



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE  
Facultad de Física  
Departamento de Física

---

# Libro con resúmenes y ejercicios resueltos

por Nicolás Pérez

*En este borrador hay errores de modo que las correcciones son agradecidas.  
Comentarios a [nrperez@uc.cl](mailto:nrperez@uc.cl)*

Nicolás Pérez  
Semestre 1, 2012

## Ayudantías Mecánica Cuántica II

*Profesor: Max Bañados*

*Ayudante : Nicolás Pérez (nrperez@uc.cl)*

# Ayudantía 1

## 1 Spin

Importante característica de las partículas subatómicas. Muchas veces confundida y entendida como el giro del electrón, la verdad sobre el spin es aún confusa y hasta hoy su riqueza se encuentra en lo abstracto que llega a presentarse en muchas teorías. Muchos efectos importantes de la física se deben al spin y las diferentes posibilidades en que se presenta al mundo.

Siendo más concretos, el spin es un momento angular intrínseco de diferentes valores, eso si, todos múltiplos de  $\frac{1}{2}$ . Los operadores de spin, están definidos por sus relaciones de conmutación:

$$[S_x, S_y] = i\hbar S_z \quad (1)$$

Si consideramos el caso  $s = 1/2$  y queremos representarlo por matrices de  $2 \times 2$ , tenemos:

$$S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix} \quad S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

Esta representación puede ser escrita como:

$$S = \frac{1}{2} \hbar \vec{\sigma} \quad (3)$$

donde

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

corresponden a las matrices de Pauli. Estas matrices, satisfacen las relaciones de conmutación que siguen:

$$[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z \quad (5)$$

y también satisfacen:

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = 1 \quad (6)$$

Así mismo, es importante considerar las siguientes relaciones generales:

$$S^2 |sm\rangle = \hbar^2 s(s+1) |sm\rangle \quad (7)$$

$$S_z |sm\rangle = \hbar m |sm\rangle \quad (8)$$

$$S_{\pm} |sm\rangle = \hbar \sqrt{s(s+1) - m(m \pm 1)} |s(m \pm 1)\rangle \quad (9)$$

donde:

$$S_{\pm} = S_x \pm iS_y \quad (10)$$

## Problemas

1. (a) Encuentre los siguientes operadores en términos de las matrices de Pauli:

$$\sigma_x^{-1} \quad ; \quad \sqrt{1 + \sigma_x}$$

- (b) Escriba el operador de spin  $S'_z$  de un electrón a lo largo de un eje  $z'$  el cuál se encuentra rotado en un ángulo  $\theta$  respecto al eje  $z$  original y que yace en el plano  $x$ - $y$  del sistema original de coordenadas (estamos hablando del espacio de spin).
- (c) Encuentre la probabilidad de medir  $\frac{1}{2}\hbar$  y  $-\frac{1}{2}\hbar$  a lo largo del eje  $z'$  si el electrón originalmente se encontraba en los autoestados  $|+\rangle$  y  $|-\rangle$  de  $S_z$ . Encuentre, para el primer caso, el valor medio de  $S'_z$ . Sugerencia: rote el spinor original apropiadamente y verifique que el spinor así obtenido es autoestado del operador de spin rotado.
2. En el instante  $t = 0$  un electrón, cuyo spin ( $s = \frac{1}{2}\hbar$ ) apunta en la dirección  $+\hat{z}$  de un sistema cartesiano de referencia, entra a una región de campo magnético uniforme,  $\vec{B} = B_0\hat{x}$  que apunta en la dirección  $+\hat{x}$ . Encuentre la probabilidad que en un instante posterior  $t$  el spin de este electrón continúe apuntando en la dirección  $+\hat{z}$ .
3. Considere una partícula con número cuántico de Spin  $s = 1$ . Ignore todos los grados de libertad espaciales y asuma que la partícula está sujeta a un campo magnético externo  $\vec{B} = B\hat{x}$ . El operador hamiltoniano del sistema es:  $H = g\vec{B} \cdot \vec{S}$
- (a) Obtenga explícitamente las matrices de spin en la base de  $S^2$ , autoestados  $S_z, |s, m_s\rangle$ .
- (b) Si la partícula es inicialmente (a  $t=0$ ) en el estado  $|1 \ 1\rangle$ , encuentre el estado evolucionado de la partícula a tiempos  $t > 0$ .
- (c) ¿Cuál es la probabilidad de encontrar la partícula en el estado  $|1 \ -1\rangle$

## Soluciones

1. El primer problema fue separado en tres partes, resueltas a continuación:

- (a) Cuando deducimos las matrices de Pauli, es trivial notar que forman una base en el espacio de las matrices de  $2 \times 2$ . Es decir, si nos entregan cualquier matriz de  $2 \times 2$ , podemos escribirla en función de las matrices de Pauli y la matriz identidad. Lo que queremos obtener es:  $\sigma_x^{-1}$ , para ello, aprovechamos la propiedad del cuadrado de la matriz:

$$\sigma_x^2 = 1_{2 \times 2} \quad (11)$$

de modo que es trivial, obtener:

$$\sigma_x \sigma_x \sigma_x^{-1} = \sigma_x = \sigma_x^{-1} \quad (12)$$

Finalmente:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (13)$$

Por otro lado, nos pedían también calcular:  $\sqrt{1 + \sigma_x}$ . Para ello, expandimos en la base:

$$\sqrt{1 + \sigma_x} = a_0 1_{2 \times 2} + a_1 \sigma_x + a_2 \sigma_y + a_3 \sigma_z \quad (14)$$

Ahora elevamos al cuadrado la ecuación recién descrita:

$$1 + \sigma_x = a_0^2 + a_1^2 + a_2^2 + a_3^2 + 2a_0(a_1 \sigma_x + a_2 \sigma_y + a_3 \sigma_z) \quad (15)$$

ya que:  $\{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 0 \quad \forall i \neq j$ . Con esto obtenemos que:

$$a_2 = a_3 = 0 \quad (16)$$

$$2a_0 a_1 = 1 \quad (17)$$

$$a_0^2 + a_1^2 = 1 \quad (18)$$

Lo que nos da finalmente un resultado de:

$$\sqrt{1 + \sigma_x} = \frac{1}{\sqrt{2}} (1_{2 \times 2} + \sigma_x) \quad (19)$$

- (b) Ahora, nos piden escribir el operador de spin  $S'_z$ . Lo que debemos recordar es cómo le afecta una rotación a un operador. Si tenemos un operador  $\hat{O}$ , con una rotación, quedará dado por:

$$\tilde{\hat{O}} = R \hat{O} R^{-1} \quad (20)$$

donde R es el operador unitario de rotaciones. Entonces, en nuestro problema, nos queda:

$$\tilde{S}_z = S_{z'} = R_y(\theta) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} R_y^{-1}(\theta) \quad (21)$$

donde

$$R_y(\theta) = e^{-\frac{i}{2} \sigma_y \cdot \theta} \quad (22)$$

Para comprender mejor el problema, expandamos la exponencial:

$$e^{-\frac{i}{2} \sigma_y \theta} = \cos\left(\frac{\sigma_y \theta}{2}\right) - i \sin\left(\frac{\sigma_y \theta}{2}\right) \quad (23)$$

Pero, como sabemos que  $\sigma_y^2 = 1$  y  $\sigma_y^3 = \sigma_y$ , es muy fácil notar que:

$$e^{-\frac{i}{2}\sigma_y\theta} = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) 1_{2x2} - i\sigma_y \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (24)$$

Entonces, nos queda:

$$\widehat{S}_z = S_{z'} = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (25)$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix} \quad (26)$$

Con esto, queda resuelto el ejercicio.

(c) Si el autoestado de  $S_z$  es  $|+\rangle = (1 \ 0)^T$  vemos que el problema de autovalores queda definido por:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ \sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} \quad (27)$$

Este problema de autovalores, tiene por solución:

$$\begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (28)$$

Por otro lado, es posible seguir la sugerencia del enunciado. Si tenemos un autoestado  $|+\rangle$  de  $S_z$ , entonces:

$$\Psi = e^{-\frac{i}{2}\sigma_y\theta} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -\sin\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (29)$$

Luego, la probabilidad de medir  $|+\rangle$  es  $\cos^2\frac{\theta}{2}$ .

Si teníamos el estado  $|-\rangle = (0 \ 1)^T \rightarrow \Psi = (-\sin\frac{\theta}{2} \ \cos\frac{\theta}{2})^T$

y la probabilidad de medir  $|+\rangle$  es  $\sin^2\frac{\theta}{2}$

Finalmente, para calcular el valor de expectación, hacemos:

$$\langle S_{z'} \rangle = \left(\frac{\hbar}{2}\right) \cos^2\frac{\theta}{2} + \left(-\frac{\hbar}{2}\right) \sin^2\frac{\theta}{2} = \frac{\hbar}{2} \cos\theta \quad (30)$$

2. EL Hamiltoniano que nos interesa es:

$$H = g \frac{e}{2m_e c} \vec{S} \cdot \vec{B} = \frac{e}{m_e c} \vec{S} \cdot \vec{B} \quad (31)$$

dado que  $g$  es aproximadamente 2. Hacemos un pequeño cambio,

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \rightarrow H = \frac{e\hbar}{2m_e c} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \quad (32)$$

Ahora, tomamos el campo magnético:  $\vec{B} = B_0 \hat{x}$ ,  $B_0$  constante. Con esto, obtenemos:

$$H = \frac{e\hbar B_0}{2m_e c} \sigma_1 \quad , \quad \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (33)$$

Por otro lado, sabemos que la función de onda es un spinor de dos componentes:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad \text{tal que} \quad H\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (34)$$

Ahora, reemplazando nuestro caso concreto:

$$\frac{eB_0\hbar}{2m_e c} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (35)$$

aquí la derivada parcial, puede ser reemplazada por la derivada total en el tiempo pues las funciones  $\psi_1, \psi_2$  solo dependen del tiempo. Entonces,:

$$\frac{eB_0\hbar}{2m_e c} \psi_2 = i \frac{d\psi_1}{dt} \quad (36)$$

$$\frac{eB_0\hbar}{2m_e c} \psi_1 = i \frac{d\psi_2}{dt} \quad (37)$$

Ahora, introducimos la notación  $\omega = \frac{eB_0}{2m_e c}$ . Luego, derivamos la primera ecuación y reemplazamos en la segunda, obteniendo:

$$-\omega^2 \psi_1 = \frac{d^2 \psi_1}{dt^2} \quad \implies \quad \psi_1 = A e^{i\omega t} + B e^{-i\omega t} \quad (38)$$

En  $t = 0$ ,  $|\psi_1(0)|^2 = 1$  y  $|\psi_2(0)|^2 = 0$ . De este modo:

$$\psi_1 = A(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (39)$$

Entonces, normalizando la función, se obtiene:

$$\psi_1(0) = 2A \quad \implies \quad 4A^2 = 1 \quad \implies \quad |A| = \frac{1}{2} \quad (40)$$

Entonces, vemos que  $A = B = \frac{1}{2}$  (salvo por fase global).

$$\psi_1(t) = \cos \omega t \quad (41)$$

$$\psi_2(t) = -i \sin \omega t \quad (42)$$

Es decir:

$$\Psi = \cos \omega t \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - i \sin \omega t \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (43)$$

Luego, la probabilidad buscada es  $\cos^2 \omega t$ . Otra posibilidad es evolucionar temporalmente el estado inicial  $(1 \ 0)^T$  de modo que:

$$\begin{pmatrix} \psi_1(t) \\ \psi_2(t) \end{pmatrix} = e^{-iHt} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (44)$$

Luego, se expande  $(1\ 0)^T$  como C.L. de autoestados de  $\sigma_x$ . Allí la acción de H es diagonal. Finalmente, se identifica el coeficiente de la primera componente.

### 3. Problema 3:

(a) Para obtener las matrices de spin para  $s=1$ , consideramos las relaciones:

$$S_+|1\ 0\rangle = \hbar\sqrt{2}|1\ 1\rangle \quad (45)$$

$$S_+|1\ -1\rangle = \hbar\sqrt{2}|1\ 0\rangle \quad (46)$$

$$S_-|1\ 1\rangle = \hbar\sqrt{2}|1\ 0\rangle \quad (47)$$

$$S_-|1\ 0\rangle = \hbar\sqrt{2}|1\ -1\rangle \quad (48)$$

esto, nos lleva a:

$$\mathcal{S}_+ = \hbar\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (49)$$

$$\mathcal{S}_- = (\mathcal{S}_+)^\dagger = \hbar\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (50)$$

$$(51)$$

De aquí, es sencillo obtener:

$$\mathcal{S}_x = \frac{1}{2}(\mathcal{S}_+ + \mathcal{S}_-) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (52)$$

Del mismo modo, obtenemos la matriz en  $y$ :

$$\mathcal{S}_y = \frac{1}{2i}(\mathcal{S}_+ - \mathcal{S}_-) = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \quad (53)$$

Su conmutador es:

$$[\mathcal{S}_x, \mathcal{S}_y] = i\hbar^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (54)$$

Esto implica que:

$$\mathcal{S}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (55)$$

(b) De la matriz  $S_x$ , podemos obtener los autovectores, que corresponden a los autoestados:

$$|S_x = \hbar\rangle = \frac{1}{2} \left( |1\ 1\rangle + \sqrt{2}|1\ 0\rangle + |1\ -1\rangle \right) \quad (56)$$

$$|S_x = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\ 1\rangle - |1\ -1\rangle) \quad (57)$$

$$|S_x = -\hbar\rangle = \frac{1}{2} \left( |1\ 1\rangle - \sqrt{2}|1\ 0\rangle + |1\ -1\rangle \right) \quad (58)$$

$$(59)$$

OJO: aquí estamos mirando los autoestados de  $S_x$  y lo expresamos como una combinación lineal de los otros autoestados. Lo importante es tener claro que corresponden a bases diferentes.

El estado evolucionado de la partícula será:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-igBtS_x/\hbar}|1\ 1\rangle = \frac{1}{2} \left( e^{-igBt}|\hbar\rangle + e^{igBt}|-\hbar\rangle + \sqrt{2}|0\rangle \right) \quad (60)$$

(c) Transformando de vuelta a los autoestados de  $S_z$ , obtenemos:

$$|\psi(t)\rangle = \cos^2(gBt/2)|1\ 1\rangle - \sin^2(gBt/2)|1\ -1\rangle - i\sqrt{2}\sin(gBt/2)\cos(gBt/2)|1\ 0\rangle \quad (61)$$

Luego, la probabilidad de encontrar a la partícula en el autoestado  $S_z|1\ -1\rangle$  es:

$$\mathcal{P}_\downarrow = \sin^4(gBt/2) \quad (62)$$



## Ayudantía 2

Profesor: Max Bañados

Ayudante : Nicolás Pérez (nrperez@uc.cl)

### Problemas

1. Considere el operador de rotaciones que actúa sobre spinores ( $S = \frac{1}{2}\hbar$ ). Considere una rotación en torno al eje  $\hat{x}$  en un ángulo  $\theta$ .

(a) Escriba este operador de rotación  $U(\theta)$ . Muestre explícitamente que:

$$U(\theta) = \left( \cos\frac{\theta}{2} - i\sigma_x \sin\frac{\theta}{2} \right) \quad (63)$$

- (b) Inicialmente se tiene un spinor, autoestado de  $S_z$ , que apunta hacia arriba (spinor up). Suponga que medimos ahora la componente del spin respecto a un eje  $z'$  que forma un ángulo  $\theta$  respecto al eje  $z$  original, en el plano  $z - y$ . ¿Cuál es la probabilidad de medir  $+\frac{\hbar}{2}$  ó  $-\frac{\hbar}{2}$ ? Encuentre el valor de expectación de  $S_{z'}$  (operador de Spin rotado) en el estado original.
2. (a) Considere un sistema de spin  $1/2$ . Cuáles son los autovalores y autovectores normalizados del operador  $A\hat{s}_y + B\hat{s}_z$ , donde  $\hat{s}_y, \hat{s}_z$  son los operadores de momento angular, y  $A, B$  son reales constantes.  
(b) Asuma que el sistema está en el estado correspondiente al autovalor superior. ¿Cuál es la probabilidad de que una medición de  $\hat{s}_y$  nos dará el valor  $\hbar/2$ ?
3. Un electrón es descrito por un Hamiltoniano que no depende del spin. La función de onda de spin del electrón es un autoestado de  $S_z$  con autovalor  $+\hbar/2$ . El operador  $\hat{n} \cdot \vec{S}$  representa la proyección del spin a lo largo de la dirección  $\hat{n}$ . Nosotros podemos expresar esta dirección como  $\hat{n} = \sin\theta(\cos\phi\hat{x} + \sin\phi\hat{y}) + \cos\theta\hat{z}$ 
  - (a) Resuelva el problema de autovalores de  $\hat{n} \cdot \vec{S}$ . ¿Cuál es la probabilidad de encontrar un electrón en cada autoestado  $\hat{n} \cdot \vec{S}$ ?
  - (b) Asuma ahora que el sistema es sujeta a un campo magnético homogéneo  $\vec{B} = \hat{n}B$ . El hamiltoniano es  $H = H_0 + \omega\hat{n} \cdot \vec{S}$ . El estado espacial original del electrón continua como un autoestado del sistema modificado. Calcule el estado de spin del sistema para tiempos posteriores  $t > 0$ . ¿Cuál es la probabilidad de encontrar el sistema de nuevo en el estado original? ¿Cuál es la probabilidad de encontrarlo con el spin invertido?

## Soluciones

**Problema 1:** Para rotaciones que actúan sobre spinores, sabemos que:

$$U(\theta) = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \cdot \hat{n} \theta} \quad (64)$$

donde  $\hat{n}$  es la dirección del eje de rotación. En este caso,  $\hat{n} = \hat{x}$ , con lo que obtenemos de la ecuación anterior:

$$U(\theta) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hbar \sigma_x \frac{\theta}{2}} \quad (65)$$

Pero como vimos en la ayudantía anterior, esto puede ser expandido de la forma siguiente:

$$U(\theta) = 1 - i\sigma_x \frac{\theta}{2} + \frac{1}{2!} \left( -i\sigma_x \frac{\theta}{2} \right)^2 + \dots \quad (66)$$

Ahora, podemos simplificar esta ecuación simplemente considerando las siguientes igualdades:

$$\sigma_x^2 = \sigma_x^4 = \dots = 1 \quad (67)$$

$$\sigma_x^3 = \sigma_x \quad (68)$$

Luego, es muy sencillo separar esto y obtener la simplificación correspondiente:

$$\begin{aligned} U(\theta) &= 1 - \frac{1}{2} \left( \frac{\theta}{2} \right)^2 + \frac{1}{4!} \left( \frac{\theta}{2} \right)^4 - \dots \\ &- i\sigma_x \left( \frac{\theta}{2} + \frac{1}{3!} \left( \frac{\theta}{2} \right)^3 + \dots \right) \end{aligned} \quad (69)$$

Luego, es evidente el resultado:

$$U(\theta) = \cos \frac{\theta}{2} - i\sigma_x \sin \frac{\theta}{2} \quad (70)$$

(b) Considerando el estado inicial  $(10)^T$ , autoestado spin up del operador  $S_z$ . El estado rotado es:

$$|\xi_+\rangle_\theta = e^{-i\frac{\hbar}{2} \frac{\sigma_x}{\hbar} \theta} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (71)$$

Luego, tenemos que:

$$|\xi_+\rangle_\theta = \left( \cos \frac{\theta}{2} - i\sigma_x \sin \frac{\theta}{2} \right) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (72)$$

El estado queda dado por:

$$|\xi_+\rangle_\theta = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ -i \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (73)$$

Entonces, las probabilidades de medir  $\pm \frac{\hbar}{2}$  según el nuevo eje  $z'$  están dadas por:

$$P_+ = \cos^2 \frac{\theta}{2} \quad P_- = \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (74)$$

¿Cómo calculamos el valor de expectación de  $S_{z'}$  entre estados originales:

$$S_{z'} = e^{\frac{i}{2} \sigma_x \theta} S_z e^{-\frac{i}{2} \sigma_x \theta} \quad (75)$$

Entonces, se obtiene:

$$\langle +|S_{z'}|+ \rangle = \langle +|e^{\frac{i}{2}\sigma_x\theta}S_z e^{-\frac{i}{2}\sigma_x\theta}|+ \rangle \quad (76)$$

Lo que se transforma en (no hemos considerado las unidades):

$$\langle +|S_{z'}|+ \rangle = \left( \cos\frac{\theta}{2}, \quad i\sin\frac{\theta}{2} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ -i\sin\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad (77)$$

Entonces el valor de expectación es:

$$\langle +|S_{z'}|+ \rangle = \cos^2\frac{\theta}{2} - \sin^2\frac{\theta}{2} \quad (78)$$

**Problema 2:** De la definición del operador de momento angular, obtenemos rápidamente:

$$\hat{X} = A\hat{s}_y + B\hat{s}_z = A\frac{1}{2}\hbar\sigma_y + B\frac{1}{2}\hbar\sigma_z \quad (79)$$

Luego,

$$(\hat{X})^2 = \frac{\hbar^2}{4}(A^2 + B^2 + AB\{\sigma_y, \sigma_z\}) \quad (80)$$

$$= \frac{\hbar^2}{4}(A^2 + B^2) \quad (81)$$

¿Cómo llegamos a esto? Usando que:

$$\sigma_i^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I, \quad i = 1, 2, 3 \quad (82)$$

y además que:

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = \sigma_i\sigma_j + \sigma_j\sigma_i = 2\delta_{ij} \quad (83)$$

Luego, los dos autovalores de  $\hat{X}$  son:

$$X_1 = \frac{\hbar}{2}\sqrt{A^2 + B^2}, \quad X_2 = -\frac{\hbar}{2}\sqrt{A^2 + B^2} \quad (84)$$

En la representación de  $\hat{s}^2$  y  $\hat{S}_z$ , tenemos:

$$\hat{X} = \frac{\hbar}{2}(A\sigma_y + B\sigma_z) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} B & -iA \\ iA & -B \end{pmatrix} \quad (85)$$

Ahora, supongamos que los autovectores tienen la forma:

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Luego, podemos escribir el problema de autovalores obteniendo:

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} B & -iA \\ iA & -B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = T \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \quad (86)$$

donde:

$$T = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \pm\sqrt{A^2 + B^2} & 0 \\ 0 & \mp\sqrt{A^2 + B^2} \end{pmatrix} \quad (87)$$

o

$$\begin{pmatrix} B \mp \sqrt{A^2 + B^2} & -iA \\ iA & -B \mp \sqrt{A^2 + B^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = 0 \quad (88)$$

De modo que se cumple:

$$\frac{a}{b} = iAB \mp \sqrt{A^2 + B^2} \quad (89)$$

y el autovector normalizado es:

$$\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \left[ \frac{1}{A^2 + (B \mp \sqrt{A^2 + B^2})^2} \right]^{1/2} \begin{pmatrix} iA \\ B \mp \sqrt{A^2 + B^2} \end{pmatrix} \quad (90)$$

(b) En la representación de  $\hat{s}^2$  y  $\hat{s}_z$ , el autovector de  $\hat{s}_y$  es:

$$|s_y = \frac{\hbar}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ 1 \end{pmatrix} \quad (91)$$

Entonces la probabilidad de encontrar  $s_y = \hbar/2$  es:

$$P_{\mp} = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (i \ 1) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \right|^2 = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (ia + b) \right|^2 = \frac{(B \mp \sqrt{A^2 + B^2} - A)^2}{2[(B \mp \sqrt{A^2 + B^2})^2 + A^2]} \quad (92)$$

Nótese que  $P_-$  es la probabilidad de encontrar al sistema en el estado con autovalor  $X = \hbar\sqrt{A^2 + B^2}/2$  y  $P_+$  es la correspondiente al estado de  $X = -\hbar\sqrt{A^2 + B^2}/2$ .

**Problema 3:** En términos de la representación de Pauli, escribimos:

$$\hat{n} \cdot \vec{S} = \frac{\hbar}{2} \left[ \sin\theta \cos\phi \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \sin\theta \sin\phi \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + \cos\theta \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right] \quad (93)$$

Luego,

$$\hat{n} \cdot \vec{S} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta e^{-i\phi} \\ \sin\theta e^{i\phi} & -\cos\theta \end{pmatrix} \quad (94)$$

Los autovalores de esta matriz son  $\pm\hbar/2$ , con los correspondientes autovectores:

$$\begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} \\ \sin\frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \sin\frac{\theta}{2} \\ -\cos\frac{\theta}{2} e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (95)$$

Las probabilidades de encontrar el electron en los estados superiores son respectivamente  $\cos^2(\theta/2)$  y  $\sin^2(\theta/2)$ .

(b) El estado evolucionado será:

$$|\psi(t)\rangle e^{-iE^{(0)}t/\hbar} e^{-i\omega t(\hat{n} \cdot \vec{S})/\hbar} |\psi(0)\rangle \quad (96)$$

Ignorando la parte espacial, tenemos:

$$\Psi(t) = e^{-iE^{(0)}t/\hbar} e^{-i\omega t(\hat{n} \cdot \vec{\sigma})/2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (97)$$

o también:

$$\Psi(t) = e^{-iE^{(0)}t/\hbar} [\cos(\omega t/2) - i\hat{n} \cdot \vec{\sigma} \sin(\omega t/2)] \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (98)$$

de modo que:

$$\Psi(t) = e^{-iE^{(0)}t/\hbar} \begin{pmatrix} \cos(\omega t/2) - i\sin(\omega t/2)\cos\theta \\ -i\sin(\omega t/2)\sin\theta e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (99)$$

La probabilidad de encontrar el sistema nuevamente con spin up es:

$$\mathcal{P}_{\uparrow} = |\cos(\omega t/2) - i\sin(\omega t/2)\cos\theta|^2 = 1 - \sin^2(\omega t/2)\sin^2\theta \quad (100)$$

Nótese que en los tiempos  $t = 2\pi/\omega, 4\pi/\omega, \dots$  esta probabilidad se transforma en la unidad. La probabilidad de encontrar el sistema con spin down debe ser:

$$\mathcal{P}_{\downarrow} = \sin^2(\omega t/2)\sin^2\theta \quad (101)$$

## Ayudantía 3

*Profesor: Max Bañados*

*Ayudante : Nicolás Pérez (nrperez@uc.cl)*

### Resumen - Adición de momento angular

En este tema, lo que se busca comprender es la adición de momento angular en sistemas complejos donde por ejemplo tengamos dos partículas de diferente spin. En primer lugar, debemos tener claro que los operadores que actúan sobre diferentes partículas dado que sus grados de libertad son independientes. Considerando esto, es evidente que los operadores de spin conmutan, es decir:

$$[S_1, S_2] = 0 \quad (102)$$

Luego, definimos el spin total como:

$$S = S_1 + S_2 \quad (103)$$

Ahora, lo que nos interesa es determinar los autovalores y autofunciones de  $S^2$  y  $S_z$ . Si consideramos un sistema con dos partículas de spin 1/2, tenemos que el sistema tiene 4 estados. Consideremos solo la primera partícula y hagamos actuar el operador sobre la autofunción. Obtenemos:

$$S_1^2 \chi_{\pm}^{(1)} = \frac{1}{2} \left( \frac{1}{2} + 1 \right) \hbar^2 \chi_{\pm}^{(1)} \quad (104)$$

$$S_{1z} \chi_{\pm}^{(1)} = \pm \hbar \chi_{\pm}^{(1)} \quad (105)$$

Y es obvio que para la segunda partícula es exactamente lo mismo. Otra notación, que a veces es más cómoda visualmente, hace la relación  $\chi_+ = \uparrow$  Entonces, los cuatro posibles estados del sistema son:

$$\uparrow\uparrow \quad \uparrow\downarrow \quad \downarrow\uparrow \quad \downarrow\downarrow \quad (106)$$

Si nos devolvemos y aplicamos  $S_z$  sobre ambos spinores, lo que obtenemos es:

$$S_z \chi_1 \chi_2 = (S_z^{(1)} + S_z^{(2)}) \chi_1 \chi_2 \quad (107)$$

$$= (S_z^{(1)} \chi_1) \chi_2 + \chi_1 (S_z^{(2)} \chi_2) \quad (108)$$

$$= (\hbar m_1 \chi_1) \chi_2 + \chi_1 (\hbar m_2 \chi_2) \quad (109)$$

$$= \hbar(m_1 + m_2) \chi_1 \chi_2 \quad (110)$$

Relacionando esto con la notación gráfica, tenemos:

$$\uparrow\uparrow: m = 1 \quad (111)$$

$$\uparrow\downarrow: m = 0 \quad (112)$$

$$\downarrow\uparrow: m = 0 \quad (113)$$

$$\downarrow\downarrow: m = -1 \quad (114)$$

Si esto se analiza correctamente, nos daremos cuenta que podemos separar 4 estados en dos sets. Uno con  $s = 1$  que es el llamado triplete y otro con  $s = 0$  que es el llamado singlete. Es importante notar que si nos abstraemos

al resultado general y formamos un sistema con dos partículas de spin  $s_1$  y  $s_2$ , los spines totales del sistema pueden ser:

$$s = (s_1 + s_2), (s_1 + s_2 - 1), (s_1 + s_2 - 2), \dots, |s_1 - s_2| \quad (115)$$

El estado partícula  $|s \ m\rangle$  con spin total  $s$  y componente  $z$   $m$  será una combinación lineal de los estados compuestos  $|s_1 \ m_1\rangle|s_2 \ m_2\rangle$  dada por:

$$|sm\rangle = \sum_{m_1+m_2=m} C_{m_1 m_2 m}^{s_1 s_2 s} |s_1 \ m_1\rangle |s_2 \ m_2\rangle \quad (116)$$

Nótese que las componentes  $z$  añaden solamente los estados compuestos que contribuyen para los cuales  $m_1 + m_2 = m$

## Problemas

1. Un sistema de dos partículas con spin  $s_1 = \frac{3}{2}$  y  $s_2 = \frac{1}{2}$  es descrito por el Hamiltoniano aproximado  $H = \alpha S_1 \cdot S_2$ , con  $\alpha$  una constante dada. El sistema está inicialmente ( $t = 0$ ) en el siguiente autoestado de  $S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}$ :

$$\left| \frac{3}{2} \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle \quad (117)$$

Encuentre el estado del sistema en tiempos  $t > 0$ . ¿Cuál es la probabilidad de encontrar al sistema en el estado  $\frac{3}{2} \frac{3}{2}; \frac{1}{2} - \frac{1}{2}$ ?

2. Considere un sistema de dos fermiones no idénticos, cada uno con spin  $1/2$ . Uno está en el estado con  $S_{1x} = \hbar/2$  mientras que el otro está en el estado con  $S_{2y} = -\hbar/2$ . ¿Cuál es la probabilidad de encontrar el sistema en un estado con números cuánticos de spin total  $s = 1, m_s = 0$ , donde  $m_s$  se refiere a la *componentez* del spin total?
3. Considere dos partículas de spin 1 que ocupan el estado:

$$|s_1 = 1, m = 1; s_2 = 1, m_2 = 0\rangle$$

¿Cuál es la probabilidad de encontrar el sistema en un autoestado de spin total  $S^2$  con número cuántico  $s = 1$ ? ¿Cuál es la probabilidad para  $s = 2$ ?



## Soluciones

### Problema 1:

El hamiltoniano es entonces:

$$H = \frac{1}{2}\alpha(S^2 - S_1^2 - S_2^2) = \frac{1}{2}\alpha\hbar^2 \left[ S(S+1) - \frac{9}{2} \right] \quad (118)$$

Los autoestados de  $S^2, S_z$  también serán autoestados estacionarios; Los valores permitidos del número cuántico de spin total  $s$  son 1,2. Estos estados pueden ser expresados en términos de los estados  $S_1^2, S_2^2, S_{1z}, S_{2z}$  a través de los coeficientes de Clebsch-Gordan. En particular, tenemos:

$$|1\ 1\rangle = a \left| \frac{3}{2}\ \frac{3}{2}; \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2} \right\rangle + b \left| \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}; \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} \right\rangle \quad (119)$$

$$|2\ 1\rangle = c \left| \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}; \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} \right\rangle + d \left| \frac{3}{2}\ \frac{3}{2}; \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (120)$$

Utilizaremos la expresión:

$$S_{\pm}|s\ m\rangle = \hbar\sqrt{s(s+1) - m(m\pm 1)}|s\ (m\pm 1)\rangle \quad (121)$$

Los coeficientes  $a, b, c, d$  son fácilmente determinados de:

$$S_+|1\ 1\rangle = 0 = aS_2^{(+)} \left| \frac{3}{2}\ \frac{3}{2}; \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2} \right\rangle + bS_1^{(+)} \left| \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}; \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} \right\rangle \quad (122)$$

$$= a\hbar \left| \frac{3}{2}\ \frac{3}{2}; \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} \right\rangle + b\hbar\sqrt{3} \left| \frac{3}{2}\ \frac{3}{2}; \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} \right\rangle \quad (123)$$

Lo que nos da:

$$a = -\frac{\sqrt{3}}{2} \quad b = \frac{1}{2} \quad (124)$$

Similarmente, tenemos:

$$S_+|2\ 1\rangle = 2\hbar|2\ 2\rangle = 2\hbar \left| \frac{3}{2}\ \frac{3}{2}; \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} \right\rangle \quad (125)$$

$$= c\hbar\sqrt{3} \left| \frac{3}{2}\ \frac{3}{2}; \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} \right\rangle + d\hbar \left| \frac{3}{2}\ \frac{3}{2}; \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} \right\rangle \quad (126)$$

Lo que nos da:

$$d = \frac{1}{2} \quad c = \frac{\sqrt{3}}{2} \quad (127)$$

Entonces, tenemos:

$$|1\ 1\rangle = -\frac{\sqrt{3}}{2} \left| \frac{3}{2}\ \frac{3}{2}; \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}; \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} \right\rangle \quad (128)$$

$$|2\ 1\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} \left| \frac{3}{2}\ \frac{1}{2}; \frac{1}{2}\ \frac{1}{2} \right\rangle + \frac{1}{2} \left| \frac{3}{2}\ \frac{3}{2}; \frac{1}{2}\ -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (129)$$

Las relaciones inversas son:

$$\left| \frac{3}{2} \frac{1}{2}; \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{\sqrt{3}}{2} |2\ 1\rangle + \frac{1}{2} |1\ 1\rangle \quad (130)$$

$$\left| \frac{3}{2} \frac{3}{2}; \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{2} |2\ 1\rangle - \frac{\sqrt{3}}{2} |1\ 1\rangle \quad (131)$$

El estado evolucionado del sistema será:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{2} \left( \sqrt{3} e^{-iE_2 t/\hbar} |2\ 1\rangle + e^{-iE_1 t/\hbar} |1\ 1\rangle \right) \quad (132)$$

con:

$$E_1 = -\frac{5\alpha\hbar}{4} \quad (133)$$

$$E_2 = \frac{3\alpha\hbar}{4} \quad (134)$$

como los dos autovalores de energía. Finalmente, la probabilidad de encontrar al sistema en el estado:  $\left| \frac{3}{2} \frac{3}{2}; \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle$  es:

$$\mathcal{P} = \left| \left\langle \frac{3}{2} \frac{3}{2}; \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \middle| \psi(t) \right\rangle \right|^2 \quad (135)$$

$$= \frac{3}{4} \sin^2 \left[ \frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar} \right] \quad (136)$$

$$= \frac{3}{4} \sin^2 2\alpha t \quad (137)$$

### Problema 2:

De la representación de Pauli, inmediatamente podemos ver que:

$$|S_{1x} = \hbar/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_1 + |\downarrow\rangle_1) \quad (138)$$

$$|S_{1x} = -\hbar/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_1 - |\downarrow\rangle_1) \quad (139)$$

donde  $|\uparrow\rangle$  y  $|\downarrow\rangle$  son autofunciones de  $S_z$ . Las relaciones inversas son:

$$|\uparrow\rangle_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (|S_{1x} = \hbar/2\rangle + |S_{1x} = -\hbar/2\rangle) \quad (140)$$

$$|\downarrow\rangle_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (|S_{1x} = \hbar/2\rangle - |S_{1x} = -\hbar/2\rangle) \quad (141)$$

De forma completamente análoga, podemos ver que:

$$|S_{2y} = \hbar/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_2 + i|\downarrow\rangle_2) \quad (142)$$

$$|S_{2y} = -\hbar/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_2 - i|\downarrow\rangle_2) \quad (143)$$

De modo que se obtiene:

$$|\uparrow\rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(|S_{2y} = \hbar/2\rangle + |S_{2y} = -\hbar/2\rangle) \quad (144)$$

$$|\downarrow\rangle_2 = -\frac{i}{\sqrt{2}}(|S_{2y} = \hbar/2\rangle - |S_{2y} = -\hbar/2\rangle) \quad (145)$$

El estado  $m_s = 0$  en el triplete  $s = 1$  es:

$$|s = 1, m_s = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2) \quad (146)$$

$$= -\frac{1}{2}i(e^{-i\pi/4}|S_{1x} = \hbar/2\rangle|S_{2y} = \hbar/2\rangle - e^{i\pi/4}|S_{1x} = \hbar/2\rangle|S_{2y} = -\hbar/2\rangle) \quad (147)$$

$$+ e^{i\pi/4}|S_{1x} = -\hbar/2\rangle|S_{2y} = \hbar/2\rangle - e^{-i\pi/4}|S_{1x} = -\hbar/2\rangle|S_{2y} = -\hbar/2\rangle)$$

Ojo que hemos reducido:

$$e^{i\pi/4} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + i) \quad (148)$$

Finalmente, de la expresión anterior, es posible leer la posibilidad:

$$\mathcal{P} = |\langle 1\ 0 | S_{1x} = +, S_{2y} = - \rangle|^2 = 1/4 \quad (149)$$

**Problema 3:** No es difícil construir los autoestados de  $S^2$ ,  $S_z$ . Los mostraremos utilizando letras en negrita. Ellos son un singlete:

$$|\mathbf{0}\ \mathbf{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1, 0\rangle|1, 0\rangle - \frac{1}{2}(|1, 1\rangle|1, -1\rangle - |1, -1\rangle|1, 1\rangle) \quad (150)$$

y un triplete:

$$|\mathbf{1}\ \mathbf{1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0\rangle|1, 1\rangle - |1, 1\rangle|1, 0\rangle) \quad (151)$$

$$|\mathbf{1}\ \mathbf{0}\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}|1, 0\rangle|1, 0\rangle - \frac{1}{2}(|1, 1\rangle|1, -1\rangle - |1, -1\rangle|1, 1\rangle) \quad (152)$$

$$|\mathbf{1}\ -\mathbf{1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0\rangle|1, -1\rangle - |1, -1\rangle|1, 0\rangle) \quad (153)$$

y un quinteto:

$$|\mathbf{2}\ \mathbf{2}\rangle = |1, 1\rangle|1, 1\rangle \quad (154)$$

$$|\mathbf{2}\ \mathbf{1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0\rangle|1, 1\rangle + |1, 1\rangle|1, 0\rangle) \quad (155)$$

$$|\mathbf{2}\ \mathbf{0}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 1\rangle|1, -1\rangle + |1, -1\rangle|1, 1\rangle) \quad (156)$$

$$|\mathbf{2}\ -\mathbf{1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0\rangle|1, -1\rangle + |1, -1\rangle|1, 0\rangle) \quad (157)$$

$$|\mathbf{2}\ -\mathbf{2}\rangle = |1, -1\rangle|1, -1\rangle \quad (158)$$

De las relaciones de arriba, obtenemos:

$$|1, 1\rangle|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\mathbf{2}\ \mathbf{1}\rangle - |\mathbf{1}\ \mathbf{1}\rangle) \quad (159)$$

Entonces, la probabilidad de encontrar al sistema en cualquiera de los estados mostrados a la derecha es  $1/2$ .

