperturbed states can be represented by the perturbed Hamiltonian matrix

$$\begin{pmatrix} E_1 & 0 & a \\ 0 & E_1 & b \\ a^* & b^* & E_2 \end{pmatrix}$$

where  $E_2 > E_1$ . The quantities  $a$  and  $b$  are to be regarded as perturbations that are of the same order and are small compared with  $E_2 - E_1$ . Use the second-order nondegenerate perturbation theory to calculate

- the perturbed eigenvalues. (Is this procedure correct?) Then diagonalize the matrix to find the exact eigenvalues. Finally, use the second-order degenerate perturbation theory. Compare the three results obtained.
13. Compute the Stark effect for the  $2S_{1/2}$  and  $2P_{1/2}$  levels of hydrogen for a field  $\epsilon$  sufficiently weak so that  $e\epsilon a_0$  is small compared to the fine structure, but take the Lamb shift  $\delta$  ( $\delta = 1057$  MHz) into account (that is, ignore  $2P_{3/2}$  in this calculation). Show that for  $e\epsilon a_0 \ll \delta$ , the energy shifts are quadratic in  $\epsilon$ , whereas for  $e\epsilon a_0 \gg \delta$  they are linear in  $\epsilon$ . (The radial integral you need is  $\langle 2s|r|2p \rangle = 3\sqrt{3}a_0$ .) Briefly discuss the consequences (if any) of time reversal for this problem. This problem is from Gottfried 1966, Problem 7-3.
  14. Work out the Stark effect to lowest nonvanishing order for the  $n = 3$  level of the hydrogen atom. Ignoring the spin-orbit force and relativistic correction (Lamb shift), obtain not only the energy shifts to lowest nonvanishing order but also the corresponding zeroth-order eigenket.
  15. Suppose the electron had a very small intrinsic *electric* dipole moment analogous to the spin magnetic moment (that is,  $\mu_{el}$  proportional to  $\sigma$ ). Treating the hypothetical  $-\mu_{el} \cdot \mathbf{E}$  interaction as a small perturbation, discuss qualitatively how the energy levels of the Na atom ( $Z = 11$ ) would be altered in the absence of any external electromagnetic field. Are the level shifts first order or second order? State explicitly which states get mixed with each other. Obtain an expression for the energy shift of the lowest level that is affected by the perturbation. Assume throughout that only the valence electron is subjected to the hypothetical interaction.
  16. Consider a particle bound to a fixed center by a spherically symmetric potential  $V(r)$ .
    - a. Prove

$$|\psi(0)|^2 = \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2} \right) \left\langle \frac{dV}{dr} \right\rangle$$

for all  $s$  states, ground and excited.

- b. Check this relation for the ground state of a three-dimensional isotropic oscillator, the hydrogen atom, and so on.  
(*Note:* This relation has actually been found to be useful in guessing the form of the potential between a quark and an antiquark.)
17. a. Suppose the Hamiltonian of a rigid rotator in a magnetic field perpendicular to the axis is of the form (Merzbacher 1970, Problem 17-1)

$$AL^2 + BL_z + CL_y$$

if terms quadratic in the field are neglected. Assuming  $B \gg C$ , use perturbation theory to lowest nonvanishing order to get approximate energy eigenvalues.

b. Consider the matrix elements

$$\langle n'l'm'_s | (3z^2 - r^2) | nlm_s \rangle,$$

$$\langle n'l'm'_s | xy | nlm_s \rangle$$

of a one-electron (for example, alkali) atom. Write the selection rules for  $\Delta l$ ,  $\Delta m_l$ , and  $\Delta m_s$ . Justify your answer.

18. Work out the *quadratic* Zeeman effect for the ground-state hydrogen atom [ $\langle \mathbf{x} | 0 \rangle = (1/\sqrt{\pi a_0^3}) e^{-r/a_0}$ ] due to the usually neglected  $e^2 \mathbf{A}^2 / 2m_e c^2$ -term in the Hamiltonian taken to first order. Write the energy shift as

$$\Delta = -\frac{1}{2} \chi \mathbf{B}^2$$

and obtain an expression for *diamagnetic susceptibility*,  $\chi$ . (The following definite integral may be useful:

$$\int_0^\infty e^{-\alpha r} r^n dr = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}.)$$

19. (Merzbacher 1970, 448, Problem 11.) For the He wave function, use

$$\psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = (Z_{\text{eff}}^3 / \pi a_0^3) \exp\left[\frac{-Z_{\text{eff}}(r_1 + r_2)}{a_0}\right]$$

with  $Z_{\text{eff}} = 2 - \frac{5}{16}$ , as obtained by the variational method. The measured value of the diamagnetic susceptibility is  $1.88 \times 10^{-6} \text{ cm}^3/\text{mole}$ .

Using the Hamiltonian for an atomic electron in a magnetic field, determine, for a state of zero angular momentum, the energy change to order  $B^2$  if the system is in a uniform magnetic field represented by the vector potential  $\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}$ .

Defining the atomic diamagnetic susceptibility  $\chi$  by  $E = -\frac{1}{2} \chi B^2$ , calculate  $\chi$  for a helium atom in the ground state and compare the result with the measured value.

20. Estimate the ground-state energy of a one-dimensional simple harmonic oscillator using

$$\langle x | \tilde{0} \rangle = e^{-\beta|x|}$$

as a trial function with  $\beta$  to be varied. (You may use

$$\int_0^\infty e^{-\alpha x} x^n dx = \frac{n!}{\alpha^{n+1}}.)$$

21. Estimate the lowest eigenvalue ( $\lambda$ ) of the differential equation

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + (\lambda - |x|) \psi = 0, \quad \psi \rightarrow 0 \text{ for } |x| \rightarrow \infty$$

using the variational method with

$$\psi = \begin{cases} c(\alpha - |x|), & \text{for } |x| < \alpha \\ 0, & \text{for } |x| > \alpha \end{cases} \quad (\alpha \text{ to be varied})$$



as a trial function. (*Caution:  $d\psi/dx$  is discontinuous at  $x = 0$ .) Numerical data that may be useful for this problem are:*

$$3^{1/3} = 1.442, \quad 5^{1/3} = 1.710, \quad 3^{2/3} = 2.080, \quad \pi^{2/3} = 2.145.$$

The *exact* value of the lowest eigenvalue can be shown to be 1.019.

22. Consider a one-dimensional simple harmonic oscillator whose classical angular frequency is  $\omega_0$ . For  $t < 0$  it is known to be in the ground state. For  $t > 0$  there is also a time-dependent potential

$$V(t) = F_0 x \cos \omega t$$

where  $F_0$  is constant in both space and time. Obtain an expression for the expectation value  $\langle x \rangle$  as a function of time using time-dependent perturbation theory to lowest nonvanishing order. Is this procedure valid for  $\omega \approx \omega_0$ ? [You may use  $\langle n' | x | n \rangle = \sqrt{\hbar/2m\omega_0} (\sqrt{n+1} \delta_{n', n+1} + \sqrt{n} \delta_{n', n-1})$ .]

23. A one-dimensional harmonic oscillator is in its ground state for  $t < 0$ . For  $t \geq 0$  it is subjected to a time-dependent but spatially uniform *force* (not potential!) in the  $x$ -direction,

$$F(t) = F_0 e^{-t/\tau}.$$

- a. Using time-dependent perturbation theory to first order, obtain the probability of finding the oscillator in its first excited state for  $t > 0$ . Show that the  $t \rightarrow \infty$  ( $\tau$  finite) limit of your expression is independent of time. Is this reasonable or surprising?

- b. Can we find higher excited states?

[You may use

$$\langle n' | x | n \rangle = \sqrt{\hbar/2m\omega} (\sqrt{n} \delta_{n', n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n', n+1}).]$$

24. Consider a particle bound in a simple harmonic oscillator potential. Initially ( $t < 0$ ), it is in the ground state. At  $t = 0$  a perturbation of the form

$$H'(x, t) = Ax^2 e^{-t/\tau}$$

is switched on. Using time-dependent perturbation theory, calculate the probability that, after a sufficiently long time ( $t \gg \tau$ ), the system will have made a transition to a given excited state. Consider all final states.