# Ayudantía 4

Profesor: Max Bañados

Ayudante : Nicolás Pérez (nrperez@uc.cl)

## Resumen - Teoría de Perturbaciones independiente

Consideremos que hemos resuelto la ecuación de Schrodinger:

$$H^0 \psi_n^0 = E_n \psi_n^0 \quad (160)$$

Donde  $\psi_n^0$  es un set completo de autofunciones con los correspondientes autovalores  $E_n^0$ . Se cumple:

$$\langle \psi_n^0 | \psi_m^0 \rangle = \delta_{nm} \quad (161)$$

La idea es **perturbar** ligeramente modificando el potencial. Resolveremos entonces:

$$H \psi_n = E_n \psi_n \quad (162)$$

OJO! Lo que obtendremos siempre serán *soluciones aproximadas*. Ahora, escribimos el Hamiltoniano en función de un parámetro  $\lambda$  muy pequeño y expandimos la función de onda y la energía:

$$\begin{aligned} H &= H^0 + \lambda H' \\ \psi_n &= \psi_n^0 + \lambda \psi_n^1 + \lambda^2 \psi_n^2 + \dots \\ E_n &= E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 + \dots \end{aligned} \quad (163)$$

**Importante:**  $E_n^1$  es la *corrección a primer orden* del autovalor y  $\psi_n^1$  del autoestado.

Si reemplazamos en la ecuación original y jugamos un poco con los productos, obtenemos:

$$E_n^1 = \langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^0 \rangle \quad (164)$$

y la corrección del autoestado será:

$$\psi_n^1 = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle}{(E_n^0 - E_m^0)} \psi_m^0 \quad (165)$$

Así mismo, la energía a segundo orden quedará dada por:

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \quad (166)$$

## Problemas

1. Encuentre el resultado para la corrección a segundo orden de la energía del estado fundamental de un oscilador armónico perturbado por un término  $\lambda x^4$ , *i.e.*

$$E_0(\lambda) = 1 + \frac{3}{4}\lambda - \frac{21}{16}\lambda^2 + \dots$$

donde, en aras de la simplicidad, se ha escogido  $\hbar = 2M = k/2 = 1$ , siendo  $H_0$  el hamiltoniano de un oscilador armónico de masa  $M$  y constante  $k$ . De este modo el espectro no perturbado viene dado simplemente por  $E_n^0 = 2n + 1$ .

2. Un oscilador armónico 1-dimensional que posee carga eléctrica  $e$  se localiza en presencia de un campo eléctrico externo uniforme  $\vec{E} = E_0 \hat{x}$ . El hamiltoniano del sistema viene dado por:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - eEx$$

(a) Calcule los niveles de energía corregidos a segundo orden y la función de onda a primer orden en teoría de perturbaciones y compare con el resultado exacto. Es decir debe resolver el problema en forma exacta y verificar, en este caso, las bondades de teoría de perturbaciones.

3. Un sistema de dos niveles. Considere el hamiltoniano:

$$H = H_0 + \lambda H'$$

con

$$H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \quad (167)$$

y

$$H' = \begin{pmatrix} 0 & ia \\ -ia & 0 \end{pmatrix} \quad (168)$$

- (a) Resuelva en forma exacta los autovalores y autoestados.  
(b) Resuelva tanto los autovalores como las autofunciones a segundo orden usando teoría de perturbaciones. ¿Cómo se comparan los autovalores exactos con los que ha obtenido mediante teoría de perturbaciones?

## Soluciones

### Problema 1:

Consideremos las corrección a primer orden (corrección del n-esimo estado a primer orden):

$$E_n^{(1)} = \langle n|V|n\rangle \quad (169)$$

Recordemos que:

$$|n\rangle = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \cdot \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \cdot e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \cdot H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x\right) \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (170)$$

En nuestro caso:

$$\begin{aligned} |0\rangle &= \pi^{-1/4} e^{-x^2/2} \cdot H_0(x) \\ |0\rangle &= \pi^{-1/4} e^{-x^2/2} \end{aligned}$$

Luego, calculando explícitamente la integral, se obtiene:

$$\begin{aligned} E_0^{(1)} &= \int_{-\infty}^{\infty} \pi^{-1/4} e^{-x^2/2} x^4 \pi^{-1/4} e^{-x^2/2} dx \\ E_0^{(1)} &= \int_{-\infty}^{\infty} \pi^{-1/2} e^{-x^2} x^4 dx \\ E_0^{(1)} &= \pi^{-1/2} \cdot \left(\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\right) \\ E_0^{(1)} &= \frac{3}{4} \end{aligned}$$

Es útil recordar que:

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi} \quad (171)$$

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} t^{z-1} e^{-t} dt \quad (172)$$

Por otro lado, sabemos que la corrección a segundo orden viene dada por:

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{|^{(0)}\langle m|V|n\rangle|}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad (173)$$

En este problema lo que utilizaremos es  $V = \lambda x^4$ , donde  $x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger)$ . Además en las instrucciones del enunciado, se dice:  $\hbar = 2M = k/2 = 1$  y sabemos que  $\omega = \hbar k^2/2m$ , entonces:

$$x = \frac{1}{2}(a + a^\dagger)$$

$$V = \frac{\lambda}{16}(a + a^\dagger)^4$$

Por otro lado, la energía de un oscilador es  $E_n^{(0)} = 2n + 1$  (ojo que las constantes han sido aproximadas según las indicaciones de enunciado). Ahora, necesitamos resolver la segunda aproximación de energía:

$$E_0^{(2)} = \sum \frac{|^{(0)}\langle l|V|n\rangle^{(0)}|^2}{2 \cdot 0 + 1 - (2 \cdot l + 1)}$$

$$E_0^{(2)} = \sum \frac{|^{(0)}\langle l|V|n\rangle^{(0)}|^2}{-2l}$$

$$E_0^{(2)} = -\frac{1}{32} \sum \frac{|^{(0)}\langle l|(a + a^\dagger)^4|n\rangle^{(0)}|^2}{l}$$

Esta expresión es un tanto complicada por lo que primero resolveremos el argumento dentro del módulo cuadrado:

$$\begin{aligned} \langle l|(a + a^\dagger)^4|0\rangle &= \langle l|a^4|0\rangle + \langle l|a^3a^\dagger|0\rangle + \langle l|a^2a^\dagger a|0\rangle + \langle l|a^2(a^\dagger)^2|0\rangle + \langle l|aa^\dagger a^2|0\rangle + \langle l|(aa^\dagger)^2|0\rangle \\ &\quad + \langle l|a(a^\dagger)^2a|0\rangle + \langle l|a(a^\dagger)^3|0\rangle + \langle l|a^\dagger a^3|0\rangle + \langle l|a^\dagger a^2 a^\dagger|0\rangle + \langle l|(a^\dagger a)^2|0\rangle \\ &\quad + \langle l|a^\dagger a(a^\dagger)^2|0\rangle + \langle l|(a^\dagger)^2 a^2|0\rangle + \langle l|(a^\dagger)^2 aa^\dagger|0\rangle + \langle l|(a^\dagger)^3 a|0\rangle + \langle l|(a^\dagger)^4|0\rangle \end{aligned}$$

Ahora necesitamos calcular estas expresiones. Las separare considerando que hay un grupo que inmediatamente se elimina. Esto se provoca porque cuando  $a$  actúa sobre  $|0\rangle$  se anula. De modo que los siguientes términos se anulan inmediatamente:

$$\begin{aligned} \langle l|a^4|0\rangle &= 0 \\ \langle l|a^2a^\dagger a|0\rangle &= 0 \\ \langle l|aa^\dagger a^2|0\rangle &= 0 \\ \langle l|a(a^\dagger)^2a|0\rangle &= 0 \\ \langle l|(a^\dagger a)^2|0\rangle &= 0 \\ \langle l|a^\dagger a^3|0\rangle &= 0 \\ \langle l|(a^\dagger)^2 a^2|0\rangle &= 0 \\ \langle l|(a^\dagger)^3 a|0\rangle &= 0 \end{aligned}$$

Consideremos las siguientes propiedades:

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (174)$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (175)$$

Utilizando estas propiedades, calcularemos los productos restantes,



$$\begin{aligned}
\langle l|a^3a^\dagger|0\rangle &= \langle l|a^3|1\rangle = \langle l|a^2|0\rangle = 0 \\
\langle l|a^2(a^\dagger)^2|0\rangle &= \langle l|a^2a^\dagger|1\rangle = \langle l|a^2\sqrt{2}|2\rangle = 2\langle l|a|1\rangle = 2\langle l|0\rangle = 0 \\
\langle l|(aa^\dagger)^2|0\rangle &= \langle l|(aa^\dagger)|0\rangle = \langle l|0\rangle \\
\langle l|a(a^\dagger)^3|0\rangle &= \langle l|a(a^\dagger)^2|1\rangle = \sqrt{2}\langle l|aa^\dagger|2\rangle = 3\sqrt{2}\langle l|2\rangle \\
\langle l|a^\dagger a^2 a^\dagger|0\rangle &= \langle l|a^\dagger a^2|1\rangle = 0 \\
\langle l|a^\dagger a(a^\dagger)^2|0\rangle &= \langle l|a^\dagger aa^\dagger|1\rangle = \sqrt{2}\langle l|a^\dagger a|2\rangle = 2\langle l|a^\dagger|1\rangle = 2\sqrt{2}\langle l|2\rangle \\
\langle l|(a^\dagger)^2 a a^\dagger|0\rangle &= \langle l|(a^\dagger)^2 a|1\rangle = \langle l|(a^\dagger)^2|0\rangle = \sqrt{2}\langle l|2\rangle \\
\langle l|(a^\dagger)^4|0\rangle &= \langle l|(a^\dagger)^3|1\rangle = \sqrt{2}\langle l|(a^\dagger)^2|2\rangle = \sqrt{3\cdot 2}\langle l|a^\dagger|3\rangle = \sqrt{4!}\langle l|4\rangle = 2\sqrt{6}\langle l|4\rangle
\end{aligned}$$

Cuando introducimos estos productos, se nos introducen unas deltas de dirac. Finalmente lo que tenemos es:

$$\langle l|(a + a^\dagger)|0\rangle = \sqrt{4!}\delta_{l,4} + 6\sqrt{2}\delta_{l,2} \quad (176)$$

Calculando la corrección a segundo orden, obtenemos:

$$\begin{aligned}
E_0^{(2)} &= -\frac{1}{32} \sum_{m \neq n} \frac{|\sqrt{4!}\delta_{l,4} + 6\sqrt{2}\delta_{l,2}|^2}{l} \\
E_0^{(2)} &= -\frac{1}{32} \sum_{m \neq n} \frac{|2\sqrt{6}\delta_{l,4} + 6\sqrt{2}\delta_{l,2}|^2}{l} \\
E_0^{(2)} &= -\frac{1}{32} \left( \frac{24}{4} + \frac{72}{2} \right) \\
E_0^{(2)} &= -\frac{42}{32} \\
E_0^{(2)} &= -\frac{21}{16}
\end{aligned}$$

Con esto, ya se obtuvo la corrección requerida y coincide con la respuesta del enunciado.

### Problema 2:

En primer lugar, resolveremos el problema exacto, y luego procederemos a utilizar teoría de perturbaciones.

El problema que se tiene es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \left( \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - eEx \right) \psi = E\psi$$

Utilizaremos el siguiente cambio de variables:

$$x' = x - \left( \frac{eE}{m\omega^2} \right)$$

tenemos que realizar algunos cambios:

$$\begin{aligned}
\left(\frac{1}{2}m\omega^2 x^2 - eEx\right) &= \frac{1}{2}m\omega^2 \left[x' + \left(\frac{eE}{m\omega^2}\right)\right]^2 - eE \left[x' + \left(\frac{eE}{m\omega^2}\right)\right] \\
&= \frac{1}{2}m\omega^2 x'^2 + m\omega^2 x' \frac{eE}{m\omega^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{(eE)^2}{m^2\omega^4} - eEx' - \frac{(eE)^2}{m\omega^2} \\
&= \frac{1}{2}m\omega^2 x'^2 - \frac{1}{2} \frac{(eE)^2}{m\omega^2}
\end{aligned}$$

Entonces, la ecuación nos queda:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx'^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x'^2\psi = \left[E + \frac{1}{2} \frac{(eE)^2}{m\omega^2}\right] \psi$$

Esta es la ecuación de Schrodinger para el oscilador armónico simple, en  $x'$ . Entonces, la constante debe ser  $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ , con lo que tenemos:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega - \frac{1}{2} \frac{(eE)^2}{m\omega^2} \quad (177)$$

Ahora intentaremos resolver el problema con teoría de perturbaciones:

$$E_n^{(1)} = {}^{(0)}\langle n|V|n\rangle^{(0)} = -eE\langle n|x|n\rangle = 0$$

Esto se anula porque  $x$  puede ser reemplazado por los operadores de subida y bajada que genera que las autofunciones sean ortogonales.

Ahora debemos hacer la corrección a segundo orden, que está dado por la expresión:

$$E_n^{(2)} = (eE)^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle m|x|n\rangle|^2}{(n-m)\hbar\omega}$$

Ahora resolvemos (esto es simplemente reemplazar  $x$  por la combinación correspondiente de los operadores de subida y bajada):

$$\begin{aligned}
E_n^{(2)} &= \frac{(eE)^2}{\hbar\omega} \frac{\hbar}{2m\omega} \sum_{m \neq n} \frac{[\sqrt{n+1}\delta_{m,n+1} + \sqrt{n}\delta_{m,n-1}]}{(n-m)} \\
E_n^{(2)} &= \frac{(eE)^2}{2m\omega^2} \sum_{m \neq n} \frac{[(n+1)\delta_{m,n+1} + n\delta_{m,n-1}]}{(n-m)} \\
E_n^{(2)} &= \frac{(eE)^2}{2m\omega^2} \left[ \frac{(n+1)}{n-(n+1)} + \frac{n}{n-(n-1)} \right] \\
E_n^{(2)} &= \frac{(eE)^2}{2m\omega^2} [-(n+1) + n] \\
E_n^{(2)} &= -\frac{(eE)^2}{2m\omega^2}
\end{aligned}$$

Como hemos notado, obtenemos el mismo resultado considerando el problema exacto o resolviendolo por teoría de perturbaciones

**Problema 3:**

La solución exacta de este problema la encontraremos en primer lugar buscando los autovalores del Hamiltoniano:

$$\det \begin{pmatrix} E_1 - E & i\lambda a \\ -i\lambda a & E_2 - E \end{pmatrix} = 0 \quad (178)$$

Asumiremos que  $E_2 > E_1$  de modo que  $|E_2 - E_1| = E_2 - E_1$ . Ahora, el problema del determinante es simplemente resolver la siguiente ecuación cuadrática:

$$E^2 - (E_1 + E_2)E + E_1E_2 - \lambda^2 a^2 = 0$$

Tendremos que las soluciones son dos y están dadas por:

$$E_{\pm} = \frac{1}{2}(E_1 + E_2) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_2 - E_1)^2 + 4\lambda^2 a^2}$$

Si expandimos en potencias de  $\lambda$ , obtenemos:

$$\begin{aligned} E_+ &= \frac{1}{2}(E_1 + E_2) + \frac{1}{2}(E_2 - E_1) + \frac{\lambda^2 a^2}{E_2 - E_1} \\ &= E_2 + \frac{\lambda^2 a^2}{E_2 - E_1} \end{aligned}$$

Los autovectores tendrán la forma:

$$\psi = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \quad (179)$$

Donde:

$$(E_1 - E_{\pm})\alpha_{\pm} + i\lambda a\beta_{\pm} = 0$$

de modo que:

$$\alpha_{\pm} = \frac{-i\lambda a}{E_1 - E_{\pm}}\beta_{\pm}$$

Ahora, tenemos:

$$\psi_{\pm} = C_{\pm} \begin{pmatrix} -i\lambda a \\ E_1 - E_{\pm} \end{pmatrix}$$

Eligiendo la fase en forma arbitraria, nos queda:

$$|C_{\pm}| = \frac{1}{\sqrt{(E_1 - E_{\pm})^2 + \lambda^2 a^2}}$$

Para comparar con la teoría de perturbaciones, permitiremos que  $\lambda \rightarrow 0$  y tendremos que:

$$\begin{aligned}
E_1 - E_+ &\rightarrow -(E_2 - E_1) - \frac{\lambda^2 a^2}{E_2 - E_1} \\
E_1 - E_- &\rightarrow \frac{\lambda^2 a^2}{E_2 - E_1} \\
C_+ &\rightarrow (E_2 - E_1) + \frac{\lambda^2 a^2}{2(E_2 - E_1)} \\
C_- &\rightarrow \lambda a
\end{aligned}$$

De modo que con la fase arbitraria tenemos:

$$\begin{aligned}
\psi_+ &\rightarrow \begin{pmatrix} \frac{i\lambda a}{E_2 - E_1} \\ 1 \end{pmatrix} \\
\psi_- &\rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{i\lambda a}{E_2 - E_1} \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Resolveremos ahora por medio de teoría de perturbaciones

Los autovalores a orden cero son:

$$\begin{aligned}
E_1^{(0)} &= E_1 \\
E_2^{(0)} &= E_2
\end{aligned}$$

y los autovectores:

$$\begin{aligned}
\psi_1^{(0)} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\
\psi_2^{(0)} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

La primera corrección a los autovalores es cero dado que:

$$\begin{aligned}
\langle \psi_1^{(0)} | H' | \psi_1^{(0)} \rangle &= 0 \\
\langle \psi_2^{(0)} | H' | \psi_2^{(0)} \rangle &= 0
\end{aligned}$$

Por otro lado, la primera corrección para la función de onda:

$$\begin{aligned}
\psi_1^{(1)} &= \frac{\psi_2^{(0)} \langle \psi_2^{(0)} | H' | \psi_1^{(0)} \rangle}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \\
&= \frac{-ia}{E_1 - E_2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\
\psi_2^{(1)} &= \frac{\psi_1^{(0)} \langle \psi_1^{(0)} | H' | \psi_2^{(0)} \rangle}{E_1^{(0)} - E_2^{(0)}} \\
&= \frac{ia}{E_1 - E_2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

# Problemas Extra

Derive en detalle la expresión para la corrección de la función de onda en segundo orden de teoría de perturbaciones (esquema de Rayleigh-Schrödinger) en el caso estacionario no degenerado.

$$|n\rangle^{(2)} = \sum_{m, l \neq n} \frac{|l^{(0)}\rangle \langle l^{(0)}|V|m^{(0)}\rangle \langle m^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle}{(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})} - \sum_{l \neq n} \frac{|l^{(0)}\rangle \langle l^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle \langle n^{(0)}|V|n^{(0)}\rangle}{(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})^2} \quad (180)$$

## Solución

Ya fue resuelta en clases las expresiones para la corrección a primer orden de la energía y de la onda. Dadas por:

$$E_n^{(1)} = {}^{(0)}\langle n|V|n\rangle^{(0)} \quad (181)$$

$$|n\rangle^{(1)} = \sum \frac{|l\rangle^{(0)} {}^{(0)}\langle l|V|n\rangle^{(0)}}{E_n^{(0)} - E_l} \quad (182)$$

$$(183)$$

Ahora, consideremos la corrección para segundo orden:

$$(H_0 - E_n^{(0)})|n\rangle^{(2)} + (V - E_n^{(1)})|n\rangle^{(1)} - E_n^{(2)}|n\rangle^{(0)} \quad (184)$$

Reemplazaremos las primeras ecuaciones en la última, obteniendo:

$$(H_0 - E_n^{(0)})|n\rangle^{(2)} + (V - {}^{(0)}\langle n|V|n\rangle^{(0)}) \sum \frac{|l\rangle^{(0)} {}^{(0)}\langle l|V|n\rangle^{(0)}}{E_n^{(0)} - E_l} - E_n^{(2)}|n\rangle^{(0)} = 0 \quad (185)$$

Ahora bracketeamos por la izquierda con  ${}^{(0)}\langle m|$ , tomando  $m \neq n$ . Haciendo esto, obtenemos:

$${}^{(0)}\langle m|H_0 - E_n^{(0)}|n\rangle^{(2)} + \sum \frac{{}^{(0)}\langle m|V|l\rangle^{(0)} {}^{(0)}\langle l|V|n\rangle^{(0)}}{E_n^{(0)} - E_l} - E_n^{(2)} {}^{(0)}\langle m|n\rangle^{(0)} = 0 \quad (186)$$

Además, sabemos del problema original, que:

$$\begin{aligned} H_0|n\rangle^{(0)} &= E_n^{(0)}|n\rangle^{(0)} \\ (H_0 - E_n^{(0)})|n\rangle^{(0)} &= 0 \end{aligned}$$

Si en esta ecuación bracketeamos por la izquierda con  ${}^{(0)}\langle m|$ , con lo que obtenemos:

$$(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) {}^{(0)}\langle m|n\rangle^{(0)} = 0 \quad (187)$$

Como  $m \neq n$ :

$$\begin{aligned} E_m^{(0)} - E_n^{(0)} &\neq 0 \\ \rightarrow {}^{(0)}\langle m|n\rangle^{(0)} &= 0 \end{aligned}$$

Ahora, utilicemos la ecuación (13), que nos queda:

$$(E_m^{(0)} - E_n^{(0)})^{(0)} \langle m|n \rangle^{(2)} + \sum \frac{^{(0)}\langle l|V|n \rangle^{(0)} \ ^{(0)}\langle m|V|l \rangle^{(0)} - ^{(0)}\langle l|V|n \rangle^{(0)} \ ^{(0)}\langle m|^{(0)}\langle n|V|n \rangle^{(0)}|l \rangle^{(0)}}{(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} = 0 \quad (188)$$

$$1^{er} \text{ termino} + \sum \frac{^{(0)}\langle l|V|n \rangle^{(0)} \ ^{(0)}\langle m|V|l \rangle^{(0)} \ ^{(0)}\langle m|m \rangle^{(0)} - ^{(0)}\langle l|V|n \rangle^{(0)} \ ^{(0)}\langle n|V|n \rangle^{(0)} \ ^{(0)}\langle m|l \rangle^{(0)}}{(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} = 0 \quad (189)$$

Luego, reordenando tenemos:

$$(E_n^{(0)} - E_m^{(0)}) \ ^{(0)}\langle m|n \rangle^{(0)} = \sum \left( \frac{^{(0)}\langle l|V|m \rangle^{(0)} \ ^{(0)}\langle m|V|n \rangle^{(0)} \ ^{(0)}\langle m|l \rangle^{(0)}}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} - \frac{^{(0)}\langle l|V|m \rangle^{(0)} \ ^{(0)}\langle m|V|n \rangle^{(0)} \ ^{(0)}\langle m|l \rangle^{(0)}}{E_n^{(0)} - E_l^{(0)}} \right) \quad (190)$$

Si bracketeamos nuevamente por la izquierda con  $^{(0)}\langle m|$  obtenemos la expresión final:

$$|n \rangle^{(2)} = \sum_{m, l \neq n} \left( \frac{^{(0)}\langle l|V|n \rangle^{(0)} \ ^{(0)}\langle m|V|n \rangle^{(0)}|l \rangle^{(0)}}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})} \right) - \sum_{l \neq n} \left( \frac{^{(0)}\langle l|V|n \rangle^{(0)} \ ^{(0)}\langle n|V|n \rangle^{(0)}|l \rangle^{(0)}}{(E_n^{(0)} - E_l^{(0)})^2} \right) \quad (191)$$

Con lo que hemos demostrado lo solicitado.

# Ayudantía 5

*Profesor: Max Bañados*

*Ayudante : Nicolás Pérez (nrperez@uc.cl)*

## Problemas

1. Reemplace el núcleo de un átomo de hidrógeno con una distribución de carga eléctrica uniforme de radio  $R \ll a_0$ . ¿Cuál es el potencial electrostático resultante  $V_R(r)$ ? La diferencia:

$$\Delta V(r) = V_R(r) - \left( -\frac{e^2}{r} \right) \quad (192)$$

será proporcional a la extensión  $R$  asumida del núcleo.

- (a) Considerando  $\Delta V$  como una perturbación, calcule la corrección a la energía del ground-state a primer orden.
  - (b) Haga lo mismo para los estados  $2s$  y  $2p$
2. **Teoría de perturbaciones degenerada - Oscilador armónico bidimensional:** Considere un oscilador armónico bidimensional descrito por el Hamiltoniano:

$$H_0 = \hbar\omega(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2) \quad (193)$$

Calcule el efecto a segundo orden de la perturbación:

$$H' = \lambda(a_1^\dagger a_1^\dagger a_2 a_2 + a_2^\dagger a_2^\dagger) \quad (194)$$

sobre los segundos estados excitados y a primer orden sobre los terceros niveles excitados. ¿Cuáles son los efectos de la perturbación sobre el *ground-state* y los primeros estados excitados?

- 3.

## Soluciones

### Problema 1:

En primer lugar, anotaremos identidades importantes. En la parte (a) necesitaremos:

$$I_n(\lambda) = \int_0^\lambda dx x^n e^{-x} = n! \left( 1 - e^{-\lambda} \sum_{v=0}^n \frac{\lambda^v}{v!} \right) \quad (195)$$

En la parte (b), será necesario, conocer las funciones de onda correspondiente:

$$\psi_{100}(r) = (\pi a_0^3)^{-1/2} e^{-r/a_0} \quad (196)$$

$$\psi_{200}(r) = (32\pi a_0^3)^{-1/2} (2 - r/a_0) e^{-r/2a_0} \quad (197)$$

$$\psi_{210}(r) = (32\pi a_0^3)^{-1/2} (r/a_0) e^{-r/2a_0} \quad (198)$$

Ahora, asumiendo una densidad de carga eléctrica uniforme, tenemos:

$$\rho = \frac{|e|}{\frac{4}{3}\pi R^3} \quad (199)$$

y si utilizamos la ley de Coulomb para el potencial electrostático, tenemos:

$$V_R(r) = -\frac{3e^2}{4\pi R^3} \int_{r \leq R} d^3 r' \frac{1}{|\vec{r}' - \vec{r}|} \quad (200)$$

$$= -\frac{3e^2}{2R^3} \int_r^R dr' r'^2 \int_{-1}^1 (d\cos\theta) \frac{1}{\sqrt{r^2 + r'^2 - 2rr'\cos\theta}} \quad (201)$$

O, separando por sectores:

$$V_R(r) = -\frac{e^2}{r} \quad r > R \quad (202)$$

$$V_R(r) = -\frac{e^2}{R} \left[ \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \left( \frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad r \leq R \quad (203)$$

La diferencia con el potencial de coulomb tipo punto estándar es:

$$\Delta V(r) = 0 \quad r > R \quad (204)$$

$$\Delta V(r) = e^2 \left( \frac{1}{r} + \frac{1}{2} \frac{r^2}{R^3} - \frac{3}{2R} \right) \quad r \leq R \quad (205)$$

Entonces, la corrección a primer orden a la energía del ground-state será

$$E_{10}^{(1)} = \langle 100 | \Delta V | 100 \rangle \quad (206)$$

$$= \frac{1}{4\pi a_0^3} \int d^3 r e^{-2r/a_0} \Delta V(r) \quad (207)$$

$$= \frac{e^2}{a_0} \int_0^\lambda dx e^{2x} \left( x + \frac{x^4}{2\lambda^3} - \frac{3x^2}{2\lambda} \right) \quad (208)$$



donde hemos introducido el parámetro:

$$\lambda = \frac{R}{a_0} \ll 1 \quad (209)$$

Resolviendo la integral, obtenemos:

$$E_{10}^{(1)} = \frac{e^2}{8a_0\lambda^3} [3 - 3\lambda^2 + 2\lambda^3 - e^{-2\lambda}(3 + 6\lambda + 3\lambda^2)] \quad (210)$$

Expandiendo la exponencial cerca de  $\lambda = 0$  y manteniendo términos hasta 5 orden, obtenemos:

$$E_{10}^{(1)} = -\frac{e^2}{2a_0} \left[ \frac{4\lambda^2}{5} + O(\lambda^3) \right] \quad (211)$$

(b) La corrección al estado  $2s$  es:

$$E_{20}^{(1)} = \frac{1}{32\pi a_0^3} \int d^3r \left( 2 - \frac{r}{a_0} \right)^2 e^{-r/a_0} \Delta V(r) \quad (212)$$

$$= \frac{e^2}{8a_0} \int_0^\lambda dx (2-x)^2 e^{-x} \left( x + \frac{x^2}{2\lambda^3} - \frac{3x^2}{2\lambda} \right) \quad (213)$$

Resolviendo la integral, tenemos:

$$E_{20}^{(1)} = \frac{e^2}{2a_0} \left( \frac{1}{8\lambda^3} \right) I(\lambda) \quad (214)$$

donde

$$I(\lambda) = 336 - 24\lambda^2 + 4\lambda^3 - e^{-\lambda}(336 + 336\lambda + 144\lambda^2 + 36\lambda^3 + 6\lambda^4) \quad (215)$$

En el límite de  $\lambda$  pequeño esto nos da:

$$E_{20}^{(1)} \approx \frac{e^2}{2a_0} \left( \frac{\lambda^2}{10} \right) \quad (216)$$

La correspondiente corrección al estado  $2p$  es:

$$E_{21}^{(1)} = \frac{1}{32\pi a_0^3} \int d^3r \left( \frac{r}{a_0} \right)^2 e^{-r/a_0} \cos^2\theta \Delta V(r) \quad (217)$$

Entonces,

$$E_{21}^{(1)} = \frac{e^2}{24a_0} \int_0^\lambda dx x^2 \left( x + \frac{x^4}{2\lambda^3} - \frac{3x^2}{2\lambda} \right) = \frac{e^2}{48a_0\lambda^3} [720 - 72\lambda^2 + 12\lambda^3 - e^{-\lambda}(720 + 720\lambda + 288\lambda^2 + 60\lambda^3 + 6\lambda^4)] \quad (218)$$

Expandiendo, tenemos que:

$$E_{21}^{(1)} \approx -\frac{e^2}{2a_0} \left( \frac{\lambda^4}{240} \right) \quad (219)$$

Nótese que la corrección al estado  $2p$  es fuertemente suprimida en comparación con la de los estados  $s$ :

$$\left| \frac{E_{20}^{(1)}}{E_{21}^{(1)}} \right| \approx \frac{\lambda^2}{24} \quad (220)$$

**Problema 2:**

Recordar: Básicamente, se trata de buscar los autovalores de la matriz de  $n \times n$ :

$$W_{ij} = \langle \psi_i^0 | H' | \psi_j^0 \rangle$$

En primer lugar, debemos suponer isotropía. Tenemos:

$$H_0 = \hbar\omega(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2) \quad (221)$$

$$H' = \lambda(a_1^\dagger a_1^\dagger a_2 a_2 + a_2^\dagger a_2^\dagger a_1 a_1) \quad (222)$$

Tenemos que:

$$\hat{n} = a^\dagger a \quad (223)$$

$$\hat{n}|n\rangle = n|n\rangle \quad (224)$$

Y si separamos por ambas direcciones:

$$H_{0(1)} = \hbar\omega(a_1^\dagger a_1) \rightarrow \text{direccion } x \quad (225)$$

$$H_{0(2)} = \hbar\omega(a_2^\dagger a_2) \rightarrow \text{direccion } y \quad (226)$$

$$(227)$$

Luego, tenemos:

$$H_{0(1)} + H_{0(2)} = \hbar\omega(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2) \quad (228)$$

y aplicando las relaciones anteriores:

$$H_{0(1)}|n_1\rangle^{(0)} = \hbar\omega(a_1^\dagger a_1)|n_1\rangle = \hbar\omega n_1|n_1\rangle \quad (229)$$

$$H_{0(2)}|n_2\rangle^{(0)} = \hbar\omega(a_2^\dagger a_2)|n_2\rangle = \hbar\omega n_2|n_2\rangle \quad (230)$$

Luego, naturalmente se deriva:

$$H_0|n_1, n_2\rangle^{(0)} = \hbar\omega(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2)|n_1, n_2\rangle^{(0)} \quad (231)$$

$$H_0|n_1, n_2\rangle^{(0)} = \hbar\omega(n_1 + n_2)|n_1, n_2\rangle^{(0)} \quad (232)$$

Luego, tenemos que:

$$|0, 0\rangle \text{ con } E_0 = 0 \text{ groundstate} \quad (233)$$

$$|1, 0\rangle, |0, 1\rangle \quad E_1 = \hbar\omega \quad 1er \text{ Nivel excitado} \quad (234)$$

$$|1, 1\rangle, |2, 0\rangle, |0, 2\rangle \quad E_2 = 2\hbar\omega \quad 2o \text{ Nivel excitado} \quad (235)$$

Segundo Nivel:

$$|2, 0\rangle^{(0)}, |1, 1\rangle^{(0)}, |0, 2\rangle^{(0)} \quad (236)$$

Consideramos el cambio de Base:

$$a_{11}|2, 0\rangle^{(0)} + a_{12}|1, 1\rangle + a_{13}|0, 2\rangle \rightarrow \psi_1 \quad (237)$$

$$a_{21}|2, 0\rangle^{(0)} + a_{22}|1, 1\rangle + a_{23}|0, 2\rangle \rightarrow \psi_2 \quad (238)$$

$$a_{31}|2, 0\rangle^{(0)} + a_{32}|1, 1\rangle + a_{33}|0, 2\rangle \rightarrow \psi_3 \quad (239)$$

Entonces, tenemos dos matrices importantes:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \quad V = \begin{pmatrix} H'_{11} & H'_{12} & H'_{13} \\ H'_{21} & H'_{22} & H'_{23} \\ H'_{31} & H'_{32} & H'_{33} \end{pmatrix} \quad (240)$$

Por otro lado, tenemos las ecuaciones:

$$a|0\rangle = 0 \quad (241)$$

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad (242)$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (243)$$

Además:

$$H'_{22} = {}^{(0)}\langle 1, 1|a_1^\dagger a_1^\dagger a_2 a_2 + a_2^\dagger a_2^\dagger a_1 a_1|1, 1\rangle\lambda \quad (244)$$

$$= [{}^{(0)}\langle 1, 1|a_1^\dagger a_1^\dagger a_2 a_2|1, 1\rangle + \langle 1, 1|a_2^\dagger a_2^\dagger a_1 a_1|1, 1\rangle]{}^{(0)}\lambda \quad (245)$$

$$= 0 \quad (246)$$

y otro término de la matriz está dado por:

$$H'_{13} = {}^{(0)}\langle 2, 0|H'|0, 2\rangle \quad (247)$$

Es posible calcular:

$$H'_{13} = \lambda\{{}^{(0)}\langle 2, 0|a_1^\dagger a_1^\dagger a_2 a_2|0, 2\rangle + \langle 2, 0|a_2^\dagger a_2^\dagger a_1 a_1|0, 2\rangle\} \quad (248)$$

$$= \lambda\sqrt{2}\sqrt{1}\sqrt{1}\sqrt{2}\langle 2, 0|2, 0\rangle \quad (249)$$

$$= 2\lambda \quad (250)$$

Se resuelve el problema de autovalores:

$$V \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} = v \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \end{pmatrix} \quad (251)$$

Resolviendo el problema de autovalores:

$$\begin{vmatrix} -v & 0 & 2\lambda \\ 0 & -v & 0 \\ 2\lambda & 0 & -v \end{vmatrix} = -v(x^2 - 4\lambda^2) = 0 \quad (252)$$

Lo que nos arroja los autovalores y autovectores siguientes:

$$x_1 = 0 \quad (253)$$

$$x_2 = 2\lambda \quad (254)$$

$$x_3 = -2\lambda \quad (255)$$

y autovectores:

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad v_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad v_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (256)$$

Entonces, la corrección a los niveles de energía son:

$$R_{2r} = 2\hbar\omega + r2\lambda \quad (257)$$

donde  $r = +1, 0, -1$

**Problema 3:**

# Ayudantía 6

Profesor: Max Bañados

Ayudante : Nicolás Pérez (nrperez@uc.cl)

## Resumen Método Variacional - Teoría de perturbaciones degenerada

La idea del método variacional es básicamente buscar al *tanteo* la energía del ground-state  $E_{ground}$ . Se utiliza cuando no es posible resolver la ecuación de Schrödinger (independiente del tiempo).