25. The unperturbed Hamiltonian of a two-state system is represented by

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1^0 & 0 \\ 0 & E_2^0 \end{pmatrix}.$$

There is, in addition, a time-dependent perturbation

$$V(t) = \begin{pmatrix} 0 & \lambda \cos \omega t \\ \lambda \cos \omega t & 0 \end{pmatrix} \quad (\lambda \text{ real}).$$

a. At  $t = 0$  the system is known to be in the first state, represented by

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Using time-dependent perturbation theory and assuming that  $E_1^0 - E_2^0$  is *not* close to  $\pm \hbar\omega$ , derive an expression for the probability that the system be found in the second state represented by

$$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

as a function of  $t$  ( $t > 0$ ).

b. Why is this procedure not valid when  $E_1^0 - E_2^0$  is close to  $\pm \hbar\omega$ ?

26. A one-dimensional simple harmonic oscillator of angular frequency  $\omega$  is acted upon by a spatially uniform but time-dependent force (*not* potential)

$$F(t) = \frac{(F_0\tau/\omega)}{(\tau^2 + t^2)}, \quad -\infty < t < \infty.$$

At  $t = -\infty$ , the oscillator is known to be in the ground state. Using the time-dependent perturbation theory to first order, calculate the probability that the oscillator is found in the first excited state at  $t = +\infty$ .

Challenge for experts:  $F(t)$  is so normalized that the impulse

$$\int F(t) dt$$

imparted to the oscillator is always the same—that is, independent of  $\tau$ ; yet for  $\tau \gg 1/\omega$ , the probability for excitation is essentially negligible. Is this reasonable? [Matrix element of  $x$ :  $\langle n'|x|n \rangle = (\hbar/2m\omega)^{1/2} (\sqrt{n} \delta_{n', n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{n', n+1})$ .]

27. Consider a particle in one dimension moving under the influence of some time-independent potential. The energy levels and the corresponding eigenfunctions for this problem are assumed to be known. We now subject the particle to a traveling pulse represented by a time-dependent potential,

$$V(t) = A\delta(x - ct).$$

a. Suppose at  $t = -\infty$  the particle is known to be in the ground state whose energy eigenfunction is  $\langle x|i \rangle = u_i(x)$ . Obtain the probability for finding the system in some excited state with energy eigenfunction  $\langle x|f \rangle = u_f(x)$  at  $t = +\infty$ .

b. Interpret your result in (a) physically by regarding the  $\delta$ -function pulse as a superposition of harmonic perturbations; recall

$$\delta(x - ct) = \frac{1}{2\pi c} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega[(x/c) - t]}.$$

Emphasize the role played by energy conservation, which holds even quantum mechanically as long as the perturbation has been on for a very long time.

28. A hydrogen atom in its ground state  $[(n, l, m) = (1, 0, 0)]$  is placed between the plates of a capacitor. A time-dependent but spatial uniform electric field (not potential!) is applied as follows:

$$\mathbf{E} = \begin{cases} 0 & \text{for } t < 0, \\ \mathbf{E}_0 e^{-t/\tau} & \text{for } t > 0 \end{cases} \quad (\mathbf{E}_0 \text{ in the positive } z\text{-direction}).$$

Using first-order time-dependent perturbation theory, compute the probability for the atom to be found at  $t \gg \tau$  in each of the three  $2p$  states:  $(n, l, m) = (2, 1, \pm 1 \text{ or } 0)$ . Repeat the problem for the  $2s$  state:  $(n, l, m) = (2, 0, 0)$ . You need not attempt to evaluate radial integrals, but perform all other integrations (with respect to angles and time).