Teorema:

$$E_{ground} \leq \langle \psi | H \psi \rangle = \langle H \rangle \quad (258)$$

En este método, a la función  $\psi$  se le denomina función de prueba. Luego de calcular el valor de expectación, se procede a buscar los puntos críticos de este para extremizar.

## Problemas

1. Haga una estimación variacional para el nivel más bajo de energía de una partícula de masa  $m$  confinada en una caja unidimensional de largo  $a$ . Para ello considere la función de prueba (Ansatz)  $(\phi(x) = Ax^n(a-x)^n)$ . Siendo  $n$  un parámetro variacional. ¿Por qué es un Ansatz razonable?

Compare la energía variacional óptima con el valor exacto  $E_1 = (\pi^2 \hbar^2)/(2ma^2)$ .

Compare también el valor no óptimo obtenido con  $n = 1$

Se cumple:

$$\int_0^1 x^{m-1}(1-x)^{n-1} dx = B(m, n) = \frac{\Gamma(m)\Gamma(n)}{\Gamma(m+n)}$$

También le puede ser de utilidad  $\Gamma(a+1) = a\Gamma(a)$

2. Considere las correcciones perturbativas que discutiéramos en clases para un caso degenerado. Considere para ser más explícitos un sistema en que los dos primeros estados  $|1\rangle$  y  $|2\rangle$  son degenerados. Muestre que la corrección a primer orden para la función de onda  $|1\rangle^{(1)}$  viene dada por

$$|1\rangle^{(1)} = \sum_{n \neq (1,2)} \left\{ \frac{\langle \psi_2 | V | n \rangle \langle n | V | \psi_1 \rangle}{E_1^0 - E_n^0 (v_+ - v_-)} |\psi_2\rangle + \frac{|n\rangle \langle n | V | \psi_1 \rangle}{E_1^0 - E_n^0} \right\}$$

así como una expresión análoga para  $|2\rangle^{(1)}$ . En la fórmula anterior  $v_+$  Y  $v_-$  denotan los autovalores que provienen de diagonalizar la matriz secular, siendo  $|\psi_1\rangle$  y  $|\psi_2\rangle$  los correspondientes autovectores.

¿Cuál es la expresión para la corrección a primer orden a la función de onda de los otros estados  $|n\rangle$ ,  $n \neq 1, 2$ ?

Encuentre la corrección a segundo orden a la energía de los dos estados originalmente degenerados ( $n = 1, n = 2$ ).

3. Considere el nivel  $n = 2$  del hidrógeno. Se aplica un campo eléctrico constante en la dirección  $\hat{z}$ . Encuentre las correcciones inducidas por esta perturbación en el espectro de los cuatro estados (originalmente degenerados). Para ello, obtenga la matriz secular. Diagonalícela y obtenga las bases de orden cero que diagonaliza la perturbación, Infórmese sobre las funciones de onda relevantes.

## Soluciones

### Problema 1:

Para resolver este problema, lo que debemos resolver es el nuevo Hamiltoniano con una función de prueba. Para ello intentaremos “adivinar” el estado base  $E_0$  considerando esta función de prueba que contiene un parámetro variacional. Utilizaremos:

$$\bar{H} = \frac{\langle \tilde{0} | H | \tilde{0} \rangle}{\langle \tilde{0} | \tilde{0} \rangle} \quad (259)$$

En este caso, tendremos que resolver por calculo directo la integral, que es:

$$\bar{H} = \frac{\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right) \int_0^a Ax^n(a-x)^n \frac{d^2}{dx^2} Ax^n(a-x)^n}{\int_0^a A^2 x^{2n}(a-x)^{2n}} \quad (260)$$

$$\bar{H} = \left(\frac{-\hbar^2}{2m}\right) \frac{I_1}{I_2} \quad (261)$$

Resolveremos en primer lugar la integral superior  $I_1$ , que expandiendo, queda:

$$I_1 = \int_0^a n(n-1)x^{2n-2}(a-x)^{2n} - 2n^2x^{2n-1}(a-x)^{2n-1} + n(n-1)x^{2n}(a-x)^{2n-2} dx \quad (262)$$

Ahora procederemos a resolver cada término por separado:

$$\begin{aligned} I_{1,1} &= \int_0^a n(n-1)x^{2n-2}(a-x)^{2n} dx \\ \frac{x}{a} &= u \rightarrow \frac{dx}{a} = du \\ I_{1,1} &= n(n-1) \int_0^1 (au)^{2n-2} a^{2n} (1-u)^{2n} n a du \\ I_{1,1} &= n(n-1) \int_0^1 a^{4n-1} u^{2n-2} (1-u)^{2n} du \\ I_{1,1} &= n(n-1) a^{4n-1} B(2n-1, 2n+1) \\ I_{1,1} &= n(n-1) a^{4n-1} \left( \frac{\Gamma(2n-1)\Gamma(2n+1)}{\Gamma(4n)} \right) \\ I_{1,1} &= n(n-1) a^{4n-1} \left( \frac{(2n-2)!(2n)!}{(4n-1)!} \right) \end{aligned}$$

Ahora el segundo término de  $I_1$ :

$$\begin{aligned}
I_{1,2} &= - \int_0^a 2n^2 x^{2n-1} (a-x)^{2n-1} dx \\
\frac{x}{a} &= u \rightarrow \frac{dx}{a} = du \\
I_{1,2} &= -2n^2 \int_0^1 (au)^{2n-1} a^{2n-1} (1-u)^{2n-1} a du \\
I_{1,2} &= -2n^2 \int_0^1 a^{4n-1} u^{2n-1} (1-u)^{2n-1} du \\
I_{1,2} &= -2n^2 a^{4n-1} B(2n, 2n) \\
I_{1,2} &= -2n^2 a^{4n-1} \left( \frac{\Gamma(2n)\Gamma(2n)}{\Gamma(4n)} \right) \\
I_{1,2} &= -2n^2 a^{4n-1} \left( \frac{(2n-1)!(2n-1)!}{(4n-1)!} \right)
\end{aligned}$$

Finalmente nos queda el tercer término de  $I_1$ :

$$\begin{aligned}
I_{1,3} &= \int_0^a n(n-1)x^{2n}(a-x)^{2n-2} dx \\
\frac{x}{a} &= u \rightarrow \frac{dx}{a} = du \\
I_{1,3} &= n(n-1) \int_0^1 a^{2n} u^{2n} a^{2n-2} (1-u)^{2n-2} a du \\
I_{1,3} &= n(n-1) \int_0^1 a^{4n-1} u^{2n} (1-u)^{2n-2} du \\
I_{1,3} &= n(n-1) a^{4n-1} B(2n+1, 2n-1) \\
I_{1,3} &= n(n-1) a^{4n-1} \left( \frac{\Gamma(2n+1)\Gamma(2n-1)}{\Gamma 4n} \right) \\
I_{1,3} &= n(n-1) a^{4n-1} \left( \frac{(2n)!(2n-2)!}{(4n-1)!} \right)
\end{aligned}$$

Ahora, lo que debemos hacer es calcular la integral inferior  $I_2$ :



$$\begin{aligned}
I_2 &= \int_0^a x^{2n}(a-x)^{2n} dx \\
\frac{x}{a} &= u \rightarrow \frac{dx}{a} = du \\
I_2 &= a^{2n} u^{2n} a^{2n} (1-u)^{2n} a dx \\
I_2 &= a^{4n+1} \int_0^1 u^{2n} (1-u)^{2n} dx \\
I_2 &= a^{4n+1} B(2n+1, 2n+1) \\
I_2 &= a^{4n+1} \left( \frac{\Gamma(2n+1)\Gamma(2n+1)}{\Gamma(4n+2)} \right) \\
I_2 &= a^{4n+1} \left( \frac{(2n)!(2n)!}{(4n+1)!} \right)
\end{aligned}$$

Ahora, podemos calcular  $I = (I_1/I_2)$ :

$$\begin{aligned}
I &= \frac{I_{1,1} + I_{1,2} + I_{1,3}}{I_2} \\
I &= \frac{n(n-1)a^{4n-1} \left( \frac{(2n-2)!(2n)!}{(4n-1)!} \right) - 2n^2 a^{4n-1} \left( \frac{(2n-1)!(2n-1)!}{(4n-1)!} \right) + n(n-1)a^{4n-1} \left( \frac{(2n)!(2n-2)!}{(4n-1)!} \right)}{a^{4n+1} \left( \frac{(2n)!(2n)!}{(4n+1)!} \right)} \\
I &= \frac{n(n-1)a^{4n-1} \left( \frac{(2n-2)!}{(4n-1)!} \right) - na^{4n-1} \left( \frac{(2n-1)!}{(4n-1)!} \right) + n(n-1)a^{4n-1} \left( \frac{(2n-2)!}{(4n-1)!} \right)}{a^{4n+1} \left( \frac{(2n)!}{(4n+1)!} \right)} \\
I &= \frac{n(n-1)a^{4n-1}(2n-2)! - na^{4n-1}(2n-1)! + n(n-1)a^{4n-1}(2n-2)!}{a^{4n+1}(2n)!} \cdot (4n)(4n+1) \\
I &= \frac{n(n-1)(2n-2)! - n(2n-1)! + n(n-1)(2n-2)!}{(2n)!} \cdot \frac{(4n)(4n+1)}{a^2} \\
I &= \frac{n(n-1)(2n-2)! - n(2n-1)(2n-2)! + n(n-1)(2n-2)!}{(2n)(2n-1)(2n-2)!} \cdot \frac{(4n)(4n+1)}{a^2} \\
I &= \frac{n(n-1) - n(2n-1) + n(n-1)}{(2n)(2n-1)} \cdot \frac{(4n)(4n+1)}{a^2} \\
I &= -\frac{(4n)(4n+1)}{a^2 2(2n-1)}
\end{aligned}$$

Finalmente obtenemos el resultado que buscábamos que es:

$$\bar{H} = \left( \frac{\hbar^2}{2ma^2} \right) \frac{(4n)(4n+1)}{2(2n-1)} \quad (263)$$

Para continuar con el método variacional, debemos minimizar este hamiltoniano dado con la función de prueba, de modo que:

$$\begin{aligned}\frac{d\bar{H}}{dn} &= 0 \\ \frac{d\bar{H}}{dn} &= \left(\frac{\hbar^2}{2ma^2}\right) \left[\frac{(4 \cdot 4n + 4(4n+1))(2n-1) - (4n+1)(4n)2}{2(2n-1)^2}\right]\end{aligned}$$

Luego, tenemos que el numerador debe anularse (también es solución que el denominador se indefina pero ese valor obtenido indefina la función hallada de modo que la desechemos):

$$\begin{aligned}(32n+4)(2n-1) - 2(16n^2+4n) &= 0 \\ 32n(2n-1) + 4(2n-1) - 32n^2 - 8n &= 0 \\ 32n^2 - 32n - 4 &= 0 \\ 8n^2 - 8n - 1 &= 0\end{aligned}$$

Lo que arroja una solución:

$$\begin{aligned}n_{\pm} &= \frac{8 \pm \sqrt{64 - 4 \cdot 8 \cdot (-1)}}{16} \\ n_{\pm} &= \frac{8 \pm \sqrt{96}}{16} \\ n_+ &= 1.1123 \\ n_- &= -0.1123\end{aligned}$$

Por último, nos queda evaluar:

Utilizando n=1 (no óptimo), se obtiene:

$$\bar{H} = 10 \left(\frac{\hbar^2}{2ma^2}\right) \quad (264)$$

Utilizando n=1.1123 resuelto con el método variacional, se obtiene:

$$\bar{H} = 9.8989 \left(\frac{\hbar^2}{2ma^2}\right) \quad (265)$$

Utilizando n=-0.1123 resuelto con el método variacional (descartaremos este valor), se obtiene:

$$\bar{H} = -0.1 \left(\frac{\hbar^2}{2ma^2}\right) \quad (266)$$

Mientras que con el valor original  $\pi^2$ , se obtiene:

$$\bar{H} = 9.8696 \left( \frac{\hbar^2}{2ma^2} \right) \quad (267)$$

De modo que nuestra solución obtenida es muy cercana a la solución real.

**Problema 2:**

Sabemos, de clases que los valores de expectación del potencial en la base antigua del Hamiltoniano. Se tiene:

$$\langle \psi_1 | V | \psi_1 \rangle = E_1^{(1)} = v_+ \quad (268)$$

$$\langle \psi_2 | V | \psi_2 \rangle = E_2^{(1)} = v_- \quad (269)$$

Además, igualando los distintos ordenes de  $\lambda$  obtenemos:

$$H_0 | \psi_n \rangle = E_n^{(1)} | \psi \rangle^{(0)} \quad (270)$$

$$H_0 | n \rangle^{(1)} + V | \psi_n \rangle^{(0)} = E_n^{(0)} | n \rangle^{(1)} + E_n^{(1)} | \psi_n \rangle \quad (271)$$

$$H_0 | n \rangle^{(2)} + V | n \rangle^{(1)} = E_n^{(1)} | n \rangle^{(2)} + E_n^{(1)} | n \rangle^{(1)} + E_n^{(2)} | \psi_n \rangle \quad (272)$$

Ahora, lo que haremos será aplicar  $\langle n |$  a la ecuación (271):

$$\langle n | H_0 | 1 \rangle^{(1)} - \langle n | V | \psi_1 \rangle^{(0)} = \langle n | E_0^{(1)} | 1 \rangle^{(1)} + \langle n | E_1^{(0)} | \psi_1 \rangle^{(0)} \quad (273)$$

$$E_n^{(0)} \langle n | 1 \rangle^{(1)} + \langle n | V | \psi_1 \rangle^{(0)} = E_1^{(0)} \langle n | 1 \rangle^{(1)} - E_1^{(1)} \langle n | \psi_1 \rangle^{(0)} \quad (274)$$

$$(E_n^{(0)} - E_1^{(0)}) \langle n | 1 \rangle^{(1)} = - \langle n | V | \psi_1 \rangle^{(0)} \quad (275)$$

$$\langle n | 1 \rangle^{(1)} = \frac{\langle n | V | \psi_1 \rangle^{(0)}}{E_1^{(0)} - E_n} \quad (276)$$

Ahora queremos calcular  $\langle n | \psi_2 | 1 \rangle^{(1)}$ . Para obtenerlo, aplicamos  $\langle \psi_2 |$ :

$$\langle \psi_2 | H_0 | 1 \rangle^{(2)} + \langle \psi_2 | V | 1 \rangle^{(1)} = \langle \psi_2 | E_1^{(1)} | 1 \rangle^{(2)} + \langle \psi_2 | E_1^{(1)} | 1 \rangle^{(1)} + \langle \psi_2 | E_1^{(2)} | \psi_1 \rangle \quad (277)$$

$$E_2^{(0)} \langle \psi_2 | 1 \rangle^{(2)} + \langle \psi_2 | V | 1 \rangle^{(1)} = E_1^{(1)} \langle \psi_2 | 1 \rangle^{(2)} + v_+ \langle \psi_2 | 1 \rangle^{(1)} + E_1^{(2)} \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle \quad (278)$$

$$\langle \psi_2 | 1 \rangle^{(1)} = \langle \psi_2 | V | 1 \rangle^{(1)} / v_+ \quad (279)$$

Recordemos que buscamos una expresión para  $| 1 \rangle^{(1)}$  tal como:

$$| 1 \rangle^{(1)} = \langle \psi_2 | 1 \rangle^{(1)} | \psi_2 \rangle^{(0)} + \sum_{n \neq 1, 2}^{(0)} \langle n | 1 \rangle^{(1)} | n \rangle^{(0)} \quad (280)$$

Entonces, reemplazamos (13) en (12) y obtenemos:

$$\langle \psi_2|1 \rangle^{(1)} = \frac{1}{v_+} \langle \psi_2|V \left\{ {}^{(0)}\langle \psi_2|1 \rangle^{(1)}|\psi_2 \rangle^{(0)} + \sum_0 \langle n|1 \rangle^{(1)}|n \rangle^{(0)} \right\} \quad (281)$$

$${}^{(0)}\langle \psi_2|1 \rangle^{(1)}v_+ = {}^{(0)}\langle \psi_2|1 \rangle^{(1)} {}^{(0)}\langle \psi_2|V|\psi_2 \rangle^0 + \sum {}^{(0)}\langle n|1 \rangle^{(1)}|n \rangle^{(0)} \quad (282)$$

Nótese que  ${}^{(0)}\langle \psi_2|V|\psi_2 \rangle^{(0)} = v_-$ . Reemplazando (9) ahora, obtenemos:

$${}^{(0)}\langle \psi_2|1 \rangle^{(1)} = \frac{1}{v_+ - v_-} \sum \frac{{}^{(0)}\langle n|V|\psi_1 \rangle^{(0)} {}^{(0)}\langle \psi_2|V|n \rangle^{(0)}}{E_1^{(0)} - E_n^{(0)}} \quad (283)$$

Finalmente, reemplazando en (13), se obtiene:

$$|1 \rangle^{(1)} = \sum_{n \neq 1,2} \left\{ \frac{\langle \psi_2|V|n \rangle \langle n|V|\psi_1 \rangle}{(E_1^0 - E_n^0)(v_+ - v_-)} |\psi_2 \rangle + \frac{\langle n|V|\psi_1 \rangle}{E_1^0 - E_n^0} |n \rangle \right\} \quad (284)$$

Para obtener  $|2 \rangle$ , haremos:

$$|2 \rangle^{(1)} = {}^{(0)}\langle \psi_1|2 \rangle^{(1)}|\psi_1 \rangle^{(0)} + \sum_{n \neq 1,2} {}^{(0)}\langle n|2 \rangle^{(1)}|n \rangle^{(0)} \quad (285)$$

El proceso es análogo. Buscaremos  ${}^{(0)}\langle n|2 \rangle^{(1)}$  aplicando el bra  ${}^{(0)}\langle n|$  a la ecuación (4):

$$\langle n|2 \rangle = \frac{\langle n|V|\psi_2 \rangle}{E_2^0 - E_n^0} \quad (286)$$

Ahora, buscamos  $\langle \psi_1|2 \rangle^{(1)}$  aplicando el bra  $\langle \psi_1|$  en (5)

$$\langle \psi_1|2 \rangle^{(1)} = \frac{\langle \psi_1|V|2 \rangle^{(1)}}{v_-} \quad (287)$$

Reemplazaremos en esta ecuación, la ecuación (18), resultando:

$$\langle \psi_1|2 \rangle^{(1)} = \frac{1}{v_- - v_+} \sum \frac{\langle \psi_1|V|n \rangle \langle n|V|\psi_2 \rangle}{E_2^0 - E_n^0} \quad (288)$$

Finalmente, reemplazando en (19) y (21) en (18)

$$|2 \rangle^{(1)} = \sum_{n \neq 1,2} \left\{ \frac{\langle \psi_1|V|n \rangle \langle n|V|\psi_2 \rangle}{E_2^0 - E_n^0} \right\} \quad (289)$$

Luego, juntando las ecuaciones:

$$|2 \rangle^{(1)} = \sum_{n \neq 1,2} \left\{ \frac{\langle \psi_1|V|n \rangle \langle n|V|\psi_2 \rangle}{(E_2^0 - E_n^0)(v_- - v_+)} |\psi_1 \rangle + \frac{\langle n|V|\psi_2 \rangle}{E_2^0 - E_n^0} |n \rangle \right\} \quad (290)$$

Ahora, necesitamos obtener la corrección de la función de onda: Utilizamos la ecuación (4) :

$$H_0|n\rangle^{(1)} + V|n\rangle^{(0)} = E_n^0|n\rangle^{(1)} + E_n^{(1)}|n\rangle^{(0)} \quad (291)$$

Expresamos  $|n\rangle$  como una combinación lineal:

$$|n\rangle^{(1)} = \langle\psi_1|n\rangle^{(1)}|\psi_1\rangle + \langle\psi_2|n\rangle^{(1)}|\psi_2\rangle + \sum \langle l|n\rangle^{(1)}|l\rangle \quad (292)$$

Necesitamos obtener los productos internos que involucran a  $|n\rangle^{(1)}$ , estos son:  $\langle\psi_1|n\rangle^{(1)}$ ,  $\langle\psi_2|n\rangle^{(1)}$  y  $\langle l|n\rangle^{(1)}$ . Para obtenerlos, bracketeamos por la izquierda y obtenemos:

$$\langle\psi_1|n\rangle = \frac{\langle\psi_1|V|n\rangle^{(0)}}{E_n^0 - E_1} \quad (293)$$

$$\langle\psi_2|n\rangle^{(1)} = \frac{\langle\psi_1|V|n\rangle^{(0)}}{E_n^0 - E_2} \quad (294)$$

$$\langle l|n\rangle^{(1)} = \frac{\langle l|V|n\rangle^{(0)}}{E_n^0 - E_l^0} \quad (295)$$

Reemplazando, se obtiene:

$$|n\rangle^{(1)} = \frac{\langle\psi_1|V|n\rangle^{(0)}}{E_n^0 - E_1^0}|\psi_1\rangle + \frac{\langle\psi_2|V|n\rangle^{(0)}}{E_n^0 - E_2}|\psi_2\rangle + \sum_{l \neq n} \frac{\langle l|V|n\rangle}{E_n^0 - E_l^0}|l\rangle \quad (296)$$

Queremos calcular las correcciones a segundo orden de la energía. Para obtener esto, aplicamos  $\langle\psi_1|$  en la ecuación (4):

$$E_1^2 = \langle\psi_1|V|1\rangle^1 \quad (297)$$

Con esto, simplemente reemplazando, se obtiene:

$$E_1^2 = \langle\psi_1|V \left\{ \sum \frac{\langle\psi_2|V|n\rangle \langle n|V|\psi_1\rangle}{(E_1^0 - E_n^0)(v_+ - v_-)} |\psi_2\rangle + \frac{\langle n|V|\psi_1\rangle}{E_1^0 - E_n^0} |n\rangle \right\} \quad (298)$$

$$E_1^2 = \sum \left\{ \frac{\langle\psi_2|V|n\rangle \langle n|V|\psi_1\rangle}{(E_1^0 - E_n^0)(v_+ - v_-)} + \frac{\langle n|V|\psi_1\rangle \langle\psi_1|V|n\rangle}{E_1^0 - E_n^0} \right\} \quad (299)$$

y

$$E_1^2 = \sum \frac{|\langle n|V|\psi_1\rangle|^2}{E_1 - E_n}$$

Para obtener  $E_2^2$ , aplicamos el bra por la izquierda con  $\psi_2$  a la ec. (5). Obtenemos:

$$E_2^{(2)} = \langle\psi_2|V|2\rangle^{(1)} \quad (300)$$

Finalmente, reemplazando  $|\psi_2\rangle^{(1)}$  obtenido anteriormente en (23), se tiene:

$$E_2^{(2)} = \langle \psi_2 | V | \left\{ \sum \frac{\langle \psi_1 | V | n \rangle \langle n | V | \psi_2 \rangle}{(E_2^0 - E_n^0)(v_- - v_+)} |\psi_1\rangle + \frac{\langle n | V | \psi_2 \rangle}{E_2^0 - E_n^0} |n\rangle \right\} \quad (301)$$

$$E_2^{(2)} = \sum \left\{ \frac{\langle \psi_1 | V | n \rangle \langle n | V | \psi_2 \rangle}{(E_2^0 - E_n^0)(v_- - v_+)} + \frac{\langle n | V | \psi_2 \rangle \langle \psi_2 | V | n \rangle}{E_2^0 - E_n^0} \right\} \quad (302)$$

$$E_2^{(2)} = \sum \frac{|\langle n | V | \psi_2 \rangle|^2}{E_2^0 - E_n^0} \quad (303)$$

### Problema 3:

En este problema, tenemos una degeneración  $g = 4$  para todos los estados en el nivel  $n = 2$ . ¿Por qué se produce esta degeneración? Se produce porque tenemos para un  $n$  dado, tenemos distintos valores para  $l$  dado que

$$0 \leq l < n$$

y además,  $m$  puede tomar distintos valores para cada  $l$ . Es así, como esto nos lleva a 4 estados diferentes, que son presentados a continuación:

$$\begin{aligned} 2s \quad \phi_{n=2, l=0, m=0} &= \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0} \\ 2p \quad \phi_{n=2, l=1, m=-1} &= -\frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin\theta e^{i\phi} \\ \phi_{n=2, l=1, m=0} &= \frac{1}{4\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \cos\theta \\ \phi_{n=2, l=1, m=1} &= \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0} \sin\theta e^{-i\phi} \end{aligned}$$

Ahora, como estamos aplicando un campo eléctrico en la dirección  $\hat{z}$ , el operador apropiado es:

$$V = -ez|\vec{E}| \quad (304)$$

Entonces, lo que debemos hacer. es obtener la matriz secular, utilizando el valor de expectación de  $V$  en la base  $|nml\rangle$ . Es decir:

$$V_{ij} = \langle \phi_i | V | \phi_j \rangle \quad (305)$$

Podríamos calcular estos 16 elementos de matriz, mas utilizaremos argumentos que tienen que ver con los autoestados, reduciendo la cantidad de calculos. El argumento es que la perturbación tiene elementos de matriz que no se anulan únicamente entre estados de paridad opuesta. Esto es, entre  $l = 1$  y  $l = 0$  en este caso. Además, para que el elemento que hemos de calcular no se anule, los valores  $m$  deben ser iguales, dado que  $z$  se comporta como un tensor esférico de rango 1 con componente esférica 0. Así que los únicos elementos que quedan son entre  $2S$  ( $m = 0$  necesariamente) y  $2P$  con  $m = 0$ .

Entonces, nos queda:

$$V = \begin{pmatrix} 0 & \langle 2s|V|2p, m=0\rangle & 0 & 0 \\ \langle 2s|V|2p, m=0\rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

donde,

$$\langle 2s|V|2p, m=0\rangle = \langle 2p, m=0|V|2s\rangle = 3ea_0|\vec{E}|$$

Con esto, queda establecida la matriz secular. Ahora, es suficiente focalizar nuestra atención en la matriz superior izquierda  $2 \times 2$  y a partir de ella obtener los shifts de energía.

Resolvemos entonces, los autovalores de la matriz. Esto se hace, resolviendo la ecuación secular:

$$|V - \epsilon I| = 0$$

Esto, se convierte en:

$$\left| \begin{pmatrix} 0 & 3ea_0|\vec{E}| \\ 3ea_0|\vec{E}| & 0 \end{pmatrix} - \epsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right| = 0 \quad (306)$$

$$\left| \begin{pmatrix} -\epsilon & 3ea_0|\vec{E}| \\ 3ea_0|\vec{E}| & -\epsilon \end{pmatrix} \right| = 0 \quad (307)$$

Esto arroja los autovalores:

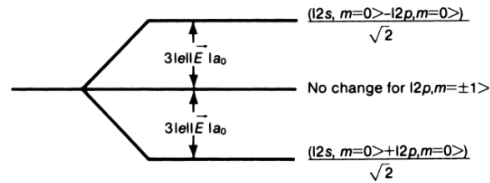
$$\Lambda_{\pm}^{(1)} = \pm 3ea_0|\vec{E}|$$

donde los subscripts  $\pm$  se refieren a los kets de cero orden que diagonalizan V. Para hallarlos solo resolvemos el kernel de  $|V - \epsilon I|$ .

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|2s, m=0\rangle \pm |2p, m=0\rangle)$$

Nótese que el shift es lineal con el campo eléctrico aplicado.

Finalmente, lo que se observa, (considerando shifts y autoestados) es:



# Ayudantía 7

Profesor: Max Bañados

Ayudante : Nicolás Pérez (nrperez@uc.cl)

## Resumen Teoría de Perturbaciones dependiente del tiempo

Nótese que hasta acá hemos estudiado fenómenos sin dependencia temporal. Es decir, solo hemos introducido potenciales de la forma:

$$V(\vec{r}, t) = V(\vec{r})$$

. En este caso, tenemos la ecuación de Schrödinger:

$$H\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad (308)$$

Que puede ser resuelta por separación de variables:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})e^{-iEt/\hbar} \quad (309)$$

donde  $\psi(\vec{r})$  satisface la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$H\psi = E\psi \quad (310)$$

Lo importante es que **si queremos permitir transiciones entre niveles de energía** tenemos que introducir potenciales dependientes del tiempo.

Consideremos un sistema de dos niveles. Tenemos dos estados dados por  $\psi_a$  y  $\psi_b$ . Son autoestados del Hamiltoniano sin perturbar  $H_0$ :

$$H_0\psi_a = E_a\psi_a \quad (311)$$

$$H_0\psi_b = E_b\psi_b \quad (312)$$

Estos son ortonormales:

$$\langle\psi_a|\psi_b\rangle = \delta_{ab} \quad (313)$$

Nótese que cualquier estado puede ser expresado por combinación lineal de ellos:

$$\Psi(0) = c_a\psi_a + c_b\psi_b \quad (314)$$

Si no tenemos perturbación, cada componente evoluciona con su característico factor exponencial:

$$\Psi(t) = c_a\psi_a e^{-iE_a t/\hbar} + c_b\psi_b e^{-iE_b t/\hbar} \quad (315)$$

### ¿Qué pasa cuando encendemos la perturbación dependiente del tiempo?

Como  $\psi_a$  y  $\psi_b$  constituyen un set completo, la función de onda  $\Psi(t)$  aún puede ser expresada como una combinación lineal de ellas. La única diferencia es que ahora las constantes son funciones del tiempo:

$$\Psi(t) = c_a(t)\psi_a e^{-iE_a t/\hbar} + c_b(t)\psi_b e^{-iE_b t/\hbar} \quad (316)$$



Entonces, nuestro problema se reduce a determinar  $c_a$  y  $c_b$  como funciones del tiempo. Si, por ejemplo, la partícula partió en el estado  $\psi_a$ , de modo que tenemos:

$$c_a(0) = 1 \quad (317)$$

$$c_b(0) = 0 \quad (318)$$

y algún tiempo después  $t_1$  encontramos que:

$$c_a(t_1) = 0 \quad (319)$$

$$c_b(t_1) = 1 \quad (320)$$

se ha producido una transición desde  $\psi_a$  a  $\psi_b$ . Resolvemos para  $c_a(t)$  y  $c_b(t)$  demandando que  $\Psi(t)$  satisfaga la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$H\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (321)$$

$$H = H_0 + H'(t) \quad (322)$$

Luego, utilizando las ecuaciones anteriores es posible reemplazar la onda que hemos utilizado, y utilizando la siguiente definición:

$$H'_{ij} = \langle \psi_i | H' | \psi_j \rangle \quad (323)$$

Se obtiene:

$$\dot{c}_a = -\frac{i}{\hbar} [c_a H'_{aa} + c_b H'_{ab} e^{-i(E_b - E_a)t/\hbar}] \quad (324)$$

$$\dot{c}_b = -\frac{i}{\hbar} [c_b H'_{bb} + c_a H'_{ba} e^{-i(E_b - E_a)t/\hbar}] \quad (325)$$

## Problemas

1. El Hamiltoniano correspondiente a un oscilador bidimensional viene dado por  $H = H_0 + V$ , donde

$$H_0 = \frac{1}{2m}(P_1^2 + P_2^2) + \frac{m\omega^2}{2}(X_1^2 + X_2^2)$$

y

$$V = \gamma \frac{m^2 \omega^3}{\hbar} X_1^2 X_2^2$$

donde  $\gamma$  es una constante adimensional real positiva.

- (a) Calcule la corrección perturbativa a primer y segundo orden para la energía del estado fundamental.
- (b) Calcule las correcciones de energía a primer orden para las dos primeras excitaciones de  $H_0$  (es decir los dos primeros niveles excitados de  $H_0$ ), así como los correspondientes autoestados de orden cero de  $H$ .

Note que Ud. debe dar por conocida la solución del problema no perturbado. Se sugiere fuertemente introducir los operadores de creación y destrucción en cada componente, es decir  $a_1, a_1^\dagger, a_2$  y  $a_2^\dagger$ .

## 2. Efecto Autler-Townes

Considere un sistema de tres niveles:  $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$  y  $|\phi_3\rangle$ , con energías  $E_1, E_2$  y  $E_3$ . Suponga  $E_3 > E_2 > E_1$  y que  $E_3 - E_2 \ll E_2 - E_1$ .

Este sistema interactúa con un campo magnético oscilante a la frecuencia  $\omega$ . Suponemos que los estados  $|\phi_2\rangle$  y  $|\phi_3\rangle$  tienen igual paridad, opuesta a la paridad del estado  $|\phi_1\rangle$ , de modo que el Hamiltoniano de interacción  $W(t)$  debido al campo magnético oscilante puede conectar  $|\phi_2\rangle$  y  $|\phi_3\rangle$  con  $|\phi_1\rangle$ . Suponga que en la base de los tres estados  $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle$ , arreglados de acuerdo a este orden,  $W(t)$  viene representado por la siguiente matriz

$$W(t) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_1 \sin \omega t \\ 0 & \omega_1 \sin \omega t & 0 \end{pmatrix}$$

donde  $\omega_1$  es una constante proporcional al campo oscilante.

(a) Sea

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{i=1}^3 b_i(t) e^{-iE_i t/\hbar} |\phi_i\rangle$$

Escriba el sistema de ecuaciones diferenciales que satisfacen los  $b_i(t)$ .

(b) Suponga que  $\omega$  es muy cercano a  $\omega_{23} = (E_3 - E_2)/\hbar$ . Haga uso de la simplificación  $W_{ii} \approx 0$ . Integre, en el marco de esta aproximación, el sistema precedente con las condiciones iniciales

$$b_1(0) = b_2(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} b_3 = 0$$

desprecie en el lado derecho de las ecuaciones diferenciales los términos cuyos coeficientes,  $\exp(\pm i(\omega + \omega_{32})t)$ , varían muy rápido y mantenga solamente aquellos coeficientes que son constantes o que varían muy lentamente, como  $\exp(\pm i(\omega - \omega_{32})t)$ .

La componente  $D_z$  a lo largo de Oz del momento dipolar eléctrico del sistema (debe informarse sobre el momento dipolar eléctrico) viene representado, en la base de los tres estados  $|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle$ , arreglados en este orden, por la matriz:

$$\begin{pmatrix} 0 & d & 0 \\ d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

donde  $d$  es una constante real ( $D_z$  es un operador impar que conecta solamente estados con paridades opuestas). Calcule  $\langle D_z \rangle(t) = \langle \psi(t) | D_z | \psi(t) \rangle$ , usando el vector  $|\psi(t)\rangle$  calculado en b).

Muestre que la evolución temporal de  $\langle D_z \rangle(t)$  viene dada por una superposición de términos sinusoidales. Determine las frecuencias  $\nu_k$  y las intensidades relativas  $\pi_k$  de estos términos.

Estas son las frecuencias que pueden ser absorbidas por el átomo cuando este se sitúa en un campo eléctrico oscilante paralelo a Oz. Describa las modificaciones de este espectro de absorción cuando, para un  $\omega$  fijo y tal que  $\omega = \omega_{23}$ , se incrementa  $\omega_1$  desde cero.

3. Un cierto sistema cuántico se encuentra inicialmente en su estado fundamental  $|0\rangle$ . En  $t = 0$  se aplica una perturbación de la forma

$$V(t) = H_0 e^{-(t/T)}$$

Muestre que después de un largo tiempo la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado  $|1\rangle$  viene dada por

$$P(1, t) = \frac{|\langle 0|H_0|1\rangle|^2}{(\frac{\hbar}{T})^2 + (\Delta\epsilon)^2}$$

## Soluciones

### Problema 1:

Recordemos que  $x$  se puede escribir en función de los operadores de creación y aniquilación  $x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(a + a^\dagger)$ . Esto nos deja:

$$x_1^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(a_1^2 + a_1 a_1^\dagger + a_1^\dagger a_1 + (a_1^\dagger)^2) \quad (326)$$

$$x_2^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(a_2^2 + a_2 a_2^\dagger + a_2^\dagger a_2 + (a_2^\dagger)^2) \quad (327)$$

Utilizando las propiedades de  $a$  y  $a^\dagger$  obtendremos una expresión más sencilla. Las operaciones son:

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \quad (328)$$

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \quad (329)$$

Se obtiene:

$$E_0^{(1)} = \langle n | V | n \rangle \quad (330)$$

$$E_0^{(1)} = \frac{\gamma \hbar \omega}{4} \quad (331)$$

La corrección a segundo orden será:

$$E_0^{(2)} = \sum_{l \neq n} \frac{|V_{nl}|^2}{E_n - E_l} \quad (332)$$

Esto se resolverá en primer lugar, obteniendo  $|V_{nl}|^2$

$$V_{nl} = \langle l | A (a_1^2 + a_1 a_1^\dagger + a_1^\dagger a_1 + (a_1^\dagger)^2) (a_2^2 + a_2 a_2^\dagger + a_2^\dagger a_2 + (a_2^\dagger)^2) | n \rangle \quad (333)$$

$$V_{nl} = A \langle l | 2 \rangle \langle m | 2 \rangle \quad (334)$$

$$V_{nl} = A \delta_{l2} \delta_{m2} \quad (335)$$

Donde  $A = \frac{\gamma \hbar \omega}{4}$

Finalmente:

$$E_0^{(2)} = -\frac{\gamma^2 \hbar \omega}{16} \quad (336)$$

(b) Buscaremos la ecuación secular, dada por:

$$V_{ij} = \langle \phi_i | V | \phi_j \rangle$$

$$\langle 1, 0 | V | 0, 1 \rangle = \frac{3\gamma\hbar\omega}{4} \quad (337)$$

$$\langle 0, 1 | V | 0, 1 \rangle = \langle 0, 1 | V | 1, 0 \rangle = 0 \quad (338)$$

Entonces  $V_{21} = 0$ ,  $V_{12} = 0$ ,  $V_{11} = \frac{3\gamma\hbar\omega}{4}$  y  $V_{22} = \frac{3\gamma\hbar\omega}{4}$

Ahora, encontramos los auto valores resolviendo la ecuación secular. Obtendemos:

$$\epsilon_{\pm} = \frac{3\gamma\hbar\omega}{4}$$

Estos valores nos arrojan los autovectores  $(1, 0)$  y  $(0, 1)$  Estos siguen presentando degeneración.

Ahora resolvemos la segunda excitación:

$$V = \begin{pmatrix} \frac{5\gamma\hbar\omega}{4} & \frac{\gamma\hbar\omega}{2} & 0 \\ \frac{\gamma\hbar\omega}{2} & \frac{5\gamma\hbar\omega}{4} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{9\gamma\hbar\omega}{4} \end{pmatrix} \quad (339)$$

Resolvemos la ecuación secular, que arroja el sistema:

$$\begin{vmatrix} \frac{5\gamma\hbar\omega}{4} - \epsilon & \frac{\gamma\hbar\omega}{2} & 0 \\ \frac{\gamma\hbar\omega}{2} & \frac{5\gamma\hbar\omega}{4} - \epsilon & 0 \\ 0 & 0 & \frac{9\gamma\hbar\omega}{4} - \epsilon \end{vmatrix} = 0 \quad (340)$$

Las soluciones a esto, corresponden a:

$$\epsilon_1 = \frac{9\gamma\hbar\omega}{4} \quad (341)$$

$$\epsilon_2 = \frac{3\gamma\hbar\omega}{4} \quad (342)$$

$$\epsilon_3 = \frac{7\gamma\hbar\omega}{4} \quad (343)$$

Para obtener los autoestados, debemos calcular el kernel de la matriz que aparece en la ecuación secular.

Para  $\epsilon_1$ , se obtienen el autoestado:

$$|1\rangle = |1, 1\rangle$$

En el caso de  $\epsilon_2$ , se obtiene el autoestado:

$$|2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|02\rangle - |20\rangle)$$

Finalmente, obtenemos el autoestado para  $\epsilon_3$

$$|3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|02\rangle + |20\rangle)$$

**Problema 2:**

(a) Lo que se nos da por enunciado es:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{i=1}^3 b_i(t) e^{-iE_i t/\hbar} |\psi_i\rangle \quad (344)$$

Además, sabemos que:

$$\frac{\partial C_n}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \sum_m C_m e^{i\omega_{nm}t} \langle n|V|m\rangle, \omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} \quad (345)$$

Por otro lado, si observamos la matriz dada  $W(t)$ , lo que notamos es que únicamente, los elementos  $W_{32} = W_{23} = \omega_1 \sin(\omega t)$  y que el resto de los elementos de matriz son nulos.

Para obtener las ecuaciones diferenciales que satisfacen los  $b_i(t)$ , utilizaremos la ecuación descrita anteriormente. Obtenemos:

$$\frac{db_1}{dt} = -\frac{i}{\hbar} (b_1(t)e^{\omega_{11}t}W_{11} + b_2(t)e^{i\omega_{12}t}W_{12} + b_3(t)e^{i\omega_{13}t}W_{13}) = 0 \quad (346)$$

$$\frac{db_2}{dt} = -\frac{i}{\hbar} (b_1(t)e^{\omega_{21}t}W_{21} + b_2(t)e^{i\omega_{22}t}W_{22} + b_3(t)e^{i\omega_{23}t}W_{23}) \quad (347)$$

$$\frac{db_3}{dt} = -\frac{i}{\hbar} (b_1(t)e^{\omega_{31}t}W_{31} + b_2(t)e^{i\omega_{32}t}W_{32} + b_3(t)e^{i\omega_{33}t}W_{33}) \quad (348)$$

entonces, reemplazando los valores matriciales, se obtienen:

$$\dot{b}_1(t) = 0 \quad (349)$$

$$\dot{b}_2(t) = -\frac{i}{\hbar} b_3 e^{i\omega_{23}t} \omega_1 \sin(\omega t) \quad (350)$$

$$\dot{b}_3(t) = -\frac{i}{\hbar} b_2 e^{i\omega_{32}t} \omega_1 \sin(\omega t) \quad (351)$$

$$(352)$$

(b) En esta parte, se nos da la indicación de  $\omega \approx \omega_{23} = (E_3 - E_2)/\hbar$  y además, se nos dan condiciones iniciales. Lo que haremos será mezclar los  $\omega$ 's pasando el  $\sin$  a exponenciales.

En el caso de  $b_2$  se tiene:

$$\dot{b}_2 = -\frac{i}{\hbar} b_3 e^{i\omega_{23}t} \omega_1 \frac{(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})}{2i} \quad (353)$$

$$\dot{b}_2 = \frac{-b_3 \omega_1}{2\hbar} (e^{it(\omega_{23}+\omega)} - e^{it(\omega_{23}-\omega)}) \quad (354)$$

En el caso de  $b_3$  se tiene:

$$\dot{b}_3 = -\frac{i}{\hbar} b_2 e^{i\omega_{32}t} \omega_1 \frac{(e^{i\omega t} - e^{-i\omega t})}{2i} \quad (355)$$

$$\dot{b}_3 = \frac{-b_2 \omega_1}{2\hbar} (e^{it(\omega_{32}+\omega)} - e^{-it(\omega-\omega_{32})}) \quad (356)$$

Tengamos también en consideración que  $\omega_{23} = -\omega_{32}$ . Con esto, la ecuación de  $b_2$  nos queda:

$$\dot{b}_2 = \frac{\omega_1 b_3}{2\hbar} (e^{-it(\omega-\omega_{32})} - e^{it(\omega-\omega_{32})}) \quad (357)$$

Esto que hemos realizado, se reduce a algo incluso más simple, cuando utilizamos la aproximación dada según enunciado. Primero repetiremos el resultado que hemos obtenido hasta acá y a continuación presentamos el resultado con la aproximación:

$$\dot{b}_2 = \frac{\omega_1 b_3}{2\hbar} (e^{-it(\omega+\omega_{32})} - e^{it(\omega-\omega_{32})}) \quad (358)$$

$$\dot{b}_2 = \frac{\omega_1 b_2}{2\hbar} (e^{-it(\omega-\omega_{32})} - e^{it(\omega+\omega_{32})}) \quad (359)$$

Luego:

$$\dot{b}_2 = -\frac{\omega_1 b_3}{2\hbar} e^{it(\omega-\omega_{32})} \quad (360)$$

$$\dot{b}_3 = \frac{\omega_1 b_2}{2\hbar} e^{-it(\omega-\omega_{32})} \quad (361)$$

Obs: Se han eliminado las exponenciales con potencia  $(\omega + \omega_{32})$  porque varían más rápido. Aproximando:

$$\dot{b}_2 = -\frac{\omega_1 b_3}{2\hbar} \quad (362)$$

$$\dot{b}_3 = \frac{\omega_1 b_2}{2\hbar} \quad (363)$$

Lo que debemos hacer ahora, es resolver el sistema de ecuaciones diferenciales:

$$\ddot{b}_2 = \frac{-\omega_1}{2\hbar} \dot{b}_3 \quad (364)$$

$$\ddot{b}_2 = -\left(\frac{\omega_1}{2\hbar}\right)^2 b_3 \quad (365)$$

$$b_2(t) = a \cos\left(\frac{\omega_1}{2\hbar} t\right) + b \sin\left(\frac{\omega_1}{2\hbar} t\right) \quad (366)$$

Por otro lado, resolviendo para  $b_3$ :

$$b_3(t) = a \operatorname{sen} \left( \frac{\omega_1}{2\hbar} t \right) - b \operatorname{cos} \left( \frac{\omega_1}{2\hbar} t \right) \quad (367)$$

Ahora, utilizatemos la **condiciones iniciales dadas**

$$b_2(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (368)$$

$$b_3(0) = 0 \quad (369)$$

$$(370)$$

Con esto, obtenemos:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (371)$$

$$b = 0 \quad (372)$$

Luego,

$$b_2(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \operatorname{cos} \left( \frac{\omega_1}{2\hbar} t \right) \quad (373)$$

$$b_3(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \operatorname{sen} \left( \frac{\omega_1}{2\hbar} t \right) \quad (374)$$

$$(375)$$

Finalmente,  $\dot{b}_1(t) = 0 \rightarrow b_1(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}$

(c) Calcularemos:  $\langle \psi(t) | D_z(t) | \psi(t) \rangle$ , considerando que:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_1^3 b_i(t) e^{iE_i t/\hbar} |\phi_i\rangle$$

La matriz dada en el enunciado, nos indica los elementos que sobreviven:

$$\langle \phi_2 | D | \phi_1 \rangle = d \quad (376)$$

$$\langle \phi_1 | D | \phi_2 \rangle = d \quad (377)$$

Resolviendo esto, lo que tenemos es:



$$\langle D_z(t) \rangle = b_1^*(t)b_2(t)e^{it(E_1-E_2)/\hbar}d + b_2^*(t)b_1(t)e^{it(E_2-E_1)/\hbar}d \quad (378)$$

$$= \frac{d}{2} \cos\left(\frac{\omega_1 t}{2\hbar}\right) (e^{it(E_1-E_2)/\hbar} + e^{it(E_2-E_1)/\hbar}) \quad (379)$$

$$= \frac{d}{2} \cos\left(\frac{\omega_1 t}{2\hbar}\right) \cos(\omega_{12}t) \quad (380)$$

$$= \frac{d}{2} \left\{ \cos\left(\frac{\omega_1 t}{2\hbar} - \omega_{12}\right) + \cos\left(\frac{\omega_1 t}{2\hbar} + \omega_{12}\right) \right\} \quad (381)$$

Con esto, queda demostrado que hay términos sinusoidales.

**Problema 3:** Tenemos que se cumple:

$$P(t, |n\rangle \rightarrow |l\rangle) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\infty dt' e^{i\omega_{ln}t'} V_{ln}(t') \right|^2$$

En esta ecuación, reemplazamos directamente, el argumento  $V_{ln}(t')$  dado que conocemos la función. Además, sabemos entre que estados es la transición:

$$P = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\infty dt' e^{i\omega_{ln}t'} \langle 0|H_0 e^{-t'/T} |1\rangle \right|^2$$

$$P = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^\infty dt' e^{i\omega_{ln}t'} \langle 0|H_0|1\rangle e^{-t'/T} \right|^2$$

$$P = \frac{1}{\hbar^2} \left| \langle 0|H_0|1\rangle \int_0^\infty dt' e^{i\omega_{ln}t'} e^{-t'/T} \right|^2$$

$$P = \frac{|\langle 0|H_0|1\rangle|^2}{\hbar^2} \left| \left[ \frac{1}{i\omega_{ln} - \frac{1}{T}} (-1)^2 \right] \right|^2$$

$$P = \frac{|\langle 0|H_0|1\rangle|^2}{\hbar^2} \left[ \frac{1}{(\omega_{ln})^2 + (\frac{1}{T})^2} \right]$$

$$P = \frac{|\langle 0|H_0|1\rangle|^2}{\hbar^2(\omega_{ln})^2 + \hbar^2(\frac{1}{T})^2}$$

$$P = \frac{|\langle 0|H_0|1\rangle|^2}{\hbar^2(\frac{\Delta\epsilon}{\hbar})^2 + \hbar^2(\frac{1}{T})^2}$$

$$P = \frac{|\langle 0|H_0|1\rangle|^2}{(\Delta\epsilon)^2 + (\frac{\hbar}{T})^2}$$

# Ayudantía 8

*Profesor: Max Bañados*

*Ayudante : Nicolás Pérez (nrperez@uc.cl)*

## Problemas

1. Este es un problema engañoso porque la degeneración entre el primer y segundo estado no es removida en primer orden. Un sistema que tiene tres estados sin perturbar puede ser representada por la siguiente matriz Hamiltoniana perturbada:

$$\begin{pmatrix} E_1 & 0 & a \\ 0 & E_1 & b \\ a^* & b^* & E_2 \end{pmatrix} \quad (382)$$

donde  $E_2 > E_1$ . Las cantidades  $a$  y  $b$  deben ser consideradas como perturbaciones que son del mismo orden y que son pequeñas comparadas con  $E_2 - E_1$ . Use teoría de perturbaciones no degenerada a segundo orden para calcular los autovalores perturbados. (Es esto correcto?) Luego diagonalice la matriz para encontrar los autovalores exactos. Finalmente, use la teoría de perturbaciones degenerada a segundo orden. Compare los resultados.

2. **Infinite square well con función delta:** Consideramos el pozo potencial infinito como el problema sin perturbar y lo que haremos será perturbarlo con la función delta en el centro del potencial. Calcularemos los shifts de energía a segundo orden y los autoestados perturbados a primer orden.

## Soluciones

### Problema 1:

Para resolver el problema, debemos usar el método de la ecuación secular. Entonces, lo que deseamos hacer es diagonalizar la matriz que describe el Hamiltoniano perturbado para obtener los autovalores exactos de energía. La ecuación secular obtenida es entonces:

$$(E_1 - \lambda)((E_1 - \lambda)(E_2 - \lambda) - |b|^2) + (a(\lambda - E_1)a^*) = 0 \quad (383)$$

Una solución trivial del problema es  $E_1 = \lambda$ . Por otro lado, debemos resolver la ecuación:

$$\lambda^2 - (E_1 + E_2)\lambda + E_1E_2 - |a|^2 - |b|^2 = 0 \quad (384)$$

Entonces, tenemos dos soluciones a esto:

$$\lambda_+ = E_1 + \frac{|a|^2 + |b|^2}{E_1 - E_2} \quad (385)$$

$$\lambda_- = E_2 - \frac{|a|^2 + |b|^2}{E_1 - E_2} \quad (386)$$

Nótese que aquí hemos asumido que  $|a|, |b|, \ll |E_2 - E_1|$ .

Luego, la teoría de perturbaciones se lee como:

$$\Delta_1 = \frac{|a|^2}{E_1 - E_2} \quad (387)$$

$$\Delta_2 = \frac{|b|^2}{E_1 - E_2} \quad (388)$$

$$\Delta_3 = \frac{|a|^2 + |b|^2}{E_2 - E_1} \quad (389)$$

De esta manera, los niveles de energía quedan dados por:

$$E_1 + \Delta_1 \quad (390)$$

$$E_1 + \Delta_2 \quad (391)$$

$$E_2 + \Delta_3 \quad (392)$$

**Problema 2:** Notemos en primer lugar el Hamiltoniano sin perturbar:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (393)$$

Donde, tenemos la condición del pozo potencial:

$$V(x) = 0 \quad \text{si } 0 < x < L \quad (394)$$

$$V(x) = \infty \quad \text{siesta en otro rango} \quad (395)$$

La forma que posee nuestra perturbación es:

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{mL} \delta(x - \frac{L}{2}) \quad (396)$$

Luego, el Hamiltoniano completo está dado por:

$$H = H_0 + \lambda V = \frac{p^2}{2m} + V(x) + \lambda \frac{\hbar^2}{mL} \delta(x - \frac{L}{2}) \quad (397)$$

Los niveles de energía sin perturbar son los clásicos para un pozo potencial:

$$E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (398)$$

Con las correspondientes autofunciones sin perturbar:

$$\phi_n(x) = \langle x | T | n^{(0)} \rangle = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \quad (399)$$

Entonces, las correcciones de energía a primer orden están dadas por:

$$E_n^{(1)} = V_{nn} = \langle n^{(0)} | T V T | n^{(0)} \rangle \quad (400)$$

Luego, tenemos que:

$$V_{nn} = \int dx \phi_n^* V(x) \phi_n(x) = \frac{2\hbar^2}{mL^2} \int dx \sin^2\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \delta(x - \frac{L}{2}) \quad (401)$$

Nótese que esto resulta en dos posibles respuestas:

$$V_{nn} = 0 \quad \text{si } n \text{ es par} \quad (402)$$

$$V_{nn} = \frac{2\hbar^2}{mL^2} \quad \text{si } n \text{ es impar} \quad (403)$$

Los elementos de matriz desaparecen para un  $n$  par porque las funciones de onda tienen un nodo en  $x = L/2$ . Las autofunciones con  $n$  impar tienen un antinodo en  $x = L/2$ , de modo que la función seno toma su valor máximo.

La corrección a primer orden a la autofunción es usualmente escrito como:

$$|n^{(1)}\rangle = - \sum_{m \neq n} |m^{(0)}\rangle \frac{V_{mn}}{E_{mn}} \quad (404)$$

Entonces, para resolver esto vamos parte por parte. Primero resolveremos  $V_{mn}$ :

$$V_{mn} = \frac{2\hbar^2}{mL^2} \int dx \sin\left(\frac{m\pi}{L} x\right) \delta(x - \frac{L}{2}) \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \quad (405)$$

Entonces el resultado es:

$$V_{mn} = -(-1)^{\frac{m+n}{2}} \frac{2\hbar^2}{mL^2} \quad \text{my}n\text{impar} \quad (406)$$

$$V_{mn} = 0 \quad \text{my/onpar} \quad (407)$$

La energía que aparece en el denominador es:

$$E_{mn} = E_m^{(0)} - E_n^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (m^2 - n^2) \quad (408)$$

Por otro lado, la autofunción perturbada a primer orden está definida como:

$$\psi_n(x) = \langle x|n^{(0)}\rangle + \lambda \langle x|n^{(1)}\rangle \quad (409)$$

Con esto, obtenemos:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) + \frac{4\lambda}{\pi^2} \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{m,n=1-m \neq n}^{\infty} \sin\left(\frac{(2m-1)\pi}{L}x\right) \frac{(-1)^{m+n-1}}{(2m-1)^2 - (2n-1)^2} \quad (410)$$

Esta suma puede ser resuelta analíticamente (MAPLE). Calculando el ground state de la función de onda a primer orden ( $n = 1$ ), tenemos:

$$\psi_1(x) \approx \sqrt{\frac{2}{L}} \left(1 - \frac{\lambda}{\pi^2}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) + \frac{2\lambda}{\pi L} (x - Lu(x - L/2)) \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \quad (411)$$

donde  $u(x)$  es la función escalón unitaria. La derivada discontinua en  $x = L/2$  es la característica de los autoestados con potenciales delta.

La corrección a segundo orden del shift de energía es calculado utilizando:

$$E_n^{(2)} = - \sum_{m \neq n} \frac{|V_{mn}|^2}{E_{mn}} \quad (412)$$

Esta ecuación nos lleva a:

$$E_n^{(2)} = - \frac{8\hbar^2}{\pi^2 mL^2} \sum_{m,n=1-m \neq n}^{\infty} \frac{1}{(2m-1)^2 - (2n-1)^2} \quad (413)$$

Esta suma puede ser resuelta exactamente (MAPLE), obteniendo:

$$E_n^{(2)} = - \frac{2\hbar^2}{\pi^2 mL^2} \frac{1}{n^2} \quad (414)$$

Finalmente, la energía corregida a segundo orden:

$$E_n \approx \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 + \lambda \frac{\hbar^2}{mL^2} - \lambda^2 \frac{2\hbar^2}{\pi^2 mL^2} \frac{1}{n^2} \quad (415)$$

Solo para  $n$  impar! Pues para  $n$  par tenemos:

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 \quad (416)$$

# Ayudantía 9

Profesor: Max Bañados

Ayudante : Nicolás Pérez (nrperez@uc.cl)

## Problemas

1. Repita con lujo de detalles el cálculo (presentado en clases) de la tasa de ionización del átomo de Hidrógeno, desde su estado fundamental, a un estado caracterizado por un vector  $\vec{k}$ , al ser perturbado por un potencial oscilante de la forma  $V(t) = eE_0\vec{r} \cdot \hat{n}2\sin\omega t$ .  $\hat{n}$  es un vector unitario que indica la dirección del campo eléctrico. Explique las hipótesis de su cálculo y, en particular, muestre como se aplica la regla dorada de Fermi.
2. **Átomo de Hidrógeno:** Considere un átomo de Hidrógeno real. ¿Cuál es el espectro en ausencia de un campo magnético externo? ¿Como cambia este espectro si el átomo se ubica en un campo magnético de 25000 gauss? Ignore el acoplamiento hiperfino
3. **Átomo de Hidrógeno:** La interacción hiperfina en el átomo de Hidrógeno, debida a la interacción entre los momentos magnéticos del electrón y protón, (para estados con  $l = 0$ ), viene descrita por:

$$H_{eff} = -\frac{8\pi}{3}\vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_p\delta^3(\vec{r}) \quad (417)$$

Para mayores detalles vea el libro de Jackson "Classical Electrodynamics", segunda edición, página 187). Debido a esta interacción el estado fundamental  $1S$  sufre un ligero desdoblamiento (Splitting). Considere estados de momento angular total  $\vec{F} = \vec{S} + \vec{I}$ , donde  $\vec{S}$  es el spin del electrón y  $\vec{I}$  el spin del protón. Use el orden más bajo en teoría de perturbaciones para evaluar la diferencia existente entre los estados  $F = 0$  y  $F = 1$ . ¿Cuál es el verdadero estado fundamental? ¿Cuál es la longitud de onda emitida por una transición entre dos estados? (se pide un número y no solamente una expresión algebraica). Importante: Deberá recordar el problema de acoplamiento de momentos angulares en el caso de dos spins.

La longitud de onda que Ud. ha calculado ( $\lambda \approx 21.1cm$ ) es muy famosa en astrofísica. Los radiastrónomos conocen muy bien estos fotones. Más adelante en el curso volveremos sobre este tema, mostrando que es extremadamente improbable observar este tipo de decaimientos en el laboratorio, pues la vida media de la transición es del orden de los  $10^7$  años.

Datos útiles:

$$\begin{aligned} \vec{\mu}_e &= -\frac{e\hbar}{2m_e c}\vec{\sigma}_e \\ \vec{\mu}_p &= -2.7928\left(\frac{e\hbar}{2m_p c}\right)\vec{\sigma}_p \end{aligned}$$

Ud. deberá trabajar con la función de onda del estado fundamental del átomo de Hidrógeno incluyendo la parte de spin. Este es un problema donde, como ve, la perturbación ocurre en el espacio de spin.

$$\begin{aligned}\psi_{1s}(\vec{r}) &= \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} \chi_{spin} \\ a_0 &= \frac{1}{137.036} \\ m_p/m_e &= 1836.15\end{aligned}$$



## Soluciones

### Problema 1:

Se tiene un potencial, asociado a un campo eléctrico oscilante, tal que

$$\vec{E} = |\vec{E}_0| \hat{e} \text{sen}(\omega t)$$

Entonces, el hamiltoniano es:

$$H = H_0 + V \quad (418)$$

$$H = H_0 + \left( \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \right) \quad (419)$$

Utilizando esto, lo que se quiere hacer es pasar de un estado inicial a un estado final. El estado inicial es el 1S, tal que:

$$\psi_i = \psi_{100}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} \quad (420)$$

y el estado final, es una partícula libre (electrón emergente), de modo que se tiene:

$$\psi_s = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (421)$$

Nótese que lo anteriores es una aproximación. El electrón emergente, estará limitado a una caja cúbica de largo  $L$  (no debemos preocuparnos por este valor, dado que luego haremos  $L \rightarrow \infty$ ). Asumiendo condiciones periódicas de borde, tenemos:

$$\begin{aligned} \frac{e^{-ik_z z}}{(2\pi)^{3/2}} &= \frac{e^{-ik_z(z+L)}}{(2\pi)^{3/2}} \\ 1 &= e^{-ik_z L} \\ k_z L &= 2\pi n_z \\ k_z &= \frac{2\pi n_z}{L} \end{aligned}$$

Así mismo, obtenemos:

$$\begin{aligned} k_x &= \frac{2\pi n_x}{L} \\ k_y &= \frac{2\pi n_y}{L} \end{aligned}$$

donde  $n_x, n_y, n_z \in \mathcal{Z}$

Entonces, se tiene:

$$dN = dn_x dn_y dn_z \quad (422)$$

$$= \frac{L}{2\pi} dk_x \frac{L}{2\pi} dk_y \frac{L}{2\pi} dk_z \quad (423)$$

$$= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 d^3 k \quad (424)$$

$$= \left(\frac{L}{2\pi}\right)^3 k^2 dk d\Omega \quad d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi \quad (425)$$

Por otro lado, se sabe que  $|\vec{k}|$  está fijo de forma que:

$$\begin{aligned} E_k &= E_0 + \hbar\omega \\ E_0 &= |E_1| = 13.6eV \end{aligned}$$

Ya con esto, podemos definir la regla de oro de Fermi para la tasa de ionización como:

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_j | V | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_j - E_i) \quad (426)$$

Pero como definimos una densidad de estados que dependen de un  $k$  fijo (puede variar infinitesimalmente). Entonces:

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_j | V | \psi_i \rangle|^2 \rho(E_k) \quad (427)$$

Así, se sabe que:

$$\begin{aligned} \rho(E_k) dE_k &= \frac{dN}{L^3} \\ &= \frac{k^2}{(2\pi)^3} dk d\Omega \end{aligned}$$

y, como también es sabido que:

$$\begin{aligned} E_k &= \frac{(\hbar k)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m} \\ dE_k &= \frac{\hbar^2 k}{m} dk \end{aligned}$$

Volviendo a la densidad ya descrita:

$$\rho(E_k) dE_k = \frac{k^2}{(2\pi)^3} \cdot \frac{m}{\hbar^2 k} dE_k d\Omega \quad (428)$$

$$= \frac{mk}{(2\pi)^3 \hbar^2} dE_k d\Omega \quad (429)$$

Luego, obtenemos:

$$\rho(E_k) = \frac{mk}{(2\pi)^3 \hbar^2} d\Omega \quad (430)$$

$$d\Gamma = \frac{mk}{(2\pi)^3 \hbar^2} \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_f | V | \psi_i \rangle|^2 d\Omega \quad (431)$$

$$d\Gamma = \frac{mk}{4\pi^2 \hbar^3} |\langle \psi_f | V | \psi_i \rangle| d\Omega \quad (432)$$

Ahora, calculamos el elemento de matriz  $V_{fi}$ :

$$\begin{aligned} \langle \psi_f | V | \psi_i \rangle &= \int d^3d \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{(2\pi)^3/2} \cdot eE_0 \vec{r} \cdot \vec{\epsilon} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} \\ &= \frac{eE_0}{(2a_0)^{3/2} \pi^2} \int d^3r e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} [\vec{r} \cdot \vec{\epsilon}] e^{-r/a_0} \end{aligned}$$

Definimos una integral  $\vec{I}$  tal que:

$$\vec{\epsilon} \cdot \vec{I} = \int d^3r e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} [\vec{r} \cdot \vec{\epsilon}] e^{-r/a_0} \quad (433)$$

Entonces:

$$\vec{I} = \int d^3r e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{r} e^{-r/a_0}$$

y también:

$$I = \int d^3r e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \hat{n} \cdot \vec{r} e^{-r/a_0}$$

Podemos decir que:

$$\vec{I} = \vec{k} I$$

y para conocer I, se tiene que :

$$\begin{aligned} \vec{k} \cdot \vec{k} I &= k^2 I \\ &= \int d^3r e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \vec{k} \cdot \vec{r} e^{-r/a_0} \end{aligned}$$

y si el ángulo que forman  $\vec{k}$  y  $\vec{r}$  es  $\alpha$ :

$$\begin{aligned}
\vec{k} \cdot \vec{r} &= kr \cos \alpha \\
k^2 I &= \int d^3 r e^{ikr \cos \alpha} k r \cos \alpha e^{-r/a_0} \\
&= \int_0^\infty r^2 e^{-r/a_0} dr \int_0^\pi e^{ikr \cos \alpha} k r \cos \alpha \sin \alpha d\alpha \int_0^{2\pi} d\phi \\
&= 2\pi \int_0^\infty r^2 e^{-r/a_0} dr \int_{-1}^1 e^{ikru} k r du \\
&= 2\pi k \int_0^\infty r^3 e^{-r/a_0} \int_{-1}^1 u e^{ikru} du
\end{aligned}$$

y si

$$\begin{aligned}
\int_{-1}^1 u e^{ikru} du &= \left. \frac{u}{ikr} e^{ikru} \right|_{-1}^1 - \int_{-1}^1 \frac{e^{ikru}}{ikr} du \\
&= \frac{e^{ikr}}{ikr} + \frac{e^{-ikr}}{ikr} + \frac{1}{(kr)^2} (e^{ikr} - e^{-ikr}) \\
&= \frac{e^{ikr} + e^{-ikr}}{ikr} + \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{(kr)^2}
\end{aligned}$$

Entonces:

$$\begin{aligned}
k^2 I &= 2\pi k \int_0^\infty \left[ \frac{e^{ikr} + e^{-ikr}}{ikr} + \frac{e^{ikr} - e^{-ikr}}{(kr)^2} \right] r^3 e^{-r/a_0} dr \\
&= 2\pi \left[ \int_0^\infty \frac{e^{(ik-1/a_0)r}}{i} r^2 dr + \int_0^\infty \frac{e^{(ik-1/a_0)r}}{k} r dr + \int_0^\infty \frac{e^{(-ik-1/a_0)r}}{i} r^2 dr - \int_0^\infty \frac{e^{(ik-1/a_0)r}}{k} r dr \right] \\
&= 2\pi \left[ \frac{2!}{i} \left( \frac{1}{(1/a_0 - ik)^3} + \frac{1}{(ik + 1/a_0)^3} \right) + \frac{1!}{k} \left( \frac{1}{(1/a_0 - ik)^2} - \frac{1}{(ik + 1/a_0)^2} \right) \right] \\
&= 2\pi \left[ \frac{2}{i} (a^3 + b^3) + \frac{1}{k} (a^2 - b^2) \right]
\end{aligned}$$

Como conocemos las identidades:

$$\begin{aligned}
a^3 + b^3 &= (a+b)(a^2 - ab + b^2) \\
a^2 - b^2 &= (a+b)(a-b)
\end{aligned}$$

Con esto, nuestra puede ser expresada como:

$$k^2 I = 2\pi(a+b) \left[ \frac{2}{i} (a^2 + ab + b^2) + \frac{a-b}{k} \right] \quad (434)$$

haciendo:

$$\begin{aligned}
a + b &= \frac{1}{1/a_0 - ik} - \frac{1}{1/a_0 + ik} \\
&= \frac{2/a_0}{1/a_0^2 + k^2} \\
&= \frac{2a_0}{1 + a_0^2 k^2}
\end{aligned}$$

así mismo:

$$a^2 + b^2 + ab = \frac{1}{(ik - 1/a_0)^2} + \frac{1}{(ik + 1/a_0)^2} - \frac{1}{k^2 + 1/a_0^2} \quad (435)$$

$$= \frac{2(-k^2 + 1/a_0^2)}{(k^2 + 1/a_0^2)^2} - \frac{1}{k^2 + 1/a_0^2} \quad (436)$$

$$= \frac{-2k^2 + 2/a_0^2 - k^2 - 1/a_0^2}{(k^2 + 1/a_0^2)^2} \quad (437)$$

$$= \frac{-3k^2 + 1/a_0^2}{(k^2 + 1/a_0^2)^2} \quad (438)$$

$$= \frac{-3k^2 a_0^4 + a_0^2}{(a_0^2 k^2 + 1)^2} \quad (439)$$

y finalmente:

$$\begin{aligned}
a - b &= \frac{1}{1/a_0 - ik} - \frac{1}{1/a_0 + ik} \\
&= \frac{2ik}{(1/a_0^2 + k^2)} \\
&= \frac{2ika_0^2}{1 + k^2 a_0^2}
\end{aligned}$$

Volvemos a la expresión original, obteniendo:

$$k^2 I = 2\pi \frac{a_0}{a_0^2 k^2 + 1} \left[ \frac{2 - 3k^2 a_0^4 + a_0^2}{i (a_0^2 k^2 + 1)^2} + \frac{2ia_0^2}{a_0^2 k^2 + 1} \right] \quad (440)$$

$$= \frac{4\pi a_0}{(a_0^2 k^2 + 1)^2} \left[ \frac{-2i(-3k^2 a_0^4 + a_0^2) + 2ia_0^2(a_0^2 k^2 + 1)}{(a_0^2 k^2 + 1)} \right] \quad (441)$$

$$= \frac{32\pi i a_0^2 k^2 a_0^2}{(a_0^2 k^2 + 1)^3} \quad (442)$$

Entonces:

$$\vec{k} I = \frac{32\pi i a_0^5}{(a_0^2 k^2 + 1)^3} \vec{k} = \vec{I} \quad (443)$$

$$I = \frac{32\pi i a_0^5}{(a_0^2 k^2 + 1)^3} \hat{n} \cdot \hat{k} \quad (444)$$

Volviendo a nuestro elemento de matriz obtenemos:

$$\langle \psi_f | V | \psi_i \rangle = \frac{e|E_0|}{(2a_0)^{3/2}\pi^2} \frac{32\pi i a_0^5}{(1+a_0^2 k^2)^3} \hat{n} \cdot \hat{k} \quad (445)$$

Finalmente, llevando nuestro cálculo a la tasa, obtenemos:

$$\begin{aligned} d\Gamma &= \frac{e^2 E_0^2}{(2a_0)^3 \pi^2} \frac{32^2 a_0^{10}}{(1+a_0^2 k^2)^6} \frac{mk^3}{4\pi^2 \hbar^3} d\Omega \\ &= \frac{(32eE_0 a_0^2)^2 (ka_0)^3 m}{32\pi^4 \hbar^3 (1+a_0^2 k^2)^6} d\Omega \\ &= \frac{32m(eE_0 a_0^2)(ka_0)^3}{\pi^4 \hbar^3 (1+a_0^2 k^2)^6} d\Omega \end{aligned}$$

### Problema 2 - Átomo de Hidrógeno:

Consideremos el Hamiltoniano típico de un electrón en el potencial electrostático generado por el núcleo. Este Hamiltoniano es:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{Ze^2}{r} \quad (446)$$

Donde  $\mu$  es la masa reducida del electrón. Si queremos hacer correcciones, debemos considerar principalmente dos fenómenos. Uno de ellos corresponde a efectos relativistas y el otro es el spin del electrón. Estas dos correcciones, nos llevarán al correcto Hamiltoniano que buscamos obtener.

$$K = [m_e^2 c^4 + p^2 c^2]^{1/2} - m_e c^2 \quad (447)$$

Como nos referiremos principalmente a átomos con electrones de baja velocidad con respecto a  $c$  ( $v/c \approx Z\alpha \ll 1$ ), podremos expandir en serie de potencias, obteniendo:

$$K = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{1}{2} \frac{1}{\mu c^2} \left( \frac{p^2}{2\mu} \right) + \dots$$

Aquí hemos reemplazado  $m_e$  por  $\mu$  dado que la relación entre las masas es  $\approx 1/1800$ . Nótese que el primer término corresponde a  $H_0$ , es decir, el hamiltoniano que ya habíamos considerado. El segundo término en la ecuación anterior, representa a la corrección relativista en la energía cinética del Hamiltoniano, y queda dada por:

$$H_K = -\frac{1}{2} \frac{1}{\mu c^2} \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \right)^2 \quad (448)$$