29. Consider a composite system made up of two spin  $\frac{1}{2}$  objects. For  $t < 0$ , the Hamiltonian does not depend on spin and can be taken to be zero by suitably adjusting the energy scale. For  $t > 0$ , the Hamiltonian is given by

$$H = \left( \frac{4\Delta}{\hbar^2} \right) \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2.$$

Suppose the system is in  $|+ - \rangle$  for  $t \leq 0$ . Find, as a function of time, the probability for being found in each of the following states  $|+ + \rangle$ ,  $|+ - \rangle$ ,  $| - + \rangle$ , and  $| - - \rangle$ :

- By solving the problem exactly.
  - By solving the problem assuming the validity of first-order time-dependent perturbation theory with  $H$  as a perturbation switched on at  $t = 0$ . Under what condition does (b) give the correct results?
30. Consider a two-level system with  $E_1 < E_2$ . There is a time-dependent potential that connects the two levels as follows:

$$V_{11} = V_{22} = 0, \quad V_{12} = \gamma e^{i\omega t}, \quad V_{21} = \gamma e^{-i\omega t} \quad (\gamma \text{ real}).$$

At  $t = 0$ , it is known that only the lower level is populated—that is,  $c_1(0) = 1$ ,  $c_2(0) = 0$ .

- Find  $|c_1(t)|^2$  and  $|c_2(t)|^2$  for  $t > 0$  by *exactly* solving the coupled differential equation

$$i\hbar \dot{c}_k = \sum_{n=1}^2 V_{kn}(t) e^{i\omega_{kn}t} c_n, \quad (k=1,2).$$

- Do the same problem using time-dependent perturbation theory to lowest nonvanishing order. Compare the two approaches for small values of  $\gamma$ . Treat the following two cases separately: (i)  $\omega$  very different from  $\omega_{21}$  and (ii)  $\omega$  close to  $\omega_{21}$ .

Answer for (a): (Rabi's formula)

$$|c_2(t)|^2 = \frac{\gamma^2/\hbar^2}{\gamma^2/\hbar^2 + (\omega - \omega_{21})^2/4} \sin^2 \left\{ \left[ \frac{\gamma^2}{\hbar^2} + \frac{(\omega - \omega_{21})^2}{4} \right]^{1/2} t \right\},$$

$$|c_1(t)|^2 = 1 - |c_2(t)|^2.$$

31. Show that the slow-turn-on of perturbation  $V \rightarrow Ve^{it}$  (see Baym 1969, 257) can generate contribution from the second term in (5.6.36).
32. a. Consider the positronium problem you solved in Chapter 3, Problem 3. In the presence of a uniform and static magnetic field  $B$  along the  $z$ -axis, the Hamiltonian is given by

$$H = A\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \left( \frac{eB}{m_e c} \right) (S_{1z} - S_{2z}).$$

Solve this problem to obtain the energy levels of all four states *using degenerate time-independent perturbation theory* (instead of diagonalizing the Hamiltonian matrix). Regard the first and the second terms in the expression for  $H$  as  $H_0$  and  $V$ , respectively. Compare your results with the exact expressions

$$E = -\left( \frac{\hbar^2 A}{4} \right) \left[ 1 \pm 2 \sqrt{1 + 4 \left( \frac{eB}{m_e c \hbar A} \right)^2} \right] \quad \text{for } \begin{cases} \text{singlet } m = 0 \\ \text{triplet } m = 0 \end{cases}$$

$$E = \frac{\hbar^2 A}{4} \quad \text{for triplet } m = \pm 1,$$

where *triplet (singlet)  $m = 0$*  stands for the state that becomes a pure triplet (singlet) with  $m = 0$  as  $B \rightarrow 0$ .

- b. We now attempt to cause transitions (via stimulated emission and absorption) between the two  $m = 0$  states by introducing an oscillating magnetic field of the "right" frequency. Should we orient the magnetic field along the  $z$ -axis or along the  $x$ - (or  $y$ -) axis? Justify your choice. (The original static field is assumed to be along the  $z$ -axis throughout.)
- c. Calculate the eigenvectors to first order.
- 32'. Repeat Problem 32 above, but with the atomic hydrogen Hamiltonian

$$H = A\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \left( \frac{eB}{m_e c} \right) \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{B}$$

where in the hyperfine term  $A\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$ ,  $\mathbf{S}_1$  is the electron spin, while  $\mathbf{S}_2$  is the proton spin. [Note the problem here has less symmetry than that of the positronium case].