Por otro lado, el estudio relativista en la mecánica cuántica de átomos de un electrón, muestran que la interacción del electrón con el núcleo, no es local y este efecto, es descrito agregando al Hamiltoniano el *Término de Darwin*, que es:

$$H_D = \frac{\hbar^2}{8\mu^2 c^2} (\Delta V)(\vec{r}) \quad (449)$$

Ahora, esto puede ser transformado, dado que  $V(r) = -Ze^2/r$ . y  $\Delta(1/r) = -4\pi\delta(r)$ , con lo que obtenemos:

$$H_D = \frac{\pi Ze^2 \hbar^2}{2\mu^2 c^2} \delta(\vec{r}) \quad (450)$$

Ahora, dado que el electrón, bajo la acción de un potencial electrostático  $\phi(r)$ , está sujeto a la acción de un campo eléctrico  $\vec{E} = -\nabla\phi = -(d\phi(r)/dr)\hat{r}$ , en el marco de referencia donde el electrón está en reposo, se verá también un campo magnético  $\vec{B} = \vec{E} \times \vec{v}/c$ , donde  $\vec{v}$  es la velocidad del electrón. Considerando la expresión de  $\vec{E}$ , obtenemos:

$$\vec{B} = -\frac{1}{m_e c} \frac{d\phi(r)}{dr} \frac{1}{r} \vec{L}$$

Donde  $\vec{L}$  es el momento orbital angular del electrón. El momento magnético del electrón  $(e/m_e c)\vec{S}$  en presencia de este  $\vec{B}$  produce una energía  $-\vec{\mu} \cdot \vec{B}$ , el que agregará un nuevo término al Hamiltoniano:

$$-\vec{\mu} \cdot \vec{B} = \frac{1}{m_e^2 c^2} \frac{1}{r} \left( \frac{dV(r)}{dr} \right) (\vec{L} \cdot \vec{S}), V = e\phi \quad (451)$$

Este calculo sería correcto, si el marco de referencia en reposo del electrón fuera un marco inercial. Como en realidad, lo que tenemos es un marco de referencia acelerado, *Thomas* y *Frenkel* mostraron que esta diferencia en realidad, necesita un factor extra de 1/2, con lo que finalmente obtendremos:

$$H_{LS} = \frac{1}{2} \frac{1}{(\mu c)^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} (\vec{L} \cdot \vec{S}) \quad (452)$$

donde  $V(r) = -Ze^2/r$  y la sustitución  $m_e \rightarrow \mu$  debe ser hecha nuevamente. La energía  $H_{LS}$  es conocida como *acoplamiento spin-orbita*. Ahora, hemos obtenido todas las correcciones, que se reducen a:

$$H = H_0 + H_1 = H_0 + H_K + H_{LS} + H_D \quad (453)$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta - \frac{Ze^2}{r} \quad (454)$$

$$H_K = -\frac{1}{2\mu c^2} \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta \right)^2 \quad (455)$$

$$H_{LS} = \frac{Ze^2}{2\mu^2 c^2} \frac{1}{r^3} (\vec{L} \cdot \vec{S}) \quad (456)$$

$$H_D = \frac{\pi Ze^2 \hbar^2}{2\mu^2 c^2} \delta(\vec{r}) \quad (457)$$

Lo que debemos calcular ahora, es el efecto de la perturbación  $H_1$  en el espectro de  $H_0$ . Como base de autoestados de  $H_0$  tomaremos  $\{|nlm_l m_s\rangle\}$ , donde  $n$  es el número cuántico principal,  $l$  es el momento angular orbital y  $m_l, m_s$  son las componentes a lo largo del eje  $Oz$  del momento angular orbital y de spin, respectivamente (en unidades de  $\hbar$ ). Obviamente, una base equivalente, es la dada por los estados  $|nljm\rangle$ , donde  $j$  es el momento angular total y  $m$  es la tercera componente. Ambas bases están relacionadas por:

$$|nljm\rangle = \sum_{\sigma} C(l1/2j; m - \sigma, \sigma, m) |nlm - \sigma\sigma\rangle. \quad (458)$$

La ventaja de utilizar una base asociada a  $\vec{L}^2, \vec{S}^2, \vec{J}^2, J_z$  es que estos operadores conmutan con  $H_1$  y su matriz de representación será diagonal; Este no es el caso si utilizamos la base asociada a  $\vec{L}^2, L_z, S^2, S_z$ , dado que  $H_{LS}$  no conmuta con  $L_z, S_z$ . Tomando esto en cuenta y estudiando el efecto de  $H_1$  en el espectro de  $H_0$  a primer orden en teoría de perturbaciones, es suficiente para calcular  $\langle nljm|H_1|nljm\rangle$ . Dado que  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ , tenemos:

$$\vec{S} \cdot \vec{L} = \frac{1}{2}[\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2] \quad (459)$$

y entonces, si  $l > 0$ :

$$\langle njlm|H_{LS}|nljm\rangle = \frac{Ze^2\hbar^2}{4\mu^2c^2} \left[ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \langle nljm|r^{-3}|nljm\rangle \quad (460)$$

En el calculo de los elementos de matriz de  $r^{-3}$ , el spin no afecta, y utilizando lo siguiente:

$$\begin{aligned} \langle r^{-3} \rangle_{nl} &= \frac{1}{l(l+1/2)(l+1)n^3} a^{-3}, \quad l \geq 1 \\ \langle r^{-2} \rangle_{nl} &= \frac{1}{(l+1/2)n^3} a^{-2} \\ \langle r^{-1} \rangle_{nl} &= \frac{1}{n^2} a^{-1} \end{aligned}$$

obtenemos

$$\langle nljm|H_{LS}|nljm\rangle = \frac{Ze^2\hbar^2}{4\mu^2c^2} \frac{1}{l(l+1/2)(l+1)n^3a^3} \left[ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \quad (461)$$

donde  $a = \hbar/[\mu(Z\alpha c)]$ . Dado que las energías sin perturbar se pueden escribir como:

$$E_{nl} = -\mu(Z\alpha c)^2/2n^2$$

El resultado obtenido, puede ser escrito también como:

$$\langle nljm|H_{LS}|nljm\rangle = -E_{nl} \frac{(Z\alpha)^2}{n(2l+1)} \left\{ \begin{array}{l} \frac{l}{l+1} \quad j = l + \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{l} \quad j = l - \frac{1}{2} \end{array} \right\}$$

Donde  $l > 0$ . Para valores  $l = 0$ , el valor promedio de  $H_{LS}$  se anula debido al factor  $\vec{S} \cdot \vec{L}$ . Ahora calcularemos la contribución de  $H_K$ . Recordemos que tenemos:

$$\left( \frac{p^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r} \right) |nljm\rangle = E_{nl} |nljm\rangle \quad (462)$$



Así que tenemos:

$$\langle nljm|H_K|nljm\rangle = -\frac{1}{2\mu c^2}\langle nljm|\left(E_{nl} + \frac{Ze^2}{r}\right)^2|nljm\rangle \quad (463)$$

y utilizando las relaciones ya presentadas anteriormente, se obtiene:

$$\langle nljm|H_K|nljm\rangle = -\frac{1}{2\mu c^2}\left[E_{nl}^2 + \frac{2Ze^2E_{nl}}{an^2} + \frac{2Z^2e^4}{(2l+1)n^3a^2}\right] \quad (464)$$

Entonces:

$$\langle nljm|H_K|nljm\rangle = E_{nl}\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\left(\frac{n}{l+1/2} - \frac{3}{4}\right) \quad (465)$$

Finalmente, el término de Darwin, nos da una contribución de:

$$\langle nljm|H_D|nljm\rangle = \frac{\pi Ze^2\hbar^2}{2\mu^2c^2}|\psi_{nlm}(0)|^2 \quad (466)$$

Que es no-nulo únicamente cuando  $l = 0$ :

$$\langle nljm|H_D|nljm\rangle = -E_{nl}\frac{(Z\alpha)^2}{n} \quad (467)$$

Con  $l = 0$ . Reuniendo todas las correcciones calculadas, finalmente, tenemos para todos los valores de  $l$  a primer orden en teoría de perturbaciones, la estructura fina de los niveles de energía de los átomos de un electrón:

$$E_{nlj} = E_{nl}\left\{1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\left[\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4}\right]\right\}$$

Ahora consideremos este átomo de un electrón en un campo magnético. El efecto de un campo magnético, se incluye en el siguiente término del Hamiltoniano:

$$H_M = -\frac{e}{2m_e c}\vec{B}\cdot(\vec{L} + 2\vec{S}) \quad (468)$$

donde  $g_e/2 = 1$  y el término diamagnético  $(e^2/8m_e c^2)(\vec{r}\times\vec{B})^2$  ha sido despreciado. Ahora queremos evaluar el cambio en el estado base  $H_0$  producida por la perturbación  $H_1 + H_M$  a primer orden. Escogemos el marco de referencia tal que  $\vec{B}$  este orientado a lo largo del eje  $z$  positivo:

$$H_M = -\frac{eB}{2m_e c}(L_z + 2S_z) = -\frac{eB}{2m_e c}(J_z + S_z) \quad (469)$$

En la base  $\{|nljm\rangle\}$  previamente utilizada, los cambios en las energías están dadas por los autovalores de una matriz de orden  $2n^2$  para cada  $n$  fijo, con elementos de matriz:  $\langle nl'j'm'|H_1 + H_M|nljm\rangle$ . Obviamente  $H_1$  así como el término en  $H_M$  proporcional a  $J_z$  son diagonales en esta representación, mientras que el término  $S_z$  de  $H_M$ , aunque es diagonal en  $l$  y  $m$ , no es diagonal en  $j$  así que ese es el único término que no se anula. Por lo que los elementos de matriz toman la forma:  $\langle nlj'm|H_1 + H_M|nljm\rangle$ . Esto, junto con la ecuación anterior, nos da:

$$\langle nlj'm|H_1 + H_M|nljm\rangle = \delta_{jj'}\left\{E_{nl}\frac{(Z\alpha)^2}{n^2}\left(\frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4}\right) + \mu_B Bm\right\} + \mu_B B\langle nlj'm|\frac{1}{\hbar}S_z|nljm\rangle \quad (470)$$

Y ahora, utilizamos el cambio de base, con lo que se obtiene:

$$\langle nlj'm | \frac{1}{\hbar} S_z | nlm \rangle = \sum_{\sigma} \sigma C(l1/2j'; m - \sigma, \sigma) C(l1/2j; m - \sigma, \sigma) \quad (471)$$

Entonces, si  $l > 0$  y  $l_{\pm} = l \pm 1/2$ :

$$\langle nll_{\pm}m | \frac{1}{\hbar} S_z | nll_{\pm}m \rangle = \pm \frac{m}{2l_{\pm}} \quad (472)$$

$$\langle nll_{\pm}m | \frac{1}{\hbar} S_z | nll_{\mp}m \rangle = -\frac{1}{2l_{\pm}} \sqrt{l_{\pm}^2 - m^2} \quad (473)$$

mientras que si  $l = 0$  (y entonces  $j = 1/2$ ), tenemos:

$$\langle n01/2m | \frac{1}{\hbar} S_z | n01/2m \rangle = m \quad (474)$$

En conclusión, si  $l \neq 0$ , entonces:

$$\langle nll_{\pm}m | H_1 + H_M | nll_{\pm}m \rangle = E_{nl} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left( \frac{n}{l_{\pm} + 1/2} - \frac{3}{4} \right) + \mu_B B m \frac{2l_{\pm}}{2l_{\pm}} \quad (475)$$

$$\langle nll_{\pm}m | H_1 + H_M | nll_{\mp}m \rangle = -\frac{\mu_B B}{2l_{\pm}} \sqrt{l_{\pm}^2 - m^2} \quad (476)$$

y si  $l = 0$ :

$$\langle n01/2m | H_1 + H_M | n01/2m \rangle = E_{nl} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left( n - \frac{3}{4} \right) + 2\mu_B B m \quad (477)$$

Por otro lado, dado que  $H_1 + H_M$  es diagonal con respecto a  $n, l, m$  es suficiente diagonalizar cada una de las submatrices correspondientes a valores fijos de estos números cuánticos. Las submatrices asociadas a  $n, l, \pm(l + 1/2)$  son 1-dimensionales y dan niveles con energías:

$$E_{n,l,\pm(l+1/2)} = E_{nl} + E_{nl} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left( \frac{n}{l+1} - \frac{3}{4} \right) \pm \mu_B B (l+1) \quad (478)$$

En contraste las submatrices para  $n, l, m$  con  $m \neq \pm(l + 1/2)$  que son matrices de  $2 \times 2$  lo que da lugar a la ecuación secular:

$$\begin{vmatrix} E_{nl} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left( \frac{n}{l+1} - \frac{3}{4} \right) + 2\mu_B B m \frac{l+1}{2l+1} - \epsilon & \frac{\mu_B B}{2l+1} \sqrt{l_{\pm}^2 - m^2} \\ -\frac{\mu_B B}{2l+1} \sqrt{l_{\pm}^2 - m^2} & E_{nl} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left( \frac{n}{l} - \frac{3}{4} \right) + 2\mu_B B m \frac{l}{2l+1} - \epsilon \end{vmatrix} = 0 \quad (479)$$

Dejemos que  $\Delta_{nl}$  sea la separación de energía entre los niveles de estructura fina  $E_{n,l,l+1/2}, E_{n,l,l-1/2}$ .

$$\Delta_{nl} = \left| E_{nl} \frac{(Z\alpha)^2}{n} \frac{1}{l(l+1)} \right| \quad (480)$$

y definiendo:

$$\epsilon' = \epsilon - E_{nl} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left( \frac{n}{l} - \frac{3}{4} \right) \quad (481)$$

La ecuación secular, se transforma en:

$$\begin{vmatrix} \Delta_{nl} + 2m \frac{l+1}{2l+1} \mu_B B - \epsilon' & -\frac{\mu_B B}{2l+1} \sqrt{l_+^2 - m^2} \\ -\frac{\mu_B B}{2l+1} \sqrt{l_+^2 - m^2} & 2m \frac{1}{2l+1} \mu_B B - \epsilon' \end{vmatrix} = 0 \quad (482)$$

Con raíces:

$$\epsilon'^{\pm} = \frac{1}{2} \Delta_{nl} + m \mu_B B \pm \frac{1}{2} \left[ \Delta_{nl}^2 + \frac{4m}{2l+1} \Delta_{nl} \mu_B B + \mu_B^2 B^2 \right]^{1/2} \quad (483)$$

Entonces, los niveles perturbados de energía son:

$$E_{nlm}^{\pm} = E_{nl} + \left[ \frac{1}{2} - (l+1) \left( 1 - \frac{3l}{4n} \right) \right] \Delta_{nl} + m \mu_B B \pm \frac{1}{2} \left[ \Delta_{nl}^2 + \frac{4m}{2l+1} \Delta_{nl} \mu_B B + \mu_B^2 B^2 \right]^{1/2} \quad (484)$$

Si  $m \neq \pm(l+1/2)$ . Y:

$$E_{nl, \pm(l+1/2)} = E_{nl} - l \left[ 1 - \frac{3(l+1)}{4n} \right] \Delta_{nl} \pm \mu_B B (l+1) \quad (485)$$

Entonces, recordemos la primera solución obtenida (el caso sin campo magnético). Lo obtenido fue:

$$E_{nlj} = E_{nl} \left\{ 1 + \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left[ \frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right] \right\}$$

Se sabe que:

$$\begin{aligned} |E_1| &= 13.6eV \\ |E_2| &= \frac{|E_1|}{2^2} = 3.4eV \end{aligned}$$

Consideraremos el caso  $n = 2$ . de modo que:

$$\begin{aligned} j &= l + s \rightarrow \text{y como } l = 0, 1 \text{ y } s = 1/2 \\ j_1 &= \frac{1}{2} \\ j_2 &= \frac{3}{2} \end{aligned}$$

El  $\Delta E_1$  quedará determinado:

$$\Delta E_1 = |E_1| \frac{(Z\alpha)^2}{2^2} \left[ \frac{2}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right]$$

$$\Delta E_1 = |E_1| \frac{(Z\alpha)^2}{2^2} \left[ \frac{2}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right]$$

Reemplazando los valores numéricos y  $j = 1/2$ , se obtiene un valor cercano a:

$$\Delta E_1 = -5.67 \cdot 10^{-5} eV$$

Así mismo, hallamos, que el  $\Delta E_2$  quedará determinado:

$$\Delta E_2 = |E_2| \frac{(Z\alpha)^2}{2^2} \left[ \frac{2}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right]$$

$$\Delta E_2 = |E_2| \frac{(Z\alpha)^2}{2^2} \left[ \frac{2}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right]$$

Reemplazando los valores numéricos y  $j = 3/2$ , se obtiene un valor cercano a:

$$\Delta E_1 = -1.12 \cdot 10^{-5} eV$$

Para el caso con el campo magnético, habíamos encontrado:

$$E_{n,l,\pm(l+1/2)} = E_{nl} + E_{nl} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left( \frac{n}{l+1} - \frac{3}{4} \right) \pm \mu_B B(l+1) \quad (486)$$

y para el caso en que  $m \neq (l+1/2)$

$$E_{n,l,\pm(l+1/2)} = E_{nl} - l \left[ 1 - \frac{3(l+1)}{4n} \right] \Delta_{nl} \pm \mu_B B(l+1) \quad (487)$$

La corrección, se reduce simplemente a:

$$\Delta E_B = 14.45 eV \cdot m_j \left( 1 \pm \frac{1}{2l+1} \right) \quad (488)$$

Consideraremos los casos varios:

$j$	$m$	$\Delta E$
$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$8.74 \cdot 10^{-5} eV$
$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-10.47 \cdot 10^{-5} eV$
$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	$27.81 \cdot 10^{-5} eV$
$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$8.43 \cdot 10^{-5} eV$
$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-10.71 \cdot 10^{-5} eV$
$\frac{5}{2}$	$-\frac{3}{2}$	$-30.01 \cdot 10^{-5} eV$

(489)

### Problema 3 - Átomo de Hidrógeno:

Como se dijo por enunciado, la interacción hiperfina en el átomo de Hidrógeno, debida a la interacción entre los momentos magnéticos del electrón y del protón, (para estados con  $l=0$ ), viene descrita por:

$$H_{eff} = -\frac{8\pi}{3}\vec{\mu}_e \cdot \vec{\mu}_p \delta^3(\vec{r})$$

Considerando que:

$$\vec{\mu}_e = -\frac{e\hbar}{2m_e c}\vec{\sigma}_e = -\frac{eg_e}{2m_e c}\vec{S} \quad (490)$$

$$\vec{\mu}_p = -2.7928 \left( \frac{e\hbar}{2m_p c} \right) \vec{\sigma}_p = \frac{eg_p}{2m_p c}\vec{I} \quad (491)$$

Donde el spin del electrón es  $\vec{S}$  y el spin del protón es  $\vec{I}$ . también se tiene que  $g_e$  y  $g_p$  son los factores giromagnéticos del electrón y del protón. Luego, el Hamiltoniano queda:

$$H_{eff} = -\frac{8\pi}{3} \left( -\frac{e\hbar}{2m_e c}\vec{\sigma}_e \right) \cdot \left( -2.7928 \left( \frac{e\hbar}{2m_p c} \right) \vec{\sigma}_p \right) \delta^3(\vec{r}) \quad (492)$$

$$H_{eff} = -2.7928 \left( \frac{2\pi e^2 \hbar^2}{3m_p m_e c^2} \right) (\vec{\sigma}_e \cdot \vec{\sigma}_p) \delta^3(\vec{r}) \quad (493)$$

$$H_{eff} = -\frac{8\pi}{3} \left( -\frac{eg_e}{2m_e c} \right) \left( \frac{eg_p}{2m_p c} \right) \vec{S} \cdot \vec{I} \delta^3(\vec{r}) \quad (494)$$

con

$$\vec{S} = \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}$$

$$\vec{I} = \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}$$

además, sabemos:

$$\vec{S} \cdot \vec{I} = \frac{1}{2}[(\vec{S} + \vec{I})^2 - \vec{S}^2 - \vec{I}^2] \quad (495)$$

Ahora, lo que nos interesa es reducir esto a algo más familiar. Para ello, utilizaremos las matrices de Pauli. De este modo, podremos tener una expresión en función de  $\vec{F} = \vec{S} + \vec{I}$ . Recordemos las matrices de Pauli:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

ahora, se cumple (meramente es una multiplicación de matrices), que:

$$\vec{\sigma}^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2 = 3 \cdot 1_{2 \times 2} \quad (496)$$

Ahora, buscando las expresiones que nos conviene despejar:

$$\vec{S}^2 = \left(\frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}\right)^2 = \frac{1}{4}\hbar^2\vec{\sigma}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 1_{2 \times 2} \quad (497)$$

$$\vec{I}^2 = \left(\frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}\right)^2 = \frac{1}{4}\hbar^2\vec{\sigma}^2 = \frac{3}{4}\hbar^2 1_{2 \times 2} \quad (498)$$

$$(499)$$

Entonces, ahora si hemos calculado algunos elementos para despejar la identidad descrita anteriormente para  $\vec{S} \cdot \vec{I}$  en (XXXXX):

$$\vec{S} \cdot \vec{I} = \frac{1}{2} \left( \vec{F}^2 - \left[ \frac{3}{4}\hbar^2 1_{2 \times 2} + \frac{3}{4}\hbar^2 1_{2 \times 2} \right] \right) \quad (500)$$

$$\vec{S} \cdot \vec{I} = \frac{1}{2} \left( \vec{F}^2 - \frac{3}{2}\hbar^2 1_{2 \times 2} \right) \quad (501)$$

$$(502)$$

Continuamos trabajando en el Hamiltoniano, que hasta acá nos queda:

$$H_{eff} = -\frac{8\pi}{3} \left( -\frac{eg_e}{2m_e c} \right) \left( \frac{eg_p}{2m_p c} \right) \left( \frac{1}{2} \left\{ \vec{F}^2 - \frac{3}{2}\hbar^2 1_{2 \times 2} \right\} \right) \delta^3(\vec{r}) \quad (503)$$

Consideraremos el estado fundamental del átomo de hidrógeno  $1s(n=1, l=0, m=0)$  pero incluyendo la parte del spin:

$$\psi_{100}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} \chi_{spin} \quad (504)$$

Aquí, es necesario tener en consideración, que los spines del electrón y el protón presentarán un acoplamiento. ¿Por qué se genera esto? Básicamente porque estamos haciendo el producto de dos espacios, que general un nuevo espacio. Los espacios involucrados en este producto, son los espacios de spin de ambas partículas (el electrón y el protón). Matemáticamente esto es:

$$|S, S_z; I, I_z\rangle = |S, S_z\rangle \otimes |I, I_z\rangle$$

Para continuar con el desarrollo, necesitamos los autoestados de los 4 operadores ya mencionados, que son:

$$\begin{aligned} &|1/2, 1/2; 1/2, 1/2\rangle \\ &|1/2, 1/2; 1/2, -1/2\rangle \\ &|1/2, -1/2; 1/2, 1/2\rangle \\ &|1/2, -1/2; 1/2, -1/2\rangle \end{aligned}$$

Con esto, lo que se tiene según lo dicho anteriormente, es:

$$\begin{aligned}
 \vec{S}^2|1/2S_z; 1/2I_z\rangle &= \frac{3}{4}\hbar^2|1/2S_z; 1/2I_z\rangle \\
 \vec{I}^2|1/2S_z; 1/2I_z\rangle &= \frac{3}{4}\hbar^2|1/2S_z; 1/2I_z\rangle \\
 \hat{S}_z|1/2S_z; 1/2I_z\rangle &= \hbar S_z|1/2S_z; 1/2I_z\rangle \\
 \hat{I}_z|1/2S_z; 1/2I_z\rangle &= \hbar I_z|1/2S_z; 1/2I_z\rangle
 \end{aligned}$$

Considerando  $S_z = I_z = \{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}$  y  $S = I = \frac{1}{2}$ .

Cuando definimos el spin total del sistema, tenemos  $\vec{F} = \vec{S} + \vec{I}$  y considerando que los operadores  $\vec{F}^2, \vec{F}_z, \vec{S}^2, \vec{I}^2$  conmutan entre si, podemos cambiar la base a una nueva base tomando:

$$|F, F_z; S, I\rangle = |F, F_z\rangle \quad (505)$$

Los vectores de la nueva base, cumplen:

$$\begin{aligned}
 \vec{S}^2|F, F_z\rangle &= \frac{3}{4}\hbar^2|F, F_z\rangle \\
 \vec{I}^2|F, F_z\rangle &= \frac{3}{4}\hbar^2|F, F_z\rangle \\
 \vec{F}^2|F, F_z\rangle &= F(F+1)\hbar^2|F, F_z\rangle \\
 \hat{F}_z|F, F_z\rangle &= F_z\hbar|F, F_z\rangle
 \end{aligned}$$

Además se cumple que:

$$\begin{aligned}
 -F &\leq F_z \leq F \\
 |I - S| &\leq F \leq I + S
 \end{aligned}$$

En nuestro caso:

$$I = S = \frac{1}{2}$$

Entonces, en la interacción electrón protón, F puede ser 0 y 1. Considerando esto tenemos:

$$\begin{aligned}
 \text{Singlete del atomo} \quad F &= 0 \rightarrow F_z = 0 \\
 \text{Triplete del atomo} \quad F &= 1 \rightarrow F_z = -1, 0, 1
 \end{aligned}$$

Con esto, lo que se tiene es:

$$\begin{aligned}
F = 0 |0, 0; 1/2, 1/2\rangle &= |0, 0\rangle && \text{Singlete} \\
F = 1 |1, -1; 1/2, 1/2\rangle &= |1, -1\rangle && \text{Triplete} \\
F = 1 |1, 0; 1/2, 1/2\rangle &= |1, 0\rangle && \text{Triplete} \\
F = 1 |1, 1; 1/2, 1/2\rangle &= |1, 1\rangle && \text{Triplete}
\end{aligned}$$

Ahora si estamos en condición para calcular el splitting de energía:

$F = 0$  Singlete  $\chi_{spin} = \chi_{00}$

$$\langle E_{F=0} \rangle = \langle \psi_{100} \chi_{00} | H_{eff} | \psi_{100} \chi_{00} \rangle \quad (506)$$

$$= \int d^3 \vec{r} \psi_{100}^* \chi_{100}^* \frac{\pi e^2 g_e g_p}{3 m_e m_p c^2} (\vec{F}^2 - \frac{3}{2} \hbar^2 1_{2x2}) \delta^3(\vec{r}) \psi_{100} \chi_{00} \quad (507)$$

$$= \int d^3 \vec{r} \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} \chi_{00}^* \frac{\pi e^2 g_e g_p}{3 m_e m_p c^2} (\vec{F}^2 - \frac{3}{2} \hbar^2 1_{2x2}) \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0} \chi_{00} \delta^3(\vec{r}) \quad (508)$$

$$= |\psi_{100}|^2 \frac{\pi e^2 g_e g_p}{3 m_e m_p c^2} (0(0+1)\hbar^2 - \frac{3}{2}\hbar^2) \quad (509)$$

$$= -\frac{3}{2} \hbar^2 \left\{ \frac{\pi e^2 g_e g_p}{3 m_e m_p c^2} \right\} \quad (510)$$

$F = 1$  Triplete  $\chi_{spin} = \chi_{1F_z}$

$$\langle E_{F=1} \rangle = \langle \psi_{100} \chi_{1M} | H_{eff} | \psi_{100} \chi_{1M} \rangle \quad (511)$$

$$= \int d^3 \vec{r} \psi_{100}^* \chi_{1M}^* \frac{\pi e^2 g_e g_p}{3 m_e m_p c^2} (\vec{F}^2 - \frac{3}{2} \hbar^2 1_{2x2}) \psi_{100} \chi_{1M} \quad (512)$$

$$= |\psi_{100}(0)|^2 \frac{\pi e^2 g_e g_p}{3 m_e m_p c^2} (1 + (1+1)\hbar^2 - \frac{3}{2}\hbar^2) \quad (513)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{\hbar^2}{\pi a_0^3} \frac{\pi e^2 g_e g_p}{3 m_e m_p c^2} \quad (514)$$

Entonces, la diferencia de energía entre  $F = 0$  y  $F = 1$ , es:

$$\Delta E = \frac{2\hbar^2}{\pi a_0^3} \frac{\pi e^2 g_e g_p}{3 m_e m_p c^2} \quad (515)$$

Los valores numéricos son:



$$\begin{aligned}
\hbar &= 1.055 \times 10^{-30} \text{ kgcm}^2/\text{s} \\
c &= 3 \times 10^{10} \text{ cm/s} \\
a_0 &= 5.29 \times 10^{-9} \text{ cm} \\
m_e &= 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg} \\
m_p &= 1.673 \times 10^{-27} \text{ kg} \\
g_e &\approx 2 \\
g_p &= 5.596 \\
e^2/\hbar c &\approx 1/137
\end{aligned}$$

Luego:

$$\Delta E = 9.449 \times 10^{-21} \text{ kgcm}^2/\text{s}^2 \quad (516)$$

Buscamos la diferencia energética entre los estados  $F = 0$  y  $F = 1$  para calcular la longitud del fotón emitido en la transición entre estos estados. Se tiene:

$$\Delta E = h\nu \quad (517)$$

$$y \quad \nu\lambda = c \quad (518)$$

Entonces, finalmente:

$$\lambda_{emi} = \frac{2c\hbar\pi}{\Delta E} \quad (519)$$

$$\lambda_{emi} = \frac{2\pi \cdot 1.055 \cdot 10^{-30} \cdot 3 \cdot 10^{10}}{9.449 \cdot 10^{-21}} \quad (520)$$

$$\lambda_{emi} = 2.105 \text{ cm} \quad (521)$$

Luego,  $\lambda_{emitida} \approx 21.1 \text{ cm}$

Finalmente, comprendemos que el verdadero fundamental corresponde a  $1s, F = 0$  dado que la energía es menor a la de  $F = 1$ .

# Ayudantía 10

Profesor: Max Bañados

Ayudante : Nicolás Pérez (nrperez@uc.cl)

## Problemas

- Una partícula comienza (en  $t = 0$ ) en el estado  $N$ -ésimo de un pozo potencial infinito. Ahora *agua cae* dentro del potencial y se drena hacia afuera de modo que la base ahora consta de un potencial  $V_0(t)$ , con  $V_0(0) = V_0(T) = 0$ 
  - Resuelva la ecuación exactamente para  $c_m(t)$ , y muestre que la función de onda cambia la fase, pero no ocurren transiciones a otros estados. Encuentre el cambio de fase  $\phi(T)$  en términos de la función  $V_0(T)$ .
  - Analice el mismo problema en teoría de perturbaciones a primer orden y compare.
- Un oscilador cuántico unidimensional consistente en una masa  $m$  suspendida de un resorte con constante elástica  $k$  está inicialmente en el estado de menor energía. En  $t = 0$ , el extremo superior del resorte es repentinamente elevado una distancia  $d$  durante un intervalo de tiempo que es muy corto comparado al periodo del oscilador.
  - De una expresión explícita para los autoestados tiempo dependiente del hamiltoniano para  $t < 0$  y aquellos para  $t > 0$  y discuta la relación entre ellos en el contexto de este problema.
  - Calcule la probabilidad de que una transición haya ocurrido al primer estado excitado como un resultado de la perturbación en  $t = 0$ .

Ahora considere la situación que involucra la alteración en  $t = 0$ , seguida por un intervalo desde  $0 < t < T$ , donde  $T$  es grande comparado con el periodo del ground state y durante el cual el extremo superior del resorte permanece fijo en la posición alterada.

- Deriva la amplitud de probabilidad para el que el oscilador sea encontrado en su primer estado excitado en tiempos  $t > T$ . Es suficiente expresar sus resultados en términos de *elementary overlap integrals*, que no será preciso evaluar en este problema.

Los estados estacionarios de

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{kx^2}{2}$$

son:

$$u_n(x) = N_n H_n(\alpha x) e^{-\frac{\alpha^2 x^2}{2}}$$

con:

$$N_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}} \quad \alpha = \left( \frac{mk}{\hbar^2} \right) \quad H_n(\alpha x) = \text{polinomio de hermite}$$

Cosas útiles:

$$\text{Relacion de recursion : } H_{n+1}(\alpha x) = 2\alpha x H_n(\alpha x) - 2n H_{n-1}(\alpha x) \quad (522)$$

$$H_0(\alpha x) = 1 \quad (523)$$

$$H_1(\alpha x) = 2\alpha x \quad (524)$$

$$H_2(\alpha x) = 4(\alpha x)^2 - 2 \quad (525)$$

3. Considere un trompo simétrico, rodando alrededor de su eje de simetría con momento angular  $J$  diferente de cero. El momento de inercia del trompo es  $I$  y su hamiltoniano está dado por:  $H = J^2/2I$ . Asuma que el trompo es perturbado por un campo magnético  $B$ , con interacción  $H' = -\mu \cdot B$ , donde  $\mu = G \frac{J}{\hbar} \mu_B$  es el momento magnético del trompo,  $G > 0$  y  $m_B$  es el magnetón de Bohr.

- (a) ¿Cuál es la energía del trompo cuando  $B = 0$ ?
- (b) ¿Cuál es la energía del ground-state y la energía del primer estado excitado del trompo que rota cuando  $B = B_0 \hat{z}$ ,  $B_0 > 0$ ?
- (c) Asuma que  $B$  se vuelve tiempo dependiente.

$$B(t) = B_0 \hat{Z}, \quad t < 0 \quad B(t) = B_0 \hat{z} + \Delta B \hat{x} e^{-\lambda t}, \quad t > 0 \quad \text{donde } \Delta B \ll B_0 \text{ y } \lambda \quad (526)$$

Si el trompo está en su primer estado excitado para  $t < 0$ , encuentre la probabilidad de que el trompo esté en el groundstate de la parte (b) para  $t > 0$ .

## Soluciones

### Problema 1:

Cómo fue estudiado en clases, sabemos que dada una función de onda:

$$\Psi(t) = \sum c_n(t) \psi_n e^{-iE_n t/\hbar} \quad (527)$$

para la evolución temporal de los coeficientes se cumple:

$$\dot{c}_m = -\frac{i}{\hbar} \sum_n c_n H'_{mn} e^{i(E_m - E_n)t/\hbar} \quad (528)$$

donde porsupuesto, tenemos:

$$H'_{mn} = \langle \psi_m | H' | \psi_n \rangle \quad (529)$$

Entonces, utilizaremos la siguiente expresión:

$$\dot{c}_m = -\frac{i}{\hbar} \sum_n c_n H'_{mn} e^{i(E_m - E_n)t/\hbar} \quad (530)$$

Tal como ya se ha explicitado antes, tenemos que:

$$H'_{mn} = \langle \psi_m | V_0(t) | \psi_n \rangle = \delta_{mn} V_0(t) \quad (531)$$

Luego, lo que tenemos es:

$$\dot{c}_m = -\frac{i}{\hbar} c_m V_0(t) \quad (532)$$

Esto se traduce simplemente en resolver la ecuación diferencial, con lo que obtenemos:

$$\frac{\dot{c}_m}{c_m} = -\frac{i}{\hbar} V_0(t) \quad (533)$$

Con lo que finalmente se obtiene:

$$c_m(t) = c_m(0) e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t V_0(t') dt'} \quad (534)$$

Para mayor conveniencia, consideremos el argumento de la exponencial como una función del tiempo aparte  $\chi(t)$ . Con esto, se simplifica a:

$$c_m(t) = e^{i\chi(t)} c_m(0) \quad (535)$$

donde  $\chi(t)$  está dado por:

$$\chi(t) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t V_0(t') dt' \quad (536)$$

De esta forma, evidentemente tenemos que:

$$|c_m(t)|^2 = |c_m(0)|^2 \quad (537)$$

De este modo, **no** hay transiciones. Luego,

$$\chi(T) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^T V_0(t) dt \quad (538)$$

que corresponde a lo pedido.

(b) Tenemos la ecuación:

$$C_N(t) \approx 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t H'_{NN}(t') dt' \quad (539)$$

Aplicando obtenemos:

$$c_N(t) \approx 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t V_0(t') dt = 1 + i\chi \quad (540)$$

Por otro lado, tenemos la siguiente ecuación:

$$c_m(t) \approx -\frac{i}{\hbar} \int_0^t H'_{mN} e^{i(E_m - E_N)t'/\hbar} dt' \quad (m \neq N) \quad (541)$$

Luego,

$$c_m(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t \delta_{mN} V_0(t') e^{i(E_m - E_N)t'/\hbar} dt' = 0 \quad (m \neq N) \quad (542)$$

De esto, entonces se tiene:

$$c_N(t) = 1 + i\chi(t) \quad (543)$$

$$c_m(t) = 0 \quad (m \neq N) \quad (544)$$

La respuesta exacta es  $C_N(t) = e^{i\chi(t)}$ . Notemos que todo tiene sentido dado que esto es simplemente la expansión en taylor hasta primer orden.

**Problema 2:**

(a) Para  $t < 0$   $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2$

Las autofunciones de  $H$  son  $u_n(x, t) = u_n(x) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}}$

donde:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (545)$$

nótese que  $u_n(x)$  son dados.

Para  $t > 0$  el sistema es desplazado una distancia  $\Delta x = d$ , de modo que tenemos un hamiltoniano modificado:

$$H' = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}k(x - d)^2 \quad (546)$$

Hagamos  $x' = x - d$ , entonces:

$$H' = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{1}{2}kx'^2 \quad (547)$$

Las autofunciones de  $H$  ahora son:

$$u'_n(x, t) = u_n(x')e^{-iE_n t/\hbar} \quad (548)$$

$$= u_n(x - d)e^{-iE_n t/\hbar} \quad (549)$$

(b) Usamos la aproximación:

$$P_{01} = |\langle u_0(x)|u_1(x - d)\rangle|^2 = |\langle u_0|T|u_1\rangle|^2 \quad (550)$$

Nótese que  $T$  es simplemente el operador de traslación:

$$T = e^{-ipd/\hbar} \quad (551)$$

$$p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}(a^\dagger - a) \quad (552)$$

Luego, el producto es:

$$\langle u_0|T|u_1\rangle = \langle u_0|e^{-\lambda(a-a^\dagger)}|u_1\rangle \quad (553)$$

donde, evidentemente:

$$\lambda = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}d \quad (554)$$

Luego, trabajando el operador, tenemos:

$$e^{-\lambda(a-a^\dagger)} = \sum_n \frac{1}{n!} (-\lambda)^n (a - a^\dagger)^n \quad (555)$$

$$\approx 1 - \lambda(a - a^\dagger) \quad \text{para pequeño desplazamiento.} \quad (556)$$

Tenemos entonces:

$$\langle u_0|T|u_1\rangle \approx -\lambda \langle u_0|a - a^\dagger|u_1\rangle = -\lambda \quad (557)$$

Luego, la probabilidad es:

$$P_{01} = \lambda^2 = \frac{m\omega}{2\hbar}d^2 \quad (558)$$

(c) Una perturbación es encendida en  $t = 0$ :

$$H = H_0 + H' \quad (559)$$

$$H' = -kdx + \frac{1}{2}kd^2 \quad (560)$$

La teoría de perturbaciones dependiente del tiempo nos lleva a calcular:

$$\frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^T e^{-i\omega_{fi}L'} H'_{fi}(t') dt' \right|^2 \quad (561)$$

pue este cálculo nos permite obtener la probabilidad. En esta ecuación, se tiene que:

$$\omega_{fi} = \frac{E_1 - E_0}{\hbar} \quad (562)$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (563)$$

Luego, si queremos obtener el producto interno que aparece en la integral ya mencionada:

$$H_{10} = \langle u_1(x) | H' | u_0(x) \rangle = -ka \langle u_1(x) | x | u_0(x) \rangle \quad (564)$$

Y este producto, está dado por:

$$\langle u_1(x) | x | u_0(x) \rangle = N_1 N_0 \int H_1(x) x H_0(x) e^{-\alpha x^2} \quad (565)$$

$$= N_1 N_0 \frac{1}{2\alpha} \int (H_1(x) + 2H_0(x)) H_0(x) e^{-\alpha x^2} dx \quad (566)$$

$$= \frac{N_1 N_2}{\alpha} \int H_0^2(x) e^{-\alpha x^2} dx = \frac{N_1}{N_0 \alpha} \quad (567)$$

Finalmente, la probabilidad está dada por:

$$P_{01} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{N_1^2}{N_0^2 \alpha^2} \left| \int_0^T e^{-i\omega t'} dt' \right|^2 \quad (568)$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \frac{N_1^2}{N_0^2 \alpha^2} \frac{4}{\omega^2} \sin^2 \left( \frac{\omega t}{2} \right) \quad (569)$$

### Problema 3:

(a) Tenemos que la energía estará dada por:

$$E_0 = \frac{\hbar^2 j(j+1)}{2I} \quad (570)$$

donde  $j$  es el número cuántico de momento angular.

(b) Ahora consideramos el campo magnético:

$$H = \frac{J^2}{2I} - \frac{G\mu_B}{\hbar} \vec{J} \cdot \vec{B} \quad (571)$$

$$= \frac{J^2}{2I} - \frac{G\mu_B}{\hbar} B_0 J_z \quad (572)$$

Los autoestados de H son denotados como  $|j, m\rangle$  donde  $(m = -j, -j+1, \dots, j)$ . Luego, tenemos:

$$H|j, m\rangle = \left( \frac{\hbar^2 j(j+1)}{2I} - \frac{G\mu_B}{\hbar} B_0 \hbar m \right) |j, m\rangle \quad (573)$$

donde el ground state es  $m = j$  y el primer estado excitado es  $m = j-1$  Luego, tenemos:

$$E_0 = \frac{\hbar^2 j(j+1)}{2I} - G\mu_B B_0 j \quad (574)$$

$$E_1 = \frac{\hbar^2 j(j+1)}{2I} - G\mu_B B_0 (j-1) \quad (575)$$

(c) La teoría dependiente del tiempo nos lleva a:

$$P_{if}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i\omega_{fi}t'} W_{fi}(t') dt' \right|^2 \quad (576)$$

donde  $H = H_0 + W(t)$

Ahora, tenemos que la perturbación es:

$$W(t) = -\frac{G\mu_B \Delta B}{\hbar} J_x e^{-\lambda t} \quad i = 1 \quad (|j, j-1\rangle), \quad f = 0 \quad (|j, j\rangle) \quad (577)$$

Luego, tenemos:

$$W_{fi}(t') = \langle j, j | \left( -\frac{G\mu_B \Delta B}{\hbar} J_x \right) | j, j-1 \rangle e^{-\lambda t'} \quad (578)$$

Luego, recordamos que:

$$\langle j, j | J_x | j, j-1 \rangle = \frac{\hbar}{2} \sqrt{j(j+1) - (j-1)j} = \frac{\hbar}{2} \sqrt{2j} \quad (579)$$

Aquí, hemos utilizado

$$2J_x = J_+ + J_-$$

Luego, tenemos que:

$$W_{fi}(t') = -\frac{G\mu_B \Delta B}{2} \sqrt{2j} e^{-\lambda t'} \quad (580)$$

Recordando que:

$$\omega_{fi} = \frac{E_0 - E_1}{\hbar} = -\frac{G\mu_B B_0}{\hbar} \quad (581)$$

Finalmente:

$$P_{10} = \left( \frac{G\mu_B \Delta B}{2\hbar} \right)^2 2j \left| \int_0^t e^{-i\frac{G\mu_B B_0}{\hbar} t'} e^{-\lambda t'} dt' \right|^2 \quad (582)$$

Sea

$$\bar{\lambda} = iG\mu_B \frac{B_0}{\hbar} + \lambda \quad (583)$$

Luego,

$$\int_0^t e^{-\bar{\lambda} t'} dt' = -\frac{1}{\bar{\lambda}} (e^{-\bar{\lambda} t} - 1) \quad (584)$$

Finalmente, tenemos que la probabilidad de transición es:

$$P_{10}(t) = \left( \frac{G\mu_B \Delta B}{2\hbar} \right)^2 2j \frac{1}{|\bar{\lambda}|^2} |e^{-\bar{\lambda} t} - 1|^2 \quad (585)$$



# Ayudantía 11

*Profesor: Max Bañados*

*Ayudante : Nicolás Pérez (nrperez@uc.cl)*

## Problemas

1. Una partícula de masa  $m$  y carga eléctrica  $e$ , moviéndose en una dimensión, está confinada a un intervalo de largo  $a$  y está sujeta a un campo eléctrico uniforme  $E$ . Inicialmente está en el autoestado de la energía cinética con autovalor  $E_k = k^2 \pi^2 \hbar^2 / 2ma^2$ , donde  $k$  es un entero. Encuentre, a primer orden en  $e^2$ , la probabilidad de que después de un tiempo  $t$  su energía cinética será encontrada en  $E_l$  donde  $k \neq l$ .
2. Considere dos spines  $1/2$ .  $\vec{S}_1$  y  $\vec{S}_2$ , acoplados por una interacción de la forma  $a(t)\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ ;  $a(t)$  es una función del tiempo que se aproxima a cero cuando  $|t|$  se aproxima a infinito, y toma valores no despreciables (del orden  $a_0$ ) solo dentro de un intervalo, cuyo ancho es del orden de  $\tau$ , cerca de  $t = 0$ .

- (a) En  $t = -\infty$ , el sistema está en el estado  $|+, -\rangle$  (un autoestado de  $S_{1z}$  y  $S_{2z}$  con autovalores  $+\hbar/2$  y  $-\hbar/2$ ). Calcule, con aproximaciones, el estado del sistema en  $t = +\infty$ . Muestre que la probabilidad  $\mathcal{P}(+- \rightarrow -+)$  de encontrar, en  $t = +\infty$ , el sistema en el estado  $|-, +\rangle$  depende solo de la integral:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} a(t) dt$$

- (b) Calcule  $\mathcal{P}(+- \rightarrow -+)$  usando teoría de perturbaciones tiempo dependiente a primer orden. Discuta las condiciones de validez para tal aproximación comparando los resultados obtenidos con aquellos de la pregunta que precede.
- (c) Ahora asuma que los dos spines están también interactuando con un campo magnético estático  $\vec{B}_0$  paralelo a  $O_z$ . El correspondiente hamiltoniano Zeeman puede ser escrito como:

$$H_0 = -B_0(\gamma_1 S_{1z} + \gamma_2 S_{2z}) \quad (586)$$

donde  $\gamma_1$  y  $\gamma_2$  son las razones giromagnéticas de los dos spines, asumidos a ser diferentes. Asuma que  $a(t) = a_0 e^{-t^2/\tau^2}$ . Calcule  $\mathcal{P}(+- \Rightarrow -+)$  por teoría de perturbaciones dependientes del tiempo. Con fijo  $a_0$  y  $\tau$ , discuta la variación  $\mathcal{P}(+- \Rightarrow -+)$  con respecto a  $B_0$ .

## Soluciones

**Problema 1:** Tenemos que el Hamiltoniano es:

$$H = H_0 + W \quad (587)$$

tenemos el potencial:

$$V = 0 \quad 0 \leq x \leq a \quad (588)$$

$$V = \infty \quad \text{en cualquier otro punto} \quad (589)$$

Las autofunciones de  $H_0$  son:

$$\phi_k(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{k\pi x}{a}\right) \quad (590)$$

donde estas autofunciones tienen autovalores

$$E_k = \frac{k^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (591)$$

Asumamos que el campo eléctrico apunta en la dirección  $x$ . La energía potencial de una partícula en este campo es  $-eEx$ , con el cero del potencial en  $x = 0$ . Tenemos entonces:

$$W = -eEx \quad (592)$$

De modo que la teoría de perturbaciones dependiente del tiempo a primer orden nos lleva a:

$$P_{lk} = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t e^{i(E_l - E_k)t'/\hbar} \langle l|W(t')|k\rangle dt' \right|^2 \quad (593)$$

Entonces, debemos calcular el producto interno, dado por:

$$\langle l|W(t')|k\rangle = - \int_0^a \phi_l(x) eEx \phi_k(x) dx \quad (594)$$

$$= -eE \left(\frac{2}{a}\right) \int_0^a x \sin\left(\frac{l\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{k\pi x}{a}\right) dx \quad (595)$$

$$= -eE \left(\frac{2}{a}\right) \int_0^a x \frac{1}{2} \left\{ \cos(k+l)\frac{\pi x}{a} - \cos(k-l)\frac{\pi x}{a} \right\} dx \quad (596)$$

$$= \frac{eE}{a} \int_0^a x \cos\left(\frac{(k+l)\pi x}{a}\right) dx - \frac{eE}{a} \int_0^a x \cos\left(\frac{(k-l)\pi x}{a}\right) dx \quad (597)$$

Haciendo cambio de variables, tenemos:

$$\langle l|W(t')|k\rangle = \frac{eE}{a} \frac{a^2}{(k+l)^2 \pi^2} \int_0^{(k+l)\pi} x \cos x dx - \frac{eE}{a} \frac{a^2}{(k-l)^2 \pi^2} \int_0^{(k-l)\pi} x \cos x dx \quad (598)$$

Luego, recordemos como se resuelve esta integral:

$$\int x \cos x dx = \cos x + x \sin x \quad (599)$$

Luego, este producto se resuelve:

$$\langle l|W(t')|k\rangle = \frac{eEa}{\pi^2} \left( \frac{\cos(k+l)\pi - 1}{(k+l)^2} - \frac{\cos(k-l)\pi - 1}{(k-l)^2} \right) \quad (600)$$

Ojo! Tenemos que hacer una distinción:

Si  $(k+l)$  es par:

$$\cos(k+l)\pi = \cos(k-l)\pi = 1 \quad \implies \langle l|W(t')|k\rangle = 0 \quad (601)$$

Si  $(k+l)$  es impar:

$$\cos(k+l)\pi = \cos(k-l)\pi = -1 \quad (602)$$

Entonces, el prudcto interno queda como:

$$\langle l|W(t')|k\rangle = \frac{eEa}{\pi^2} (-2) \left( \frac{(k-l)^2 - (k+l)^2}{(k+l)^2(k-l)^2} \right) = \frac{8eEakl}{\pi^2(k^2 - l^2)^2} = W_{lk} \quad (603)$$

Entonces, la probabilidad de transición será:

$$P_{kl}(k+l = \text{impar}) = \frac{1}{\hbar^2} W_{kl}^2 \left| \int_0^t e^{i(E_l - E_k)t'/\hbar} dt' \right|^2 \quad (604)$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} W_{kl}^2 \frac{4\hbar^2}{(E_l - E_k)^2} \sin^2 \frac{E_l - E_k}{2\hbar} t \quad (605)$$

$$= W_{kl}^2 \frac{1}{(E_l - E_k)^2} 4 \sin^2 \left( \frac{1}{2} \frac{E_l - E_k}{\hbar} t \right) \quad (606)$$

Notese que:

$$E_l - E_k = (l^2 - k^2) \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \quad (607)$$

Con esto, tenemos:

$$\frac{W_{lk}^2}{(E_l - E_k)^2} = \frac{256k^2 l^2 E^2 a^6 e^2 m^2}{\pi^8 \hbar^2 (k^2 - l^2)^6} \quad (608)$$

**Problema 2:**

- (a) Primero, queremos calcular la probabilidad  $\mathcal{P}(+- \implies -+)$  sin aproximaciones. Para ellos, introducimos los términos del hamiltoniano en un operador explícitamente dependiente del tiempo. Podemos resolver para  $u(t, -\infty)$ :

$$i\hbar \frac{\partial u(t, -\infty)}{\partial t} = Hu(t, -\infty) \implies u(t, -\infty) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 \int_{-\infty}^t a(t') dt'\right) \quad (609)$$

Luego, tenemos:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t a(t') dt' \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2} |+-\rangle \quad (610)$$

Consideremos:

$$\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 \quad (611)$$

Luego, tenemos:

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = \frac{1}{2}(\vec{S}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2) \quad (612)$$

Entonces, nuestra expresión para la función de onda es:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t a(t') dt' \frac{1}{2}(\vec{S}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2)} \quad (613)$$

Ahora, **¿Qué obtenemos con la aplicación de los operadores?**

$$\vec{S}_1^2 |+-\rangle = \vec{S}_2^2 |+-\rangle = \frac{3}{4} \hbar^2 |+-\rangle \quad (614)$$

$$\vec{S}^2 |+-\rangle \quad (615)$$

Necesitamos mirar en la base  $|s m_s\rangle$ :

$$|1 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+-\rangle + |-+\rangle] \quad (616)$$

$$|0 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+-\rangle - |-+\rangle] \quad (617)$$

Ojo que necesitamos esto porque:

$$\vec{S}^2 |s m\rangle = \hbar^2 s(s+1) |s m\rangle \quad (618)$$

Entonces, se deduce:

$$|+-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|10\rangle + |00\rangle] \quad (619)$$

Recordando (sin aplicar esto que acabamos de obtener sino que simplemente aplicando los operadores 1 y 2) obtenemos para la función de onda:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t a(t') dt' \frac{1}{2}(\vec{S}^2 - \frac{3}{2}\hbar^2)} |+-\rangle \quad (620)$$

Ahora, ¿qué obtendríamos aplicando la exponencial de  $\vec{S}^2$ ?

$$e^{\vec{S}^2} |+- \rangle = e^{\vec{S}^2} \frac{1}{\sqrt{2}} [|10\rangle + |00\rangle] = \frac{1}{\sqrt{2}} [e^{2\hbar^2} |10\rangle + |00\rangle] \quad (621)$$

Luego, la función de onda queda simplemente como:

$$|\psi(t)\rangle = [e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t a(t') dt' \frac{\hbar^2}{4}} |10\rangle + e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t a(t') dt' \hbar^2 (-\frac{3}{4})} |00\rangle] \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (622)$$

$$= e^{-\frac{i\hbar}{4} \int_{-\infty}^t a(t') dt'} \left( \frac{1}{2} |+- \rangle + |-+\rangle \right) + e^{\frac{3i\hbar}{4} \int_{-\infty}^t a(t') dt'} \left( \frac{1}{2} (|+- \rangle - |-+\rangle) \right) \quad (623)$$

Entonces, finalmente, la probabilidad pedida, en un tiempo  $t = \infty$  está dada por:

$$\mathcal{P}(+- \Rightarrow -+) \text{ en } t = \infty = \frac{1}{4} \left| e^{-\frac{i\hbar}{4} \int_{-\infty}^{\infty} a(t') dt'} - e^{\frac{3i\hbar}{4} \int_{-\infty}^{\infty} a(t') dt'} \right|^2 \quad (624)$$

$$= \frac{1}{4} \left| e^{\frac{i\hbar}{4} \int_{-\infty}^{\infty} a(t') dt'} \right|^2 \left| e^{-\frac{i\hbar}{2} \int_{-\infty}^{\infty} a(t') dt'} - e^{\frac{i\hbar}{2} \int_{-\infty}^{\infty} a(t') dt'} \right|^2 \quad (625)$$

La respuesta final está dada por:

$$\mathcal{P}(+- \Rightarrow -+) = \sin^2 \left( \frac{\hbar}{2} \int_{-\infty}^{\infty} a(t') dt' \right) \quad (626)$$

- (b) Ahora, nos piden que trabajemos con teoría de perturbaciones dependiente del tiempo a primer orden, esto es:

$$\mathcal{P}(+- \Rightarrow -+) = \left| \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} W_{fi} e^{i\omega_{fi} t'} dt' \right|^2 \quad (627)$$

donde  $\omega_{fi} = 0$  (asumiendo  $H = H_0 + a(t) \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ ,  $H_0 = 0$ )

Luego, calculamos el producto interno:

$$W_{fi} = \langle -+ | a(t) \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 | +- \rangle \quad (628)$$

$$= \langle -+ | \frac{a(t)}{2} (\vec{S}^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2) | +- \rangle \quad (629)$$

$$= \langle -+ | \frac{a(t)}{2} \hbar^2 (\vec{S}^2 / \hbar^2) | +- \rangle + \langle -+ | \frac{a(t)}{2} | -\frac{3}{2} \hbar^2 | +- \rangle \quad (630)$$

Nótese que este segundo producto se anula por ortogonalidad. Tenemos:

$$W_{fi} = \frac{a(t) \hbar^2}{2\sqrt{2}} \langle -+ | \vec{S}^2 / \hbar^2 (|00\rangle + |10\rangle) \rangle \quad (631)$$

$$= \frac{a(t) \hbar^2}{2\sqrt{2}} 2 \langle -+ | 10 \rangle \quad (632)$$

$$= \frac{a(t) \hbar^2}{2} \quad (633)$$

Finalmente la probabilidad es:

$$\mathcal{P}(+- \Rightarrow -+) = \left| \frac{1}{\hbar} \frac{\hbar^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} a(t') dt' \right|^2 \quad (634)$$

$$= \left( \frac{\hbar}{2} \int_{-\infty}^{\infty} a(t') dt' \right)^2 \quad (635)$$

(c) Lo que tenemos en esta parte del problema es que se incluye un campo magnético estático que interactúa con los campos magnéticos. Nos dan el hamiltoniano zeeman y la forma de  $a(t)$ :

$$H_0 = -B_0(\gamma_1 S_{1z} + \gamma_2 S_{2z}) \quad (636)$$

$$a(t) = a_0 e^{-t^2/\tau^2} \quad (637)$$

Queremos calcular  $\mathcal{P}(+- \Rightarrow -+)$ . En este caso,  $\omega_{fi} = \hbar^{-1}(E_f - E_i)$ . La energía inicial y final son:

$$E_i = \langle +- | H_0 | +- \rangle \quad (638)$$

$$= -B_0(\gamma_1 \frac{\hbar}{2} - \gamma_2 \frac{\hbar}{2}) \quad (639)$$

$$= \frac{B_0 \hbar}{2} (\gamma_2 - \gamma_1) \quad (640)$$

$$E_f = \langle -+ | H_0 | -+ \rangle \quad (641)$$

$$= -B_0(-\gamma_1 \frac{\hbar}{2} + \gamma_2 \frac{\hbar}{2}) \quad (642)$$

$$= \frac{-B_0 \hbar}{2} (\gamma_2 - \gamma_1) \quad (643)$$

Esto nos deja con:

$$\omega_{fi} = B_0(\gamma_1 - \gamma_2) \quad (644)$$

Entonces, la probabilidad está dada por:

$$P(+- \Rightarrow -+) = \frac{\hbar^2}{4} \left( \int_{-\infty}^{+\infty} a_0 e^{-t^2/\tau^2} e^{i\omega_{fi}t} dt \right)^2 \quad (645)$$

$$= \frac{\hbar^2 a_0^2}{4} \left( \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2/\tau^2} e^{i\omega_{fi}t} dt \right)^2 \quad (646)$$

$$= \frac{\hbar^2 a_0^2}{4} \left( \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(t/\tau - i\omega_{fi}\tau/2)^2} dt \right)^2 \quad (647)$$

$$= \frac{\hbar^2 a_0^2}{4} e^{\omega_{fi}^2 \tau^2 / 4} \pi \tau^2 \quad (648)$$

$$= \frac{\hbar^2 a_0^2 \pi \tau^2}{4} e^{B_0^2 (\gamma_1 - \gamma_2)^2 \tau^2 / 4} \quad (649)$$

Nótese como la exponencial depende de  $B_0$

# Ayudantía 12

*Profesor: Max Bañados*

*Ayudante : Nicolás Pérez (nrperez@uc.cl)*

## Aproximación de Born y Scattering

Cuando hablamos de la teoría de scattering cuántica, imaginamos una onda plana incidente del tipo  $\psi(z) = Ae^{ikz}$ , viajando en la dirección  $z$ , que se encuentra con un potencial de scattering generando una onda esférica saliente. De este modo, buscamos por soluciones a la ecuación de Schrodinger de la forma general:

$$\psi(r, \theta) \approx A \left\{ e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} \right\} \quad \text{para } r \text{ grande.} \quad (650)$$

Ojo: La onda esférica debe acarrear el factor de  $1/r$  para que  $|\psi|^2$  vaya como  $1/r^2$  para conservar la probabilidad. El problema acá es determinar  $f(\theta)$  que corresponde a la **amplitud de scattering**. Esta te dice la *probabilidad de scattering en una dirección dada*  $\theta$ . Esto se traduce en:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \quad (651)$$

Es decir, la sección eficaz diferencial es igual al cuadrado de la amplitud de scattering (que es obtenida resolviendo la ecuación de schrodinger).

## Métodos de Resolución

- Ondas Parciales
- Aproximación de Born

Para entender la aproximación de Born, es útil tener en mente la forma integral de la ecuación de Schrodinger:

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|} V(\mathbf{r}_0)\psi(\mathbf{r}_0)d^3\mathbf{r}_0 \quad (652)$$

Se obtiene:

$$f(\theta, \phi) \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_0} V(\mathbf{r}_0)d^3\mathbf{r}_0 \quad (653)$$

Para el caso de scattering de baja energía, el factor exponencial es esencialmente constante sobre la región de scattering y la aproximación de Born se simplifica a:

$$f(\theta, \phi) \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \quad \text{baja energía} \quad (654)$$

## Problemas

1. (a) Calcule, usando la aproximación de Born, la sección eficaz diferencial y total para el scattering de partículas de masa  $m$  con el potencial de Yukawa.

$$V(r) = V_0 \left( \frac{r_0}{r} \right) e^{-\frac{r}{r_0}}$$

En el proceso de cálculo de la sección eficaz total deberá encontrar una variable de integración astuta para llevar a cabo la integración angular. Estudie los casos especiales de baja energía ( $1 \gg kr_0$ ) así como de alta energía ( $kr_0 \gg 1$ ) donde  $k = \sqrt{2mE}/\hbar$

- (b) Muestre que cuando se toma el límite  $V_0 \rightarrow 0$ ,  $r_0 \rightarrow \infty$ , de modo que se cumpla  $V_0 r_0 = Z_1 Z_2 e^2 = cte$ , proceso que conduce al potencial de Coulomb

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r},$$

la sección eficaz diferencial obtenida en a) deviene en la famosa fórmula de Rutherford

$$\frac{d\sigma_{Coul}(\theta)}{d\Omega} = \left[ \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2mv^2} \right]^2 \frac{1}{\sin^4(\frac{\theta}{2})}$$

Comente sobre la sección eficaz total. Es un hecho curioso que esto coincida con el resultado clásico y, más notable aún, que el cálculo clásico conduzca a la misma sección eficaz diferencial.

2. (a) A una energía de centro de masa de 5 MeV, los corrimientos de fase que describe el scattering elástico de un neutrón con un cierto núcleo tienen los siguientes valores:  $\delta_0 = 30$ ,  $\delta_1 = 10$ . Suponiendo que todos los otros corrimientos de fase son despreciables, grafique  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  como función del ángulo de scattering. Explícitamente, calcule  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  para 30, 45 y 90. ¿Cuánto vale la sección eficaz total?
- (b) El hecho que los otros corrimientos de fase  $\delta_2, \delta_3, \dots$  sean despreciables, ¿qué implica respecto al rango del potencial? Trate de ser lo más cuantitativo posible. Recuerde la relación integral que satisfacen los corrimientos de fase
3. Use la aproximación de Born para encontrar, hasta una constante multiplicativa, la sección eficaz diferencial de scattering para una partícula de masa  $m$  moviéndose en un potencial repulsivo:

$$V = Ae^{-r^2/a^2} \tag{655}$$



## Soluciones

### Problema 1:

(a) De clases, tenemos que:

$$f(\theta, \phi) \approx -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}_0} V(\vec{r}_0) d^3r_0$$

y cuando utilizamos la aproximación de Born con el potencial de Yukawa esto se reduce a:

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\kappa\hbar^2} \int V(r_0) r_0 \sin(\kappa r_0) dr_0$$

Considerando la simetría esférica del problema, vemos inmediatamente la independencia de  $\phi$ . Por otro lado, se tiene que:

$$\kappa = 2k \sin(\theta/2)$$

Reemplazando esto en lo anterior:

$$\begin{aligned} f(\theta) &= -\frac{2m}{\kappa\hbar^2} \int V_0 \frac{r_0}{r} e^{-\frac{r}{r_0}} r \sin(\kappa r) dr \\ f(\theta) &= -\frac{2mV_0r_0}{\kappa\hbar^2} \int e^{-\frac{r}{r_0}} \sin(\kappa r) dr \\ f(\theta) &= -\frac{2mV_0r_0}{\kappa\hbar^2} \int e^{-\frac{r}{r_0}} \frac{1}{2i} (e^{i\kappa r} - e^{-i\kappa r}) dr \\ f(\theta) &= -\frac{2mV_0r_0}{\kappa\hbar^2 2i} \int (e^{-\frac{r}{r_0} + i\kappa r} - e^{-\frac{r}{r_0} - i\kappa r}) dr \\ f(\theta) &= -\frac{2mV_0r_0}{\hbar^2(\kappa^2 + r_0^{-2})} \end{aligned}$$

Volvamos a recordar que:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$$

A partir de esto calculamos la sección eficaz diferencial:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{(4k^2 \sin^2(\theta/2) + r_0^{-2})^2} \left( \frac{-2mV_0r_0}{\hbar^2} \right)^2$$

Notemos que la dependencia en  $k$  solo está presente en:

$$\frac{1}{(4k^2 \sin^2(\theta/2) + r_0^{-2})^2} = \left( \frac{r_0^2}{4k^2 r_0^2 \sin^2(\theta/2) + 1} \right)^2$$

Luego, considerando el caso de  $kr_0 \ll 1$  (baja energía) podemos aproximar:

$$\begin{aligned} \left( \frac{r_0^2}{4k^2 r_0^2 \sin^2(\theta/2) + 1} \right)^2 &\approx r_0^4 (1 + 8k^2 r_0^2 \sin^2(\theta/2)) \\ &\approx r_0^4 \end{aligned}$$

y considerando el caso de  $kr_0 \gg 1$  (alta energía) podemos aproximar a

$$\left( \frac{r_0^2}{4k^2 r_0^2 \sin^2(\theta/2) + 1} \right)^2 \approx \left( \frac{1}{4k^2 \sin^2(\theta/2)} \right)^2$$

Por último, si integramos la sección eficaz diferencial obtenemos:

$$\begin{aligned}\sigma &= \int |f(\theta)|^2 d\Omega \\ \sigma &= \int \frac{-2mV_0r_0}{\hbar^2} \frac{1}{(4k^2 \sin^2(\theta/2) + r_0^{-2})^2} d\Omega \\ \sigma &= \frac{-2mV_0r_0}{\hbar^2} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{\sin\theta d\theta d\phi}{(4k^2 \sin^2(\theta/2) + r_0^{-2})^2} \\ \sigma &= 4\pi \left( \frac{-2mV_0(r_0)^2}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{r_0^{-2} + 4 \frac{8mE}{\hbar^2}}\end{aligned}$$

(b) Es obvio que si  $r_0 \rightarrow \infty$  tendremos que

$$\frac{r}{r_0} \rightarrow 0$$

Entonces, el potencial de Yukawa se vuelve:

$$V_0 \left( \frac{r_0}{r} \right) e^{-\frac{r}{r_0}} \Rightarrow \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}$$

Utilizando esto en lo anterior para la sección eficaz diferencial, se tiene:

$$r_0 \rightarrow \infty \quad \Rightarrow \quad r_0^{-2} \rightarrow 0$$

Luego,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \rightarrow \left( \frac{-2mZ_1 Z_2 e^2}{\hbar^2 4k^2 \sin^2(\theta/2)} \right)^2$$

Finalmente, utilizando  $p = mv = \hbar k$ :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left( \frac{-Z_1 Z_2 e^2}{2mv^2 \sin^2(\theta/2)} \right)^2$$

## Problema 2:

(a) Recordemos que

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin(\delta_l) P_l(\cos\theta) \right|^2$$

Solo consideramos los dos primeros corrimientos:

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{1}{k^2} |e^{i\delta_0} \sin(\delta_0) + 3e^{i\delta_1} \sin(\delta_1) \cos\theta|^2 \\ &= \frac{1}{k^2} |(\cos\delta_0 \sin\delta_0 + 3\cos\delta_1 \sin\delta_1 \cos\theta) + i(\sin^2\delta_0 + 3\sin^2\delta_1 \cos\theta)| \\ &= \frac{1}{k^2} [\sin^2\delta_0 + 9\sin^2\delta_1 \cos^2\theta + 6\sin\delta_0 \sin\delta_1 \cos(\delta_1 - \delta_0) \cos\theta] \\ &= \frac{1}{k^2} [0.25 + 0.27\cos^2\theta + 0.49\cos\theta]\end{aligned}$$

donde han sido utilizados los datos dados. Luego, si integramos:

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{4\pi}{k^2} (\sin^2\delta_0 + 3\sin^2\delta_1)$$

De modo que evaluando en los ángulos indicados:

$$\sigma_T = \frac{4\pi}{k^2} (0.34)$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{k^2} [0.25 + 0.27\cos^2\theta + 0.49\cos\theta]$$

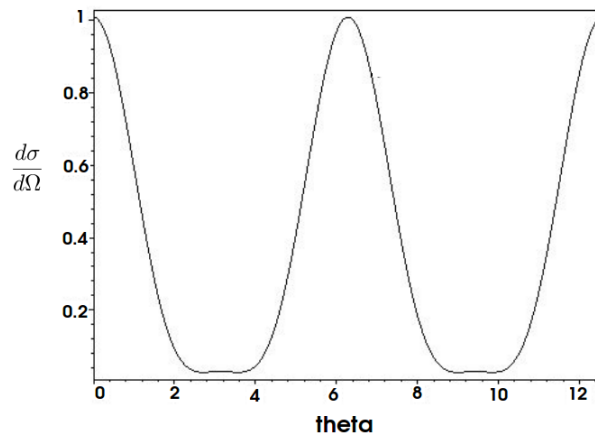
Luego,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}_{30} = \frac{1}{k^2} 0.87685$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}_{45} = \frac{1}{k^2} 0.73148$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}_{90} = \frac{1}{k^2} 0.25$$

Grafiquemos  $\frac{d\sigma}{d\Omega}$  en función de  $\theta$  ( $k=1$ ):



(b) Para responder esta parte del problema, recordemos que

$$\delta_l \approx -\frac{2mk}{\hbar^2} \int_0^\infty V(r) j_l^2(kr) r^2 dr$$

donde  $j_l(x)$  es una función esférica de Bessel.

Si  $\delta_l$  es despreciable para  $l > 1$  esto quiere decir que el integrando es muy pequeño  $\rightarrow kr \approx 1$  en el rango del potencial, i.e:

$$R \approx \frac{1}{k}$$

En este rango la integral no es despreciable.

### Problema 3:

En la aproximación de Born tenemos:

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{-\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} V(r) e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} d^3r \quad (656)$$

donde  $\mathbf{k}'$ ,  $\mathbf{k}$  son respectivamente los vectores de las onda incidente y scattereadas respectivamente. Sea  $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ , con  $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}| = k$  para un scattering elástico. Tenemos:

$$f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty V(r)r^2 dr \int_0^\pi e^{-iqr\cos\theta'} 2\pi\sin\theta' d\theta' \quad (657)$$

$$= -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty V(r) \frac{\sin(qr)}{qr} r^2 dr \quad (658)$$

Con esto, tenemos:

$$f(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty rV(r)\sin(qr)dr \quad (659)$$

donde  $q = 2k\sin(\theta/2)$ ,  $\hbar k$  es el momentum de la partícula incidente.

Tenemos:

$$f(\theta) = -\frac{2mA}{\hbar^2 q} \int_0^\infty r e^{-r^2/a^2} \sin(qr) dr \quad (660)$$

$$= -\frac{mA}{\hbar^2 q} \int_{-\infty}^\infty r e^{-r^2/a^2} \sin(qr) dr \quad (661)$$

$$= \frac{mAA^2}{2\hbar^2 q} \int_{-\infty}^\infty (e^{-r^2/a^2})' \sin(qr) dr \quad (662)$$

$$= -\frac{mAA^2}{2\hbar^2} \int_{-\infty}^\infty e^{-r^2/a^2} \cos(qr) dr \quad (663)$$

$$= -\frac{mAA^3}{2\hbar^2} \int_{-\infty}^\infty \cos(qa\frac{r}{a}) d(\frac{r}{a}) \quad (664)$$

$$= -\frac{mAA^3}{2\hbar^2} \int_{-\infty}^\infty e^{-r^2} \cos(qar) de \quad (665)$$

$$= -\frac{mAA^3}{4\hbar^2} \int_{-\infty}^\infty \left\{ \text{ext}\left[-\left(r - \frac{iqa}{2}\right)^2\right] + \text{exp}\left[-\left(r + \frac{iqa}{2}\right)^2\right] \right\} e^{-q^2 a^2/4} dr \quad (666)$$

$$= -\frac{mAA^3}{2\hbar^2} \sqrt{\pi} e^{-q^2 a^2/4} \quad (667)$$

Luego:

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{m^2 A^2 a^6}{4\hbar^4} \pi e^{-q^2 a^2/2} \quad (668)$$

# Ayudantía 13

*Profesor: Max Bañados*

*Ayudante : Nicolás Pérez (nrperez@uc.cl)*

## Problemas

- 1.
- 2.
- 3.

## Soluciones

**Problema 1:**

**Problema 2:**

**Problema 3:**

## 2 Aproximación WKB

### 2.1 Problemas Resueltos

#### 2.1.1 Problema 1

Un oscilador armónico unidimensional truncado viene descrito por el potencial:

$$V(x) \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 - b^2) & \text{si } |x| < b \\ 0 & \text{si } |x| > b \end{cases} \quad (669)$$

- (a) Use la aproximación WKB para estimar las energías de los estados ligados.
- (b) Encuentre la condición para que exista solamente un estado ligado. Esta condición ha de depender de  $m, \omega$  y  $b$ .

#### Solución

Lo que tenemos aquí es el problema de un oscilador truncado. En este problema, vemos que existen tres zonas en las que se divide el potencial. Para las zonas  $x > b$  y  $x < -b$ , se tiene que el potencial es cero. Pero en la zona  $-b < x < b$  se tiene un potencial determinado. Dependiendo de la cantidad de energía que tenga el oscilador, veremos como se comporta y cuáles son los valores de energía. Sabemos que existe un punto en el que el oscilador “se devuelve”; Este punto es el determinado punto de retorno y sabemos de su existencia por las características del problema (El hecho de que sea un oscilador).