33. Consider the spontaneous emission of a photon by an excited atom.

The process is known to be an  $E1$  transition. Suppose the magnetic quantum number of the atom decreases by one unit. What is the angular distribution of the emitted photon? Also discuss the polarization of the photon with attention to angular-momentum conservation for the whole (atom plus photon) system.

34. Consider an atom made up of an electron and a singly charged ( $Z=1$ ) triton ( ${}^3\text{H}$ ). Initially the system is in its ground state ( $n=1, l=0$ ). Suppose the nuclear charge *suddenly increases* by one unit (realistically by emitting an electron and an antineutrino). This means that the triton nucleus turns into a helium ( $Z=2$ ) nucleus of mass 3 ( ${}^3\text{He}$ ). Obtain the probability for the system to be found in the ground state of the resulting helium ion. The hydrogenic wave function is given by

$$\psi_{n=1, l=0}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{Z}{a_0} \right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}.$$

35. The ground state of a hydrogen atom ( $n=1, l=0$ ) is subjected to a time-dependent potential as follows:

$$V(\mathbf{x}, t) = V_0 \cos(kz - \omega t).$$

Using time-dependent perturbation theory, obtain an expression for the transition rate at which the electron is emitted with momentum  $\mathbf{p}$ . Show, in particular, how you may compute the angular distribution of the ejected electron (in terms of  $\theta$  and  $\phi$  defined with respect to the  $z$ -axis). Discuss *briefly* the similarities and the differences between this problem and the (more realistic) photoelectric effect. (*Note:* For the initial wave function see Problem 34. If you have a normalization problem, the final wave function may be taken to be

$$\psi_f(\mathbf{x}) = \left( \frac{1}{L^{3/2}} \right) e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}/\hbar}$$

with  $L$  very large, but you should be able to show that the observable effects are independent of  $L$ .)

36. Derive an expression for the density of free particle states in *two* dimensions, that is, the two-dimensional analog of

$$\rho(E) dE d\Omega = \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 \left( \frac{mk}{\hbar^2} \right) dE d\Omega, \quad \left( \mathbf{k} \equiv \frac{\mathbf{p}}{\hbar}, E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right).$$

Your answer should be written as a function of  $k$  (or  $E$ ) times  $dE d\phi$ , where  $\phi$  is the polar angle that characterizes the momentum direction in two dimensions.

37. A particle of mass  $m$  constrained to move in one dimension is confined

within  $0 < x < L$  by an infinite-wall potential

$$\begin{aligned} V &= \infty & \text{for } x < 0, x > L, \\ V &= 0 & \text{for } 0 \leq x \leq L. \end{aligned}$$

Obtain an expression for the density of states (that is, the number of states per unit energy interval) for *high* energies as a function of  $E$ . (Check your dimension!)

38. Linearly polarized light of angular frequency  $\omega$  is incident on a one-electron “atom” whose wave function can be approximated by the ground state of a three-dimensional isotropic harmonic oscillator of angular frequency  $\omega_0$ . Show that the differential cross section for the ejection of a photoelectron is given by

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{4\alpha\hbar^2 k_f^3}{m^2\omega\omega_0} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega_0}} \exp\left\{-\frac{\hbar}{m\omega_0} \left[ k_f^2 + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \right]\right\} \\ &\quad \times \sin^2\theta \cos^2\phi \exp\left[\left(\frac{2\hbar k_f\omega}{m\omega_0 c}\right) \cos\theta\right] \end{aligned}$$

provided the ejected electron of momentum  $\hbar k_f$  can be regarded as being in a plane-wave state. (The coordinate system used is shown in Figure 5.10.)

39. Find the probability  $|\phi(\mathbf{p}')|^2 d^3p'$  of the particular momentum  $\mathbf{p}'$  for the ground-state hydrogen atom. (This is a nice exercise in three-dimensional Fourier transforms. To perform the angular integration choose the  $z$ -axis in the direction of  $\mathbf{p}$ .)
40. Obtain an expression for  $\tau(2p \rightarrow 1s)$  for the hydrogen atom. Verify that it is equal to  $1.6 \times 10^{-9}$  s.