Lo que tenemos entonces es lo siguiente:

$$\int_{-x_0}^{x_0} p(x) dx = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi$$
$$p(x) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))}$$

Entonces, se cumple lo siguiente:

$$\int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(x))} dx = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi$$
$$\int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 - b^2)\right)} dx = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi$$

Ahora, lo que nosotros sabemos es que cuando  $x = x_0$ ,  $E = V$ , de modo que puedo escribir  $E$  en función de el punto de retorno  $x_0$

$$E(x_0) = V(x_0) = \frac{1}{2}m\omega^2(x_0^2 - b^2) \quad (670)$$

Con esto, la ecuación anterior se transforma en:

$$\int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left(\frac{1}{2}m\omega^2(x_0^2 - b^2) - \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 - b^2)\right)} dx = \left(n + \frac{1}{2}\right) \pi$$

Reduciendo términos, se obtiene:

$$\begin{aligned} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left( \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right)} dx &= \left( n + \frac{1}{2} \right) \pi \\ \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{\frac{m^2 \omega^2}{\hbar^2} (x_0^2 - x^2)} dx &= \left( n + \frac{1}{2} \right) \pi \\ \frac{m\omega}{\hbar} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{(x_0^2 - x^2)} dx &= \left( n + \frac{1}{2} \right) \pi \\ \frac{m\omega x_0}{\hbar} \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{\left( 1 - \left( \frac{x}{x_0} \right)^2 \right)} dx &= \left( n + \frac{1}{2} \right) \pi \end{aligned}$$

Como la función es par, hacemos el cambio:

$$\frac{2m\omega x_0}{\hbar} \int_0^{x_0} \sqrt{\left( 1 - \left( \frac{x}{x_0} \right)^2 \right)} dx = \left( n + \frac{1}{2} \right) \pi$$

Haciendo el reemplazo  $x/x_0 = \text{sen}\theta$  ( $dx = x_0 \cos\theta d\theta$ ), los límites de integración pasan a ser:

$$\begin{aligned} x = 0 &\implies \theta = 0 \\ x = x_0 &\implies \theta = \frac{\pi}{2} \end{aligned}$$

y la integral nos queda:

$$\begin{aligned} \frac{2m\omega x_0}{\hbar} \int_0^{\pi/2} x_0 \cos^2 \theta d\theta &= \left( n + \frac{1}{2} \right) \pi \\ \frac{2m\omega x_0}{\hbar} \int_0^{\pi/2} \frac{x_0}{2} (1 + \cos 2\theta) d\theta &= \left( n + \frac{1}{2} \right) \pi \\ \frac{2m\omega x_0}{\hbar} \frac{x_0}{2} \frac{\pi}{2} &= \left( n + \frac{1}{2} \right) \pi \\ \frac{m\omega x_0^2}{2\hbar} &= \left( n + \frac{1}{2} \right) \pi \\ x_0^2 &= \frac{2\hbar}{m\omega} \left( n + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

Es aquí donde detenemos el cálculo y recordamos que la energía estaba expresada en función del valor de  $x_0$ . Recordemos:

$$E = \frac{1}{2} m\omega^2 (x_0^2 - b^2)$$

Reemplazando por el valor de  $x_0$  que acabamos de obtener, la energía queda dada por la siguiente expresión:



$$E = \frac{1}{2}m\omega^2 \left( \frac{2\hbar}{m\omega} \left( n + \frac{1}{2} \right) - b^2 \right)$$

$$E = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2}m\omega^2 b^2$$

Ahora, para que exista un estado ligado, debemos exigir:

$$E_0 < 0$$

$$E_1 > 0$$

Lo que nos lleva a la condición:

$$\frac{1}{2}\hbar\omega - \frac{1}{2}m\omega^2 b^2 < 0$$

$$\frac{3}{2}\hbar\omega - \frac{1}{2}m\omega^2 b^2 > 0$$

Entonces:

$$1 < \frac{m\omega b^2}{\hbar} < 3 \quad (671)$$

## 3 Átomo de Hidrógeno

### 3.1 Problemas Resueltos

#### 3.1.1 Problema 1

#### 3.1.2 Problema 2

#### 3.1.3 Problema 3

Discutamos el caso general de interacción, con un campo magnético externo, es decir cuando no podemos afirmar a priori si el Hamiltoniano de interacción magnética (despreciando el término cuadrático diamagnético y la interacción hiperfina) es dominante o perturbativo frente al acoplamiento spin-órbita (tenemos en mente el átomo de Hidrógeno).

Procedemos entonces a diagonalizar el Hamiltoniano completo para el caso  $n=2$ , partiendo con los autoestados que ya diagonalizan el Hamiltoniano hasta el nivel de acoplamiento spin-órbita. Encuentre los elementos de matriz no diagonales relevantes provenientes de la interacción con el campo magnético. De allí se puede en principio obtener el espectro. Ud. verá que solamente hay elementos no diagonales entre los estados  $2^2P_{3/2}$ ,  $2^2P_{1/2}$  cuando ambos tienen  $m_j = \pm\frac{1}{2}$ . Por consiguiente, los resultados que obtuvieramos en clase para el caso del Efecto Zeeman débil son exactos para los estados  $2^2P_{1/2}$  y  $2^2P_{3/2}$  con  $M_j = \pm\frac{1}{2}$ . Encuentre los autovalores de esa matriz de  $2 \times 2$ , correspondientes al espectro exacto en este caso.

### Solución

Tenemos que  $n = 2$ ,  $l = 0, 1$  y  $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ . Además  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ .

Nuestra base se escribe  $|n, j = l + \frac{1}{2}, m_j, l\rangle$ . Es claro que tenemos 8 estados en nuestro problema. Para  $S_{1/2}$ , tenemos:

$$\begin{aligned} &|2, 1/2, 1/2, 0\rangle \\ &|2, 1/2, -1/2, 0\rangle \end{aligned}$$

Para  $P_{1/2}$ , tenemos:

$$\begin{aligned} &|2, 1/2, 1/2, 1\rangle \\ &|2, 1/2, -1/2, 1\rangle \end{aligned}$$

Finalmente, considerando  $P_{3/2}$ , tenemos:

$$\begin{aligned} &|2, 3/2, 3/2, 1\rangle \\ &|2, 3/2, 1/2, 1\rangle \\ &|2, 3/2, -1/2, 1\rangle \\ &|2, 3/2, -3/2, 1\rangle \end{aligned}$$

En este caso, utilizaremos la perturbación spin órbita  $\mathcal{H}_{SO}$ . Esto es porque no podemos considerar al campo magnético  $B$  como una perturbación.

$$H = -\frac{e}{2m_e c^2} (L_z + 2S_z) \vec{B} = -\frac{eB}{2m_e c^2} (J_z + S_z) \quad (672)$$

Lo que debemos hacer ahora, es considerar la acción de los operadores:

$$\begin{aligned} \langle n, l \pm \frac{1}{2}, m_j, l | J_z + S_z | n, l \pm \frac{1}{2}, m_j, l \rangle &= \hbar m_j \left( 1 \pm \frac{1}{2l+1} \right) \\ \langle n, l + \frac{1}{2}, m_j, l | J_z + S_z | n, l - \frac{1}{2}, m_j, l \rangle &= \frac{-\hbar}{2l+1} \sqrt{\left( l + \frac{1}{2} \right)^2 - m_j^2} \end{aligned}$$

Entonces, la matriz obtenida es:

$$M = \frac{e\hbar B}{m_e c^2} \begin{bmatrix} -1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/6 & 0 & 0 & \sqrt{2}/6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/6 & 0 & 0 & \sqrt{2}/6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}/6 & 0 & 0 & -1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}/6 & 0 & 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (673)$$

Dado que no es diagonal en la base, debemos diagonalizar dos matrices de 2x2. Estas matrices son:

$$A = \begin{bmatrix} -1/6 & \sqrt{2}/6 \\ \sqrt{2}/6 & -1/3 \end{bmatrix} \quad (674)$$

Nótese que la matriz anterior corresponde a  $P_{1/2}$  con  $m_j = \frac{1}{2}$  y  $P_{3/2}$  con  $m_j = \frac{1}{2}$  y además:

$$B = \begin{bmatrix} 1/6 & \sqrt{2}/6 \\ \sqrt{2}/6 & 1/3 \end{bmatrix} \quad (675)$$

Esta matriz corresponde a los elementos  $P_{1/2}$  con  $m_j = -\frac{1}{2}$  y  $P_{3/2}$  con  $m_j = -\frac{1}{2}$ . Diagonalizaremos estas matrices y obtendremos autovalores. Para la matriz A, se obtiene:

$$\text{Autovalor} = 0 \quad \text{Autovector asociado} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (676)$$

$$\text{Autovalor} = -1/2 \quad \text{Autovector asociado} = \begin{pmatrix} -\sqrt{2}/2 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (677)$$

$$(678)$$

Para la matriz B, se obtiene:

$$\text{Autovalor} = 1/2 \quad \text{Autovector asociado} = \begin{pmatrix} \sqrt{2}/2 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (679)$$

$$\text{Autovalor} = 0 \quad \text{Autovector asociado} = \begin{pmatrix} -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (680)$$

### 3.1.4 Problema 4

## Problema 16

Suponga que se tiene una situación en que el efecto de la interacción con un campo magnético externo es dominante frente a la interacción spin-órbita (Efecto Paschen-Back). Trabajando en la “vieja” base, donde los estados se rotulan de la forma  $|l, s, l_z, s_z\rangle$ , encuentre el espectro del Efecto Zeeman en este caso y grafique la evolución de los niveles frente a los niveles originales del átomo del Hidrógeno para el caso  $n = 2$  (estados S y P). A continuación conecte la interacción spin-órbita como una perturbación y encuentre la corrección al espectro al primer orden.

Nota: Manténgase en la vieja base, que es la base apropiada en este caso, en contraposición con el efecto Zeeman anómalo débil que discutiéramos en clase.

### Solución

Si consideramos el efecto Paschen Back tenemos que el Hamiltoniano viene dado por:

$$H = H_0 + \frac{e}{2m_e c} (\vec{L} + g_s \vec{S}) \cdot \vec{B}$$

Donde  $H_0$  es el Hamiltoniano del átomo de Hidrógeno sin correcciones. Algo que puede ser muy útil para hacer el producto punto será localizar el campo magnético en la dirección del eje z, sin pérdida de generalidad (simplemente escogemos un sistema de referencia), con lo que el Hamiltoniano de interacción queda:

$$H_1 = \frac{eB}{2m_e c} (L_z + 2S_z)$$

Acá usamos el hecho de que  $g_s = 2.003 \approx 2$ .

Estamos considerando el caso en que el campo magnético es dominante frente a la interacción spin órbita no es necesario pasar a la base con J (momento angular total) por lo que trabajamos en la base recomendada en el enunciado, en esta base tanto  $L_z$  como  $S_z$  son diagonales, por lo que:

$$\Delta E = \langle l, s, l_z, s_z | H_1 | l, s, l_z, s_z \rangle = \frac{eB}{2m_e c} \langle l, s, l_z, s_z | (L_z + 2S_z) | l, s, l_z, s_z \rangle$$

Los operadores de este Hamiltoniano actúan del siguiente modo:

$$(L_z + 2S_z) | l, s, l_z, s_z \rangle = \hbar(l_z + 2s_z) | l, s, l_z, s_z \rangle$$

De modo que la corrección al átomo de Hidrógeno debida al campo Magnético es:

$$\frac{eB\hbar}{2m_e c} (l_z + 2s_z)$$

donde  $l_z$  va desde -l hasta l y  $s_z$  desde -s hasta s.

Se nos exige evaluar el espectro con el valor  $n = 2$ , por lo que tenemos  $l = 0, 1$  y como se trata del átomo de hidrógeno  $s = 1/2$ . Para el estado 2S tenemos:

$$| l, s, l_z, s_z \rangle = | 0, 1/2, 0, +1/2 \rangle \rightarrow \Delta E = \frac{eB\hbar}{2m_e c}$$

$$| l, s, l_z, s_z \rangle = | 0, 1/2, 0, -1/2 \rangle \rightarrow \Delta E = -\frac{eB\hbar}{2m_e c}$$

Es posible notar que la degeneración inicial  $g = (2l+1)(2s+1) = 2$  de este estado 2S es eliminada por completo. Y para el estado 2P tenemos:

$$| l, s, l_z, s_z \rangle = | 1, 1/2, -1, +1/2 \rangle \rightarrow \Delta E = 0$$

$$| l, s, l_z, s_z \rangle = | 1, 1/2, -1, -1/2 \rangle \rightarrow \Delta E = -\frac{eB\hbar}{m_e c}$$

$$| l, s, l_z, s_z \rangle = | 1, 1/2, 0, +1/2 \rangle \rightarrow \Delta E = \frac{eB\hbar}{2m_e c}$$

$$| l, s, l_z, s_z \rangle = | 1, 1/2, 0, -1/2 \rangle \rightarrow \Delta E = -\frac{eB\hbar}{2m_e c}$$

$$| l, s, l_z, s_z \rangle = | 1, 1/2, +1, +1/2 \rangle \rightarrow \Delta E = \frac{eB\hbar}{m_e c}$$

$$| l, s, l_z, s_z \rangle = | 1, 1/2, +1, -1/2 \rangle \rightarrow \Delta E = 0$$

Tenemos que este estado tiene degeneración  $g = (2l+1)(2s+1) = 6$  (en el inicio), que se reduce a degeneración 2.

Ahora, nos preocupamos de la corrección spin-órbita. El  $H_{interaccion}$  está dado por:

$$H_2 = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \vec{S} \cdot \vec{L} \frac{1}{r^3}$$

Como la interacción spin-órbita tiene un valor muy pequeño nos mantenemos en la misma base. Entonces, la corrección a primer orden para este caso está dada por:

$$\begin{aligned} \Delta E_2 &= \langle l, s, l_z, s_z | H_2 | l, s, l_z, s_z \rangle = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \langle l, s, l_z, s_z | (\vec{S} \cdot \vec{L} \frac{1}{r^3}) | l, s, l_z, s_z \rangle \\ &= \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \langle l, s, l_z, s_z | (\vec{S} | l, s, l_z, s_z \rangle \langle l, s, l_z, s_z | \vec{L} | l, s, l_z, s_z \rangle \langle l, s, l_z, s_z | \frac{1}{r^3}) | l, s, l_z, s_z \rangle \\ &= \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} (\hbar s \cdot \hbar l) \langle l, s, l_z, s_z | \frac{1}{r^3} | l, s, l_z, s_z \rangle \end{aligned}$$

Ahora el elemento de matriz se calculará integrando en el espacio de coordenadas para cada caso.

Las integrales a resolver son:

$$\int_0^\infty R_{2S}^* \frac{1}{r^3} R_{2S} r^2 dr = \int_0^\infty R_{2S}^* \frac{1}{r} R_{2S} dr$$

$$\int_0^\infty R_{2P}^* \frac{1}{r^3} R_{2P} r^2 dr = \int_0^\infty R_{2P}^* \frac{1}{r} R_{2P} dr$$

donde se tiene que:

$$R_{2S} = \frac{1}{\sqrt{2}} a^{-3/2} \left(1 - \frac{r}{2a}\right) e^{-r/2a}$$

$$R_{2P} = \frac{1}{2\sqrt{6}} a^{-5/2} r e^{-r/2a}$$

En el caso 2S, tenemos que  $l=0$ , de modo que la corrección de energía es nula, por lo que solo debemos calcular:

$$I_2 = \int_0^\infty R_{2P}^* \frac{1}{r^3} R_{2P} r^2 dr = \frac{1}{24a^3}$$

Y las correcciones serán:

**2S:**

$$|l, s, l_z, s_z\rangle = |0, 1/2, 0, +1/2\rangle \rightarrow \Delta E_2 = 0$$

$$|l, s, l_z, s_z\rangle = |0, 1/2, 0, -1/2\rangle \rightarrow \Delta E_2 = 0$$

**2P:**

$$|l, s, l_z, s_z\rangle = |1, 1/2, -1, +1/2\rangle \rightarrow \Delta E_2 = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{24a^3} = \frac{e^2 \hbar^2}{96m_e^2 c^2 a^3}$$

$$|l, s, l_z, s_z\rangle = |1, 1/2, -1, -1/2\rangle \rightarrow \Delta E_2 = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{24a^3} = \frac{e^2 \hbar^2}{96m_e^2 c^2 a^3}$$

$$|l, s, l_z, s_z\rangle = |1, 1/2, 0, +1/2\rangle \rightarrow \Delta E_2 = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{24a^3} = \frac{e^2 \hbar^2}{96m_e^2 c^2 a^3}$$

$$|l, s, l_z, s_z\rangle = |1, 1/2, 0, -1/2\rangle \rightarrow \Delta E_2 = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{24a^3} = \frac{e^2 \hbar^2}{96m_e^2 c^2 a^3}$$

$$|l, s, l_z, s_z\rangle = |1, 1/2, +1, +1/2\rangle \rightarrow \Delta E_2 = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{24a^3} = \frac{e^2 \hbar^2}{96m_e^2 c^2 a^3}$$

$$|l, s, l_z, s_z\rangle = |1, 1/2, +1, -1/2\rangle \rightarrow \Delta E_2 = \frac{e^2}{2m_e^2 c^2} \frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{24a^3} = \frac{e^2 \hbar^2}{96m_e^2 c^2 a^3}$$

### 3.1.5 Problema 5

a) Evalúe el orden de magnitud de la interacción entre el campo magnético de una onda plana y el spin de los electrones atómicos, mostrando que es menor que la perturbación correspondiente al  $H_{int}$  entre la “materia” y un campo electromagnético externo discutida en clases. (¡Ojo: se pide un número y no una argumentación de tipo existencialista!)

b) Considere una onda electromagnética plana, que avanza a lo largo del eje  $z$ , polarizada circularmente a la derecha (polarización o helicidad positiva). Demuestre que, si se absorbe un fotón con helicidad positiva, el

átomo pasa de  $m_j \rightarrow m_j + 1$ ; viceversa, demuestre que si se emite un fotón, entonces  $m_j \rightarrow m_j - 1$ ; asimismo, si el átomo se encontraba en el estado  $|j, m_j = j\rangle$ , al absorber un fotón de helicidad positiva pasa al estado  $|j + 1, m_j = j + 1\rangle$

### Solución

a) El Hamiltoniano  $H_{int}$  para las interacciones Spin-CampoMagnético(CA) y Materia-CA estará dado por

$$H_{int/SB} = -\vec{\mu}_B \cdot \vec{B} \quad (681)$$

$$H_{int/MB} = -\frac{e}{mc} \vec{P} \cdot \vec{A} \quad (682)$$

Podemos reescribir esto, considerando:

$$\mu_{spin} = -\frac{ge}{2m_e c} \vec{S}$$

Además, sabemos que  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ , en donde:

$$\vec{A} = \sum_{\vec{k}\lambda} \left\{ \frac{\vec{A}_{\vec{k}\lambda}}{\sqrt{V}} \vec{\lambda} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} + \frac{A_{\vec{k}\lambda}^\dagger}{\sqrt{V}} \vec{\lambda}^* e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} \right\}$$

Por otro lado, para una onda plana se cumple lo siguiente:

$$\vec{\nabla} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} = -i\vec{k} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$$

Donde hemos utilizado identidades del rotor. Además:

$$|\vec{k} \times \vec{\lambda}| = k\lambda$$

El campo magnético queda dado finalmente por:

$$|\vec{B}| = kA \quad (683)$$

Y el Hamiltoniano queda como:

$$|H_{int/SB}| \approx \frac{e\hbar BS}{mc} = \frac{e\hbar kAS}{mc} = \frac{e\hbar kA}{2mc} \quad (684)$$

Aquí ha sido utilizado  $g = 2$  y ha sido transformado  $\vec{S}$  según:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

Buscamos relaciones entre módulos, ya que buscamos una relación numérica, pero no buscamos específicamente el valor de los H.

Si analizamos  $H_{int/MB}$ :

$$H_{int/MB} = -\frac{e}{mc} \vec{P} \cdot \vec{A}$$

Analicemos ahora, el caso del autoestado  $|1S\rangle$  del átomo de Hidrógeno; Conocemos la siguiente relación:

$$\vec{\nabla} \varphi_{1s} = -\frac{1}{a_0} \varphi_{1s} \hat{r}$$

De modo que nos es posible escribir:

$$\vec{P} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} = \frac{\hbar}{ia_0} \hat{r}$$

Y podremos hallar una expresión para  $H_{int/MB}$ .

$$\begin{aligned} H_{int/MB} &= -\frac{e}{mc} \vec{P} \cdot \vec{A} \\ \rightarrow H_{int/MB} &= -\frac{e}{mc} \frac{\hbar}{ia_0} \hat{r} \cdot \vec{A} \\ \Rightarrow |H_{int/MB}| &= \frac{e}{mc} \frac{\hbar}{a_0} A \end{aligned} \quad (685)$$

Entonces, podemos mezclar las ecuaciones anteriores y obtendremos:

$$\begin{aligned} \frac{|H_{int/SB}|}{|H_{int/MB}|} &\approx \frac{\frac{e\hbar k A}{2mc}}{\frac{e}{mc} \frac{\hbar}{a_0} A} \\ \frac{|H_{int/SB}|}{|H_{int/MB}|} &\approx \frac{ka_0}{2} \end{aligned} \quad (686)$$

Si escogemos  $\lambda = 3000\text{Å}$ , ( $k = 2\pi/\lambda$ ).

$$\frac{|H_{int/SB}|}{|H_{int/MB}|} \approx 5,5 \times 10^{-4}$$

Queda demostrado.

**b)** Queremos demostrar la posibilidad de una cierta transición en la condición del enunciado. Para ello, demostraremos la no nulidad de los elementos de matriz

$$\langle n | \vec{\lambda} \cdot \vec{J} | m \rangle \quad (687)$$

Utilizamos ahora la aproximación dipolar:

$$\langle n | \vec{\lambda} \cdot \vec{J} | m \rangle = -\lambda\omega \langle n | \vec{\lambda} \cdot \vec{r} | m \rangle$$

Tomando en cuenta que la onda viaja en la dirección  $\hat{z}$ , los estados de polarización circular arrojan:

$$\begin{aligned} \vec{\lambda}_1 &= (\hat{i} + i\hat{j}) \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \vec{\lambda}_2 &= (\hat{i} - i\hat{j}) \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

En primer lugar, estudiaremos el proceso de absorción: Como la helicidad es positiva, utilizaremos  $\vec{\lambda}_1$ . Usamos este elemento de matriz en coordenadas esféricas, es decir:

$$\vec{r} = (r \sin\theta \cos\varphi, r \sin\theta \sin\varphi, r \cos\theta)$$

Entonces

$$-\lambda\omega \langle n | \vec{\lambda} \cdot \vec{r} | m \rangle = -\lambda\omega \langle n | (\hat{i} + i\hat{j}) \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \vec{r} | m \rangle$$

$$\begin{aligned}
&= -\lambda\omega \langle n | (\hat{i} + i\hat{j}) \cdot (r\sin\theta\cos\varphi\hat{i} + r\sin\theta\sin\varphi\hat{j} + r\cos\theta\hat{k}) \frac{1}{\sqrt{2}} | m \rangle \\
&= -\frac{\lambda\omega}{\sqrt{2}} \langle n | r\sin\theta\cos\varphi + ir\sin\theta\sin\varphi | m \rangle
\end{aligned}$$

Se obtiene:

$$\sin\theta(\sin\theta\cos\varphi + i\sin\theta\sin\varphi) = (\sin\theta)^2 e^{i\varphi}$$

Finalmente, recordando la forma de los autoestados, separando la parte radial, de la angular y la asimutal, se tiene que

$$-\lambda\omega \langle n | \vec{\lambda} \cdot \vec{r} | m \rangle \alpha \int e^{i\varphi} e^{-in\varphi} e^{im\varphi}$$

Esta integral no será nula solamente si  $1 - n + m \neq 0$

$$\rightarrow n = m + 1$$

De modo que si ocurre la transición dada.

El caso de la emisión es igual, a excepción de que debemos operar con  $\vec{\lambda}_1^{*\star}$ , lo que resulta en:

$$-\lambda\omega \langle n | \vec{\lambda}^* \cdot \vec{r} | m \rangle \alpha \int e^{-i\varphi} e^{-in\varphi} e^{im\varphi}$$

Haciendo lo mismo,  $1 - m + n = 0$

$$\rightarrow n = m - 1$$

Quedando demostrado lo solicitado.

### 3.1.6 Problema 6

## 4 Cuantización Campo Electromagnético

### 4.1 ¿Qué es el operador de campo electromagnético?

### 4.2 Problemas Resueltos

#### 4.2.1 Problema 1

a) Muestre que el operador de campo electromagnético cuántico satisface las siguientes relaciones de conmutación:

$$\left[ \vec{A}_{\vec{k}, \vec{\lambda}}^{(op)}, \vec{A}_{\vec{k}', \vec{\lambda}'}^{(op)} \right] = \left[ \vec{A}_{\vec{k}, \vec{\lambda}}^{(op)\dagger}, \vec{A}_{\vec{k}', \vec{\lambda}'}^{(op)\dagger} \right] = 0$$

$$\left[ \vec{A}_{\vec{k}, \vec{\lambda}}^{(op)}, \vec{A}_{\vec{k}', \vec{\lambda}'}^{(op)\dagger} \right] = \frac{2\pi\hbar c}{k} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}^3 \vec{\lambda} \cdot \vec{\lambda}'^* \quad (688)$$

b) ¿Cuál es el Hamiltoniano del campo electromagnético en términos de  $A_{\vec{k}, \vec{\lambda}}^{(op)}$  y  $A_{\vec{k}, \vec{\lambda}}^{(op)\dagger}$

### Solución

Tenemos que los operadores actúan de la siguiente manera:



$$\begin{aligned}\vec{A}_{\vec{k},\vec{\lambda}}|N_{k_1,\lambda_1}, N_{k_2,\lambda_2}, \dots, N_{k\lambda}\dots\rangle &= \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega}\right)^{1/2} \lambda\sqrt{N_{k\lambda}}|N_{k_1,\lambda_1}\dots N_{k\lambda}-1\dots\rangle \\ \vec{A}_{\vec{k},\vec{\lambda}}^\dagger|N_{k_1,\lambda_1}, N_{k_2,\lambda_2}, \dots, N_{k\lambda}\dots\rangle &= \left(\frac{2\pi\hbar c^2}{\omega}\right)^{1/2} \lambda\sqrt{N_{k\lambda}+1}|N_{k_1,\lambda_1}\dots N_{k\lambda}+1\dots\rangle\end{aligned}$$

Calculo de conmutadores:

$$[\vec{A}_{\vec{k},\vec{\lambda}}^{(op)}, \vec{A}_{\vec{k}',\vec{\lambda}'}^{(op)}] = 0$$

Para demostrar esto, Consideramos:

$$[A_{k\lambda}, \vec{A}_{k'\lambda'}]|\dots, N_{k\lambda}\dots\rangle = |N_{k\lambda}\rangle \times \dots \times [\vec{A}_{k\lambda}, \vec{A}_{k'\lambda'}]|N_{k\lambda}\rangle \times \dots$$

Entonces tenemos:

$$\begin{aligned}\vec{A}_{k\lambda}\vec{A}_{k'\lambda'}|N_{k\lambda}\rangle - \vec{A}_{k'\lambda'}\vec{A}_{k\lambda}|N_{k\lambda}\rangle &= \sqrt{\frac{2\pi\hbar c^2 N_{k\lambda}}{\omega}} \{\vec{\lambda}A_{k\lambda}|N_{k\lambda}-1\rangle - \vec{\lambda}'A_{k'\lambda'}|N_{k\lambda}-1\rangle\} \\ &= \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega} \sqrt{N_{k\lambda}(N_{k\lambda}-1)} \{\vec{\lambda} \cdot \vec{\lambda}'|N_{k\lambda}-1\rangle - \vec{\lambda}' \cdot \vec{\lambda}|N_{k\lambda}-1\rangle\} \\ &= 0\end{aligned}$$

Calculemos el segundo conmutador (Notemos que esto está actuando sobre el ket apropiado, pero solo nos enfocamos en los operadores, sería incorrecto pensar que podemos resolver el conmutador por si mismo):

$$\begin{aligned}[\vec{A}_{k\lambda}^\dagger, \vec{A}_{k'\lambda'}^\dagger] &= \vec{A}_{k\lambda}^\dagger \vec{A}_{k'\lambda'}^\dagger - \vec{A}_{k'\lambda'}^\dagger \vec{A}_{k\lambda}^\dagger \\ &= (\vec{A}_{k'\lambda'} \vec{A}_{k\lambda})^\dagger - (\vec{A}_{k\lambda} \vec{A}_{k'\lambda'})^\dagger \\ &= [\vec{A}_{k\lambda} \vec{A}_{k'\lambda'} - \vec{A}_{k'\lambda'} \vec{A}_{k\lambda}]^\dagger \\ &= -([\vec{A}_{k\lambda}, \vec{A}_{k'\lambda'}]) \\ &= 0\end{aligned}$$

y finalmente queremos demostrar:

$$[\vec{A}_{\vec{k},\vec{\lambda}}^{(op)}, \vec{A}_{\vec{k}',\vec{\lambda}'}^{(op)\dagger}] = \frac{2\pi\hbar c}{k} \delta_{\vec{k},\vec{k}'}^3 \vec{\lambda} \cdot \vec{\lambda}'^* \quad (689)$$

Para ello, tenemos:

$$\begin{aligned}[\vec{A}_{\vec{k},\vec{\lambda}}^{(op)}, \vec{A}_{\vec{k}',\vec{\lambda}'}^{(op)\dagger}] |N_{k_1,\lambda_1}\dots N_{k\lambda}\dots\rangle &= A_{k\lambda} A_{k'\lambda'}^\dagger |N_{k\lambda} - A_{k'\lambda'}^\dagger A_{k\lambda} |N_{k\lambda}\rangle \\ &= \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega} \lambda \cdot \lambda' [(N_{k\lambda} + 1)|N_{k\lambda}\rangle - N_{k\lambda}|N_{k\lambda}\rangle] \\ &= \frac{2\pi\hbar c^2}{\omega} \lambda \cdot \lambda' |N_{k\lambda}\rangle\end{aligned}$$

de modo que queda demostrado que:

$$\left[ \vec{A}_{\vec{k}, \vec{\lambda}}^{(op)}, \vec{A}_{\vec{k}', \vec{\lambda}'}^{(op)\dagger} \right] = \frac{2\pi\hbar c}{k} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}^3 \vec{\lambda} \cdot \vec{\lambda}'^* \quad (690)$$

En la parte b) lo que tenemos que considerar en primer lugar, es que la densidad de energía electromagnética es:

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{8\pi} \int (E^2 + B^2) d^3r \\ H &= \frac{V}{8\pi} \int (|E|^2 + |B|^2) d^3r \end{aligned}$$

Por otro lado, sabemos que:

$$\begin{aligned} E &= -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} A \\ B &= \nabla \times A \end{aligned}$$

Con  $\nabla \cdot A = 0$  y  $\varphi = 0$   
Tenemos además:

$$A(r, t) = \sum_{k, \lambda} \left( A_{k, \lambda} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} + A_{k, \lambda}^\dagger e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} \right) \frac{1}{\sqrt{V}}$$

Si  $\omega = ck$   
Tenemos:

$$|E|^2 = \frac{1}{V} \sum_{k, \lambda, k', \lambda'} k k' (A_{k, \lambda} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} - A_{k, \lambda}^\dagger e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}) (A_{k', \lambda'}^\dagger e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{r} - \omega t)} - A_{k', \lambda'} e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{r} - \omega t)})$$

Haremos esto por partes. Calculando el primer término del hamiltoniano, tenemos:

$$\frac{V}{8\pi} \int |E|^2 d^3r = \pi^2 \sum k^2 (A_{k, \lambda} A_{k, \lambda}^\dagger + A_{k, \lambda}^\dagger A_{k, \lambda} - A_{k, \lambda}^\dagger A_{k, \lambda}^\dagger e^{2i\omega t} - A_{k, \lambda} A_{k, \lambda} e^{-2i\omega t})$$

Por otro lado, debemos considerar el campo magnético, dado por:

$$\begin{aligned} \vec{B} &= \sum_{k, \lambda} \frac{1}{\sqrt{V}} (\nabla \times A_{k, \lambda} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} + \nabla \times A_{k, \lambda}^\dagger e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}) \\ &= \frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{k, \lambda} k \times (A_{k, \lambda} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} + A_{k, \lambda}^\dagger e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}) \end{aligned}$$

Tomando el módulo al cuadrado igual que en el caso anterior nos queda:

$$|B|^2 = \frac{1}{V} \sum_{k, \lambda, k', \lambda'} k \times (A_{k, \lambda} e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} + A_{k, \lambda}^\dagger e^{-i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)}) \cdot k' \times (A_{k', \lambda'} e^{i(\vec{k}' \cdot \vec{r} - \omega t)} + A_{k', \lambda'}^\dagger e^{-i(\vec{k}' \cdot \vec{r} - \omega t)})$$

Podemos hacer una analogía con la siguiente expresión (notemos que bautizando el parentesis como una nueva variable se obtiene lo mismo):

$$\begin{aligned}(k \times a_{k\lambda})(k' \times a_{k'\lambda}') &= -[k' \times (k \times a_{k\lambda})] \cdot a_{k'\lambda}'^\dagger \\ &= (k' \cdot k)(a_{k\lambda} \cdot a_{k'\lambda}'^\dagger) - (k' \cdot a_{k\lambda})(k \cdot a_{k'\lambda}'^\dagger)\end{aligned}$$

Si no tomamos en consideración el caso de fotones no coherentes,  $|B|^2$  nos queda que:

$$\frac{V}{8\pi} \int |B|^2 d^3r = \pi^2 \sum k^2 (A_{k\lambda} A_{k\lambda}^\dagger + A_{k\lambda}^\dagger A_{k\lambda} + A_{k\lambda} A_{k\lambda'} e^{2i\omega t} + A_{k\lambda} A_{k\lambda'} e^{-2i\omega t})$$

Finalmente, se obtiene, simplemente sumando:

$$\begin{aligned}H &= \frac{V}{8\pi} \int (|E|^2 + |B|^2) d^3r \\ H &= 2\pi^2 \sum k^2 (A_{k\lambda} A_{k\lambda}^\dagger + A_{k\lambda}^\dagger A_{k\lambda})\end{aligned}$$

#### 4.2.2 Problema 2

a) Evalúe el orden de magnitud de la interacción entre el campo magnético de una onda plana y el spin de los electrones atómicos, mostrando que es menor que la perturbación correspondiente al  $H_{int}$  entre la “materia” y un campo electromagnético externo discutida en clases. (¡Ojo: se pide un número y no una argumentación de tipo existencialista!)

b) Considere una onda electromagnética plana, que avanza a lo largo del eje z, polarizada circularmente a la derecha (polarización o helicidad positiva). Demuestre que, si se absorbe un fotón con helicidad positiva, el átomo pasa de  $m_j \rightarrow m_j + 1$ ; viceversa, demuestre que si se emite un fotón, entonces  $m_j \rightarrow m_j - 1$ ; asimismo, si el átomo se encontraba en el estado  $|j, m_j = j\rangle$ , al absorber un fotón de helicidad positiva pasa al estado  $|j + 1, m_j = j + 1\rangle$

#### Solución

a) El Hamiltoniano  $H_{int}$  para las interacciones Spin-CampoMagnético(CA) y Materia-CA estará dado por

$$H_{int/SB} = -\vec{\mu}_B \cdot \vec{B} \quad (691)$$

$$H_{int/MB} = -\frac{e}{mc} \vec{P} \cdot \vec{A} \quad (692)$$

Podemos reescribir esto, considerando:

$$\vec{\mu}_{spin} = -\frac{ge}{2m_e c} \vec{S}$$

Además, sabemos que  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ , en donde:

$$\vec{A} = \sum_{\vec{k}\vec{\lambda}} \left\{ \frac{\vec{A}_{\vec{k}\vec{\lambda}}}{\sqrt{V}} \vec{\lambda} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} + \frac{A_{\vec{k}\vec{\lambda}}^\dagger}{\sqrt{V}} \vec{\lambda}^* e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} \right\}$$

Por otro lado, para una onda plana se cumple lo siguiente:

$$\vec{\nabla} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} = -i\vec{k} e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}$$

Donde hemos utilizado identidades del rotor. Además:

$$|\vec{k} \times \vec{\lambda}| = k\lambda$$

El campo magnético queda dado finalmente por:

$$|\vec{B}| = kA \quad (693)$$

Y el Hamiltoniano queda como:

$$|H_{int/SB}| \approx \frac{e\hbar BS}{mc} = \frac{e\hbar kAS}{mc} = \frac{e\hbar kA}{2mc} \quad (694)$$

Aqui ha sido utilizado  $g = 2$  y ha sido transformado  $\vec{S}$  según:

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$$

Buscamos relaciones entre módulos, ya que buscamos una relación numérica, pero no buscamos específicamente el valor de los H.

Si analizamos  $H_{int/MB}$ :

$$H_{int/MB} = -\frac{e}{mc}\vec{P} \cdot \vec{A}$$

Analicemos ahora, el caso del autoestado  $|1S\rangle$  del átomo de Hidrógeno; Conocemos la siguiente relación:

$$\vec{\nabla}\varphi_{1s} = -\frac{1}{a_0}\varphi_{1s}\hat{r}$$

De modo que nos es posible escribir:

$$\vec{P} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla} = \frac{\hbar}{ia_0}\hat{r}$$

Y podremos hallar una expresión para  $H_{int/MB}$ .

$$\begin{aligned} H_{int/MB} &= -\frac{e}{mc}\vec{P} \cdot \vec{A} \\ \rightarrow H_{int/MB} &= -\frac{e}{mc}\frac{\hbar}{ia_0}\hat{r} \cdot \vec{A} \\ \Rightarrow |H_{int/MB}| &= \frac{e}{mc}\frac{\hbar}{a_0}A \end{aligned} \quad (695)$$

Entonces, podemos mezclar las ecuaciones anteriores y obtendremos:

$$\begin{aligned} \frac{|H_{int/SB}|}{|H_{int/MB}|} &\approx \frac{\frac{e\hbar kA}{2mc}}{\frac{e}{mc}\frac{\hbar}{a_0}A} \\ \frac{|H_{int/SB}|}{|H_{int/MB}|} &\approx \frac{ka_0}{2} \end{aligned} \quad (696)$$

Si escogemos  $\lambda = 3000\text{Å}$ , ( $k = 2\pi/\lambda$ ).

$$\frac{|H_{int/SB}|}{|H_{int/MB}|} \approx 5,5 \times 10^{-4}$$

Queda demostrado.

b) Queremos demostrar la posibilidad de una cierta transición en la condición del enunciado. Para ello, demostraremos la no nulidad de los elementos de matriz

$$\langle n | \vec{\lambda} \cdot \vec{J} | m \rangle \quad (697)$$

Utilizamos ahora la aproximación dipolar:

$$\langle n | \vec{\lambda} \cdot \vec{J} | m \rangle = -\lambda\omega \langle n | \vec{\lambda} \cdot \vec{r} | m \rangle$$

Tomando en cuenta que la onda viaja en la dirección  $\hat{z}$ , los estados de polarización circular arrojan:

$$\begin{aligned} \vec{\lambda}_1 &= (\hat{i} + i\hat{j}) \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \vec{\lambda}_2 &= (\hat{i} - i\hat{j}) \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

En primer lugar, estudiaremos el proceso de absorción: Como la helicidad es positiva, utilizaremos  $\vec{\lambda}_1$ . Usemos este elemento de matriz en coordenadas esféricas, es decir:

$$\vec{r} = (r \sin\theta \cos\varphi, r \sin\theta \sin\varphi, r \cos\theta)$$

Entonces

$$\begin{aligned} -\lambda\omega \langle n | \vec{\lambda}_1 \cdot \vec{r} | m \rangle &= -\lambda\omega \langle n | (\hat{i} + i\hat{j}) \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \vec{r} | m \rangle \\ &= -\lambda\omega \langle n | (\hat{i} + i\hat{j}) \cdot (r \sin\theta \cos\varphi \hat{i} + r \sin\theta \sin\varphi \hat{j} + r \cos\theta \hat{k}) \frac{1}{\sqrt{2}} | m \rangle \\ &= -\frac{\lambda\omega}{\sqrt{2}} \langle n | r \sin\theta \cos\varphi + i r \sin\theta \sin\varphi | m \rangle \end{aligned}$$

Se obtiene:

$$\sin\theta (\sin\theta \cos\varphi + i \sin\theta \sin\varphi) = (\sin\theta)^2 e^{i\varphi}$$

Finalmente, recordando la forma de los autoestados, separando la parte radial, de la angular y la asimutal, se tiene que

$$-\lambda\omega \langle n | \vec{\lambda}_1 \cdot \vec{r} | m \rangle \alpha \int e^{i\varphi} e^{-in\varphi} e^{im\varphi}$$

Esta integral no será nula solamente si  $1 - n + m \neq 0$

$$\rightarrow n = m + 1$$

De modo que si ocurre la transición dada.

El caso de la emisión es igual, a excepción de que debemos operar con  $\vec{\lambda}_1^*$ , lo que resulta en:

$$-\lambda\omega \langle n | \vec{\lambda}_1^* \cdot \vec{r} | m \rangle \alpha \int e^{-i\varphi} e^{-in\varphi} e^{im\varphi}$$

Haciendo lo mismo,  $1 - m + n = 0$

$$\rightarrow n = m - 1$$

Quedando demostrado lo solicitado.

### 4.2.3 Problema 3

Calcule la vida media del estado  $2P$  del átomo de Hidrógeno. Este estado decae al estado  $1S$  emitiendo un fotón. Observe que puede simplificarse la vida usando la aproximación dipolar. Note Ud. que siempre puede escoger uno de los dos vectores de polarización del fotón de modo que sea perpendicular al plano, moviéndose el fotón en el plano.

Recuerde que los niveles de energía para el átomo de Hidrógeno vienen dados por:

$$E_n = -\frac{1}{2n^2}m\alpha^2 \quad (698)$$

Las funciones de onda para los estados  $1S$  y  $2P$  vienen dadas por

$$\begin{aligned} \langle x|1S\rangle &= \frac{2}{\sqrt{a^3}}Y_0^0(\theta, \phi)e^{-r/a} \\ \langle x|2P\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{6}a^3}Y_1^M(\theta, \phi)\frac{r}{a}e^{-r/2a} \end{aligned}$$

Donde  $a$  es el radio de Bohr:  $a = \frac{1}{m\alpha}$       $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$

Si todo va bien, deberá obtener  $\tau = \left(\frac{3}{2}\right)^8 \frac{a}{c\alpha^4}$ , resultado que coincide con el valor experimental  $\tau \approx 1.6 \times 10^{-9}s$

#### Solución

Utilizando la aproximación dipolar, busquemos determinar la siguiente transición:

$$|2P\rangle \longrightarrow |1S\rangle$$

En el estado inicial se tiene:

$$l = 1 \quad m_l = 0 \quad \pm 1$$

Mientras que en el estado final se tiene

$$l = 0 \quad m_l = 0$$

Siguiendo las reglas de selección, esta transición es permitida. Tenemos entonces dos casos posibles  $\Delta m_l = 0$  y  $\Delta m_l = \pm 1$ ,

En el primero, el elemento de matriz relevante será:

$$\langle 1S | R | 2P \rangle = \langle 1, 0, 0 | z | 2, 1, 0 \rangle$$

Mientras que en el segundo se tiene:

$$\langle 1S | R | 2P \rangle = \langle 1, 0, 0 | x | 2, 1, \pm 1 \rangle \hat{i} + \langle 1, 0, 0 | y | 2, 1, \pm 1 \rangle \hat{j}$$

Por otro lado, para este caso se cumple

$$\langle f | x | i \rangle = i \langle f | y | i \rangle$$

Si buscamos calcular la tasa de transición, necesitamos el módulo al cuadrado del elemento de matriz en cada caso, por lo que el problema en general, consiste en calcular dos elementos de matriz:

$$\langle 1, 0, 0 | z | 2, 1, 0 \rangle \quad y \quad \langle 1, 0, 0 | x | 2, 1, \pm 1 \rangle$$

Como el operador involucrado consiste en una coordenada, es necesario integrar. El resultado será:

$$\langle 1, 0, 0 | z | 2, 1, 0 \rangle = \int \frac{2}{\sqrt{2}} e^{-r/a} (Y_0^0)^* z \frac{1}{2\sqrt{6}a^3} Y_1^0 \frac{r}{a} e^{-r/2a} r^2 \sin(\theta) d\theta d\phi dr$$

como  $z = r \cos(\theta)$ , la integral se transforma en:

$$= \frac{1}{a^4 \sqrt{6}} \int_0^\infty e^{-r/a} e^{-r/2a} r^4 dr \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (Y_0^0)^* Y_1^0 \cos(\theta) \sin(\theta) d\phi d\theta = \frac{1}{a^4 \sqrt{6}} \frac{2^8 a^5}{3^4} \frac{\sqrt{3}}{3}$$

Así mismo, para el otro elemento de matriz, se tiene:

$$\langle 1, 0, 0 | x | 2, 1, \pm 1 \rangle = \int \frac{2}{\sqrt{2}} e^{-r/a} (Y_0^0)^* x \frac{1}{2\sqrt{6}a^3} Y_1^{\pm 1} \frac{r}{a} e^{-r/2a} r^2 \sin(\theta) d\theta d\phi dr$$

Tenemos que la transformación de coordenadas esféricas para x es:  $x = r \sin(\theta) \cos(\phi)$

$$= \frac{1}{a^4 \sqrt{6}} \int_0^\infty e^{-r/a} e^{-r/2a} r^4 dr \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (Y_0^0)^* Y_1^{\pm 1} (\sin(\theta))^2 \cos(\phi) d\phi d\theta = \frac{1}{a^4 \sqrt{6}} \frac{2^8 a^5}{3^4} \frac{\pm \sqrt{3}}{3\sqrt{2}}$$

Entonces, tenemos que si:

$$\Delta m = 0 \rightarrow |\langle r \rangle|^2 = \frac{2^{15} a^2}{3^{10}}$$

$$\Delta m = \pm 1 \rightarrow |\langle r \rangle|^2 = \frac{2^{15} a^2}{3^{10}}$$

Es por esto que cada transición tendrá el mismo elemento de matriz. Como ya tenemos los elementos de matriz, la tasa de transición para cada modo será:

$$A = \frac{\omega^3 e^2}{3\pi\epsilon_0 \hbar c^3} |\langle \vec{r} \rangle|^2$$

donde

$$\omega = \frac{E_i - E_f}{\hbar} = \frac{3 m \alpha^2}{4 \cdot 2\hbar}$$

Finalmente, la tasa de transición es:

$$R = \left( \frac{3 m \alpha^2}{4 \cdot 2\hbar} \right)^3 \frac{e^2}{3\pi\epsilon_0 \hbar c^3} \left( 3 \cdot \frac{2^{15} a^2}{3^{10}} \right) = \frac{m^3 \alpha^6 e^2 a^2}{\pi \epsilon_0 \hbar^4 c^3} \frac{2^6}{3^7}$$

Finalmente el tiempo de vida media es:

$$\tau = \frac{1}{R} = \frac{\pi \epsilon_0 \hbar^4 c^3}{m^3 \alpha^6 e^2 a^2} \frac{3^7}{2^6}$$

Si queremos utilizar lo del enunciado, usaremos el sistema cgs, donde  $4\pi\epsilon_0 = 1$ , con lo que finalmente se tiene:

$$\tau = \left( \frac{3}{2} \right)^8 \frac{a}{c \alpha^4}$$

#### 4.2.4 Problema 4

a) Muestre que los elementos de matriz del operador de corriente

$$\vec{J}(\vec{r}) = \vec{j}(\vec{r}) - \frac{e}{mc} \vec{A}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) \quad (699)$$

son invariantes de gauge.

b) Muestre que en cuadro de Heisenberg se cumple

$$\frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) = 0 \quad (700)$$

#### Solución

a) Tenemos entonces que:

$$\begin{aligned} \vec{J}(\vec{r}) &= \vec{j}(\vec{r}) - \frac{e}{mc} \vec{A}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) \\ \vec{J}(\vec{r}) &= \sum_i \left( \frac{\vec{P}_i}{2m} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) + \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \frac{\vec{P}_i}{2m} - \frac{e}{mc} \vec{A}(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \right) \end{aligned}$$

Lo que buscamos demostrar es que es invariante de gauge, es decir:

$$\langle k_1 | \vec{J}(\vec{r}) | k_2 \rangle = \langle k'_1 | \vec{J}'(\vec{r}) | k'_2 \rangle$$

Entonces, se tiene:

$$\langle k'_1 | \vec{J}'(\vec{r}) | k'_2 \rangle = \int \psi_{k'_1}^*(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) \vec{J}'(\vec{r}) \psi_{k'_2}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n) d^3 r_1 \dots d^3 r_n$$

y esto se iguala a:

$$\sum_j \int e^{-\frac{ie}{\hbar c} \sum_i \varepsilon(\vec{r}_i)} \psi_{k_1}^* \left( \frac{\vec{P}_j}{2m} \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) + \frac{\delta(\vec{r} - \vec{r}_j)}{2m} \vec{P}_j - \frac{e}{mc} \vec{A}'(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \right) e^{\frac{ie}{\hbar c} \sum_i \varepsilon(\vec{r}_i)} \psi_{k_2} d^3 r_1 \dots d^3 r_n$$

Luego, tenemos que considerar lo siguiente (el efecto del momentum):

$$\begin{aligned} \vec{P}_j (F(\vec{r}_j) e^{\frac{ie}{\hbar c} \sum_i \varepsilon(\vec{r}_i)}) &= i\hbar \vec{\nabla}_j \left( F(\vec{r}_j) e^{\frac{ie}{\hbar c} \sum_i \varepsilon(\vec{r}_i)} \right) \\ &= -i\hbar \left[ e^{\frac{ie}{\hbar c} \sum_i \varepsilon(\vec{r}_i)} \vec{\nabla}_j (F(\vec{r}_j)) + F(\vec{r}_j) \vec{\nabla}_j e^{\frac{ie}{\hbar c} \sum_i \varepsilon(\vec{r}_i)} \right] \\ &= e^{\frac{ie}{\hbar c} \sum_i \varepsilon(\vec{r}_i)} \left[ \vec{P}_j (F(\vec{r}_j)) + \frac{e}{c} \vec{\nabla}_j \varepsilon(\vec{r}_i) F(\vec{r}_i) \right] \end{aligned}$$

Entonces, obtenemos para nuestro resultado anterior:

$$\begin{aligned} \sum_j \int e^{-\frac{ie}{\hbar c} \sum_i \varepsilon(\vec{r}_i)} \psi_{k_1}^* e^{\frac{ie}{\hbar c} \sum_i \varepsilon(\vec{r}_i)} \left[ \frac{\vec{P}_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j)}{2m} + \frac{\delta(\vec{r} - \vec{r}_j) e(\vec{\nabla}_i \varepsilon(\vec{r}_i))}{2mc} + \frac{\delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \vec{P}_j}{2m} \right. \\ \left. + \frac{e}{2mc} \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \vec{\nabla}_j \varepsilon_i - \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \frac{e}{mc} \vec{A}(\vec{r}) - \frac{e}{mc} \vec{\nabla} \varepsilon(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \right] \psi_{k_2} d^3 r_1 \dots d^3 r_n \end{aligned}$$



Esto se simplifica , eliminando términos, a:

$$\sum_j \int \psi_{k_1}^* \left( \frac{\vec{P}_j \delta(\vec{r} - \vec{r}_j)}{2m} + \frac{\delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \vec{P}_j}{2m} - \delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \frac{e}{mc} \vec{A} \vec{r} \right) \psi_{k_2} d^3 r_1 \dots d^3 r_n$$

Procedemos a meter la sumatoria en la integral, con lo que se obtiene:

$$\begin{aligned} &= \int \psi_{k_1}^* \left( \vec{j}(\vec{r}) - \frac{e}{mc} \vec{A}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) \right) \psi_{k_2} d^3 r_1 \dots d^3 r_n \\ &= \langle k_1 | \vec{J} | k_2 \rangle \end{aligned}$$

de modo que se tiene:

$$\langle k'_1 | \vec{J}' | k'_2 \rangle = \langle k_1 | \vec{J} | k_2 \rangle$$

Resolvemos la parte b)  
tenemos:

$$\rho(\vec{r}, t) = e^{\frac{iHt}{\hbar}} \rho(\vec{r}) e^{-\frac{iHt}{\hbar}}$$

luego, calculando la derivada parcial temporal:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \frac{iH}{\hbar} e^{\frac{iHt}{\hbar}} \rho(\vec{r}) e^{-\frac{iHt}{\hbar}} + \left( -\frac{iH}{\hbar} \right) e^{\frac{iHt}{\hbar}} \rho(\vec{r}) e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \\ &= e^{\frac{iHt}{\hbar}} \left( \frac{iH}{\hbar} \rho(\vec{r}) - \rho(\vec{r}) \frac{iH}{\hbar} \right) e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \\ &= \frac{i}{\hbar} e^{\frac{iHt}{\hbar}} [H, \rho(\vec{r})] e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \end{aligned}$$

Por otro lado, sabemos como es H. Tiene la forma:

$$H = \sum_i \frac{\vec{P}_i^2}{2m} - \frac{e}{2mc} (\vec{P}_i \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{P}_i) + \frac{e^2}{2mc^2} \vec{A}^2 + e\phi + V$$

Luego, desarrollando el conmutador, obtenemos:

$$[H, \rho(\vec{r})] = \sum_i \frac{1}{2m} [\vec{P}_i^2, \rho(\vec{r})] - \frac{e}{2mc} [\vec{P}_i \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{P}_i, \rho(\vec{r})]$$

Ahora debemos ir por partes para no rellenar de cosas que no se entienden. En primer lugar, terminaremos de desarrollar este conmutador pero por partes:

$$[\vec{P}_i^2, \rho(\vec{r})] = -\hbar^2 \left[ \nabla^2 (\delta(\vec{r} - \vec{r}_i)) - 2\vec{\nabla}(\delta(\vec{r} - \vec{r}_i)) \cdot \vec{\nabla}_i \right]$$

resolviendo la segunda parte:

$$\left[ \vec{P}_i \cdot \vec{A} + \vec{A} \cdot \vec{P}_i \rho(\vec{r}) \right] = -2i\hbar \vec{A} \cdot (-\nabla(\delta(\vec{r} - \vec{r}_i))) = 2i\hbar \vec{A} \cdot \vec{\nabla}(\delta(\vec{r} - \vec{r}_i))$$

Ya resueltos cada uno de estos, volvemos al conmutador principal (que contenía  $H$  y  $\rho(\vec{r})$ ).

$$\begin{aligned} [H, \rho(\vec{r})] &= \sum_i \vec{\nabla} \cdot \left[ \frac{i\hbar}{2} \left( \frac{\vec{P}_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) + \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \vec{P}_i}{m} \right) - \frac{i\hbar e}{mc} \vec{A} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \right] \\ &= \vec{\nabla} \cdot \left( i\hbar \vec{j}(\vec{r}) - \frac{i\hbar e}{mc} \vec{A} \rho(\vec{r}) \right) \end{aligned}$$

Entonces, volvemos a la derivada temporal que habíamos calculado en un inicio porque ya estamos en condición de reemplazar:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \frac{i}{\hbar} i\hbar e \frac{i\hbar t}{\hbar} \left[ \vec{\nabla} \cdot \left( \vec{j}(\vec{r}) - \frac{e}{mc} \vec{A} \rho(\vec{r}) \right) \right] e^{-\frac{i\hbar t}{\hbar}} \\ \frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} &= -e \frac{i\hbar t}{\hbar} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}) e^{-\frac{i\hbar t}{\hbar}} \\ \frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} &= -\vec{\nabla} \cdot \left( e \frac{i\hbar t}{\hbar} \vec{J}(\vec{r}) e^{-\frac{i\hbar t}{\hbar}} \right) \\ \frac{\partial \rho(\vec{r}, t)}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}) &= 0 \end{aligned}$$

#### 4.2.5 Problema 5

## 5 Sección 8

### 5.1 Problemas Resueltos

#### 5.1.1 Problema 1

Dos Partículas idénticas de spin  $1/2$ , sin interacción entre ellas, se encuentran en una caja con paredes rígidas “ $V_{pared} = \infty$ ”. Las paredes están en  $x = 0$  y  $x = L$ . Es decir estas partículas solo sienten el potencial  $V(x) = 0$  si  $|x| < a$  y  $V(x) = \infty$  si  $|x| > a$ .

Dado que el Hamiltoniano de este sistema no depende del spin, este ha de conmutar con  $\vec{S}^2$  y con  $S_z$  y los autoestados de energía pueden, entre otros, ser rotulados por los números cuánticos  $S$  y  $M_s$  siendo  $\vec{S} = \vec{S}^1 + \vec{S}^2$ .

Escriba las funciones de onda normalizadas correspondientes a los seis (6) estados de dos partículas de menor energía en la representación  $|x_1, x_2, m_1, m_2\rangle$ . ¿Cuánto valen las correspondientes energías?

#### Solución

Este problema consiste en una partícula en un pozo de potencial. En este caso, como hemos visto durante el curso, las las ecuaciones de onda tomarán la forma siguiente:

$$\begin{aligned} \phi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{a}} \cos(k_n x) && \text{si } n \text{ impar} \\ \phi_n(x) &= \frac{1}{\sqrt{a}} \sin(k_n x) && \text{si } n \text{ par} \end{aligned}$$

considerando:

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad y \quad E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2m(2c)^2}$$

Si incluimos el spin, la función de onda total será

$$\psi_{n-up} = \phi(x) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\psi_{n-down} = \phi(x) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Como en este caso particular tenemos dos partículas con spin  $1/2$ , la función de onda resultante debe ser antisimétrica.

Por otra parte, el acoplamiento de dos spines  $1/2$  nos da como resultado

$$triplete \rightarrow X_t \quad || \quad singlete \rightarrow X_s$$

Cuando tomamos la antisimetrización, obtenemos:

$$\Psi_t^{n,m} = (\phi_n(x_1)\phi_m(x_2) - \phi_n(x_2)\phi_m(x_1))X_t$$

$$\Psi_s^{n,m} = (\phi_n(x_1)\phi_m(x_2) + \phi_n(x_2)\phi_m(x_1))X_s$$

Analizamos primero el caso  $n=m=1$ , para encontrar las funciones de onda normalizadas para las dos partículas de menor energía. Obtenemos:

$$\Psi_s^{1,1} = \phi_1(x_1)\phi_1(x_2) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}(|1/2, 1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle - |1/2, -1/2\rangle |1/2, 1/2\rangle)$$

$$\Psi_t^{1,1} = 0$$

el triplete se anula. Además, la energía estará dada por

$$E_{1,1} = (1^2 + 1^2)E_1 = 2E_1$$

Ahora para el caso  $n=1, m=2$  tenemos:

$$\Psi_s^{1,2} = (\phi_2(x_1)\phi_2(x_2) + \phi_1(x_2)\phi_2(x_1)) \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}(|1/2, 1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle - |1/2, -1/2\rangle |1/2, 1/2\rangle)$$

Considerando el caso del triplete, no se anula como vimos anteriormente, de modo que generamos 3 estados, siendo estos:

$$\Psi_t^{1,2} = (\phi_2(x_1)\phi_2(x_2) - \phi_1(x_2)\phi_2(x_1)) \times \left[ \begin{array}{l} |1/2, 1/2\rangle \\ |1/2, -1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|1/2, 1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle + |1/2, -1/2\rangle |1/2, 1/2\rangle) \end{array} \right]$$

caso en que la energía es:

$$E_{1,2} = (1^2 + 2^2)E_1 = 5E_1$$

**Finalmente** analizamos cuando  $n=m=2$ . Solo tendremos la función de onda del singlete que está dada por:

$$\Psi_s^{2,2} = \phi_2(x_1)\phi_2(x_2) \frac{1}{\sqrt{2}}(|1/2, 1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle - |1/2, -1/2\rangle |1/2, 1/2\rangle)$$

con la respectiva energía:

$$E_{2,2} = (2^2 + 2^2)E_1$$

$$E_{2,2} = 8E_1$$

### 5.1.2 Problema 2

Considere un sistema de dos spines 1/2. El operador  $P_{(12)}^S$  que produce el intercambio de estados de spin de las dos partículas en el espacio producto  $H_S = H_S^{(1)} \otimes H_S^{(2)}$  puede ser definido a través de su acción sobre la base de autoestados  $|m_1, m_2\rangle = |m_1\rangle^{(1)} |m_2\rangle^{(2)}$  rotulados por los autovalores de los operadores de spin  $(\vec{S}^{(1)})^2, (\vec{S}^{(2)})^2, S_z^{(1)}, S_z^{(2)}$  correspondientes a los spines (1) y (2), respectivamente.

$$P_{(12)}^S |m_1, m_2\rangle \equiv |m_2, m_1\rangle$$

Este operador se conoce con el nombre de operador de intercambio de spin. Por simplicidad lo denotaremos por  $P_{(12)}$ . Muestre que se cumple lo siguiente:

a)  $P_{(12)}^{-1} = P_{(12)}^\dagger = P_{(12)}$

b) Los autovalores de  $P_{(12)}$  solamente pueden valer  $\pm 1$ .

c) Los autoestados simultáneos de  $(\vec{S}^{(1)})^2, (\vec{S}^{(2)})^2, \vec{S}_T^2 = (\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2$  y  $S_{Tz}$  también son autoestados del operador de intercambio de spin.

d) Trabajando en el espacio de Hilbert producto tensorial de los dos espacios de spin 1/2, muestre que el siguiente operador

$$P_{(12)} = \frac{1}{2} \left[ I + \frac{4}{\hbar^2} \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} \right]$$

efectivamente representa un operador de intercambio de spin, esot es

$$P_{(12)} |m_1, m_2\rangle = |m_1, m_2\rangle$$

### Solución

a) Sabemos que:

$$P_{(12)} |m_1, m_2\rangle \equiv |m_2, m_1\rangle$$

y si volvemos a aplicar el operador tendremos:

$$\begin{aligned} P_{(12)} P_{(12)} |m_1, m_2\rangle &= P_{(12)} |m_2, m_1\rangle \\ &= |m_1, m_2\rangle \end{aligned}$$

de modo que obtenemos:

$$P_{(12)} P_{(12)} = I \rightarrow P_{(12)} = P_{(12)}^{-1}$$

Además los estados  $|m_1, m_2\rangle$  estan debidamente normalizados asi que:

$$\langle m_1, m_2 | m_1, m_2 \rangle = 1$$

Usando lo anterior:

$$\begin{aligned} \langle m_1, m_2 | P_{(12)} P_{(12)} | m_1, m_2 \rangle &= 1 \\ (\langle m_1, m_2 | P_{(12)}^\dagger) (P_{(12)} | m_1, m_2 \rangle) &= 1 \\ (\langle m_1, m_2 | P_{(12)}^\dagger) | m_2, m_1 \rangle &= 1 \end{aligned}$$

Para que este producto se mantenga con el valor 1, se debe cumplir que:

$$\langle m_1, m_2 | P_{(12)}^\dagger = \langle m_2, m_1 |$$

y, entonces:

$$P_{(12)}^\dagger = P_{(12)}$$

esto, era lo pedido. **b)** Podemos suponer un autoestado de  $P_{(12)}$  con autovalor  $\lambda$ , es decir:

$$P_{(12)} |v\rangle = \lambda |v\rangle$$

si aplicamos el operador dos veces a este autoestado particular obtenemos:

$$P_{(12)}P_{(12)} |v\rangle = P_{(12)}\lambda |v\rangle$$

y usando lo anterior (ya demostrado):

$$\begin{aligned} I |v\rangle &= \lambda P_{(12)} |v\rangle = \lambda^2 |v\rangle \\ &\rightarrow \lambda^2 = 1 \rightarrow \lambda = \pm 1 \end{aligned}$$

que era lo pedido

**c)** Aquí procedemos con cálculo directo:

$$P_{(12)}S_1^2 |m_1, m_2\rangle = m_1(m_1 + 1)\hbar^2 |m_2, m_1\rangle$$

$$P_{(12)}S_2^2 |m_1, m_2\rangle = m_2(m_2 + 1)\hbar^2 |m_2, m_1\rangle$$

Para  $(S_T)^2$ , tendremos que:

$$(S_T)^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2S_1S_2$$

de modo que:

$$\begin{aligned} P_{(12)}(S_T)^2 |m_1, m_2\rangle &= P_{(12)}(S_1^2 + S_2^2 + 2S_1S_2) |m_1, m_2\rangle \\ &= (m_1(m_1 + 1)\hbar^2 + m_2(m_2 + 1)\hbar^2 + 2\sqrt{m_1(m_1 + 1)m_2(m_2 + 1)}\hbar^2) |m_2, m_1\rangle \end{aligned}$$

**d)** En el caso que manipulemos una dos spines 1/2 combinados, obtendremos:

$$|m_1, m_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1/2 - 1/2\rangle \pm |-1/2, 1/2\rangle)$$

donde  $S_1 \cdot S_2$  (operador) actúa sobre un singlete dando:

$$\frac{-3\hbar^2}{4}$$

cuando actúa sobre un triplete, obtenemos:

$$\frac{\hbar^2}{4}$$

De este modo, cuando tenemos:

$$P_{(12)} = \frac{1}{2} \left[ I + \frac{4}{\hbar^2} \vec{S}^{(1)} \cdot \vec{S}^{(2)} \right]$$

obtendremos:

$$\begin{aligned}
 P_{(12)} \frac{1}{\sqrt{2}} (|1/2 - 1/2\rangle + |-1/2, 1/2\rangle) &= \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} (|1/2 - 1/2\rangle + |-1/2, 1/2\rangle) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{4}{\hbar^2} S_1 \cdot S_2 \frac{1}{\sqrt{2}} (|1/2 - 1/2\rangle + |-1/2, 1/2\rangle) \right) \\
 &= \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} (|1/2 - 1/2\rangle + |-1/2, 1/2\rangle) + \frac{1}{\sqrt{2}} (|1/2 - 1/2\rangle + |-1/2, 1/2\rangle) \right) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|-1/2, 1/2\rangle + |1/2, -1/2\rangle)
 \end{aligned}$$

y así mismo:

$$\begin{aligned}
 P_{(12)} \frac{1}{\sqrt{2}} (|1/2 - 1/2\rangle - |-1/2, 1/2\rangle) &= \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} (|1/2 - 1/2\rangle - |-1/2, 1/2\rangle) \right. \\
 &\quad \left. + \frac{4}{\hbar^2} S_1 \cdot S_2 \frac{1}{\sqrt{2}} (|1/2 - 1/2\rangle - |-1/2, 1/2\rangle) \right) \\
 &= \frac{1}{2} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} (|1/2 - 1/2\rangle - |-1/2, 1/2\rangle) - 3 \frac{1}{\sqrt{2}} (|1/2 - 1/2\rangle - |-1/2, 1/2\rangle) \right) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|-1/2, 1/2\rangle + |1/2, -1/2\rangle)
 \end{aligned}$$

De modo que esto es un operador de intercambio de spin.

### 5.1.3 Problema 3

En el límite no relativista, el Hamiltoniano que describe la interacción de los electrones con el núcleo es independiente de los spines electrónicos y nucleares. Sin embargo, los niveles de energía en átomos multielectrónicos si dependen del estado de spin de los electrones.

Considere un átomo con dos electrones. El Hamiltoniano no relativista viene dado por

$$H = H_0 + H_I$$

con

$$H_0 = - \sum_{i=1}^2 \left( \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{r_i}^2 + \frac{Ze^2}{r_i} \right)$$

y

$$H_I = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

a) Para el caso en que un electrón se encuentra en el estado fundamental y el otro electrón en un estado excitado con números cuánticos  $(n, l, m)$ , ¿cuál estado de spin (tripleto o singlete) tiene energía más alta?

b) Como una variación, considere dos electrones en un oscilador armónico unidimensional. Para el caso en que uno de los electrones se encuentre en el estado fundamental y el otro en el primer estado excitado, calcule  $\langle (x_2 - x_1)^2 \rangle$  para los estados tripleto y sigulete, donde  $x_1$  y  $x_2$  son las posiciones de los electrones.

### Solución

a) Una posible solución al problema tendría forma:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{n,l,m}(\vec{r}_1)\psi_{n',l',m'}(\vec{r}_2)$$

Como tenemos un electrón en el estado fundamental y el otro electron en un estado excitado con números cuánticos n,l y m, tendremos:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \psi_{1,0,0}(\vec{r}_1)\psi_{n,l,m}(\vec{r}_2)$$

Esta situación puede cambiar según la paridad del número cuántico l, cambiando la paridad de la función  $\Psi$ .

De este modo para l par debemos usar el singlete, es decir:

$$\begin{aligned} \Psi_{Ts} &= [\psi_{100}(r_1)\psi_{nlm}(r_2) + \psi_{100}(r_2)\psi_{nlm}(r_1)] X_s \\ &= [\psi_{100}(r_1)\psi_{nlm}(r_2) + \psi_{100}(r_2)\psi_{nlm}(r_1)] \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}(|1/2, 1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle - |1/2, -1/2\rangle |1/2, 1/2\rangle) \end{aligned}$$

Y cuando consideramos el l impar debemos usar el triplete, es decir:

$$\Psi_{Tt} = [\psi_{100}(r_1)\psi_{nlm}(r_2) - \psi_{100}(r_2)\psi_{nlm}(r_1)] X_t$$

donde consideramos:

$$X_t = \left[ \begin{array}{l} |1/2, 1/2\rangle \\ |1/2, -1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|1/2, 1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle + |1/2, -1/2\rangle |1/2, 1/2\rangle) \end{array} \right]$$

Como la función total debe ser antisimétrica puesto que son electrones, evidentemente cuando consideramos el singlete, la parte espacial queda simétrica, de modo que los electrones pueden estar más cerca uno del otro produciendo mayor interacción.

Es por esta razón que la energía de interacción asociada al singlete es mayor.

b) La función de onda para el oscilador armónico cuántico es:

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right)$$

Definiremos la perturbación energética en función de las cantidades vistas en clases (J y K)

$$\begin{aligned} J &= \int d^3x_1 d^3x_2 |\psi_a(x_1)|^2 |\psi_b(x_2)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} \\ K &= \int d^3x_1 d^3x_2 \psi_a(x_1)\psi_b(x_2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_a^*(x_2)\psi_b^*(x_1) \end{aligned}$$

Para el caso n=0 y m=1, las funciones de onda asociadas al problema son:

$$\begin{aligned} \psi_0 &= \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} \\ \psi_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \end{aligned}$$

Si consideramos que  $\langle(x_2 - x_1)^2\rangle$  es el tipo de perturbación que buscamos obtenemos:

$$\langle(x_2 - x_1)^2\rangle = J \pm K$$

donde el signo + se refiere al singlete y el signo - al triplete.

**Finalmente** el problema es reducido a calcular los coeficientes J y K:

$$\begin{aligned} J &= \int d^3x_1 d^3x_2 |\psi_a(x_1)|^2 |\psi_b(x_2)|^2 \frac{e^2}{r_{12}} \\ &= \int d^3x_1 d^3x_2 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega x_1^2}{\hbar}} \frac{1}{2} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{m\omega x_2^2}{\hbar}} 4 \frac{m\omega}{\hbar} x_2^2 (x_2 - x_1)^2 \\ &= \frac{2\hbar}{m\omega} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} K &= \int d^3x_1 d^3x_2 \psi_a(x_1) \psi_b(x_2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_a^*(x_2) \psi_b^*(x_1) \\ &= \int d^3x_1 d^3x_2 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x_1^2}{2\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x_2^2}{2\hbar}} 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_2 \\ &\quad (x_2 - x_1)^2 \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x_2^2}{2\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{m\omega x_1^2}{2\hbar}} 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_1 \\ &= \frac{-\hbar}{m\omega} \end{aligned}$$

De modo que la perturbación energética es, (considerando el singlete):

$$\Delta E_s = J + K = \frac{\hbar}{m\omega}$$

y en el caso del triplete:

$$\Delta E_s = J - K = \frac{3\hbar}{m\omega}$$

#### 5.1.4 Problema 4

Considere la colisión de dos partículas idénticas de spin 1/2.

a) Suponga que la función de onda de las dos partículas después de la colisión corresponde a un momento angular relativo  $l = 0$ . Escriba, entonces, las posibles funciones de onda de spin.

b) Repita la pregunta anterior en el caso que el momento angular relativo sea  $l = 1$ .

#### Solución

(a) Si tenemos  $l=0$ , tenemos que la función de onda es par, de modo que la única opción es el singlete,

de este modo, la función de onda de spin es:

$$|s, m_s, 1/2, 1/2\rangle = |0, 0, 1/2, 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1/2, 1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle - |1/2, -1/2\rangle |1/2, 1/2\rangle)$$

b) Si tenemos  $l=1$ , tenemos que la función de onda espacial cambia con un cambio en las coordenadas y con el fin de mantener la antisimetría, las funciones de ondas de spin deben pertenecer al triplete, es decir:

$$|s, m_s, 1/2, 1/2\rangle = |1, m, 1/2, 1/2\rangle$$



De modo que tenemos tres casos:

$$\begin{aligned} |1, 1, 1/2, 1/2\rangle &= |1/2, 1/2\rangle \\ |1, -1, 1/2, 1/2\rangle &= |1/2, -1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle \\ |1, 0, 1/2, 1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1/2, 1/2\rangle |1/2, -1/2\rangle + |1/2, -1/2\rangle |1/2, 1/2\rangle) \end{aligned}$$

### 5.1.5 Problema 5

Considere un sistema formado por tres spines  $S=1/2$ . En el espacio producto

$$H_S = H_S^1 \otimes H_S^2 \otimes H_S^3$$

de los espacios de Hilbert de cada spin tenemos el vector

$$|u\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+ \quad - \quad +\rangle - |- \quad + \quad +\rangle)$$

¿Qué vector resulta de la acción de simetrizar y/o antisimetrizar el estado  $|u\rangle$ ?

#### Solución

En primer lugar, lo que haremos es simetrizar. Para ello, debemos usar el determinante de Slater, con  $U$  dado en el enunciado.

En los determinantes cambiamos la notación a  $up_i$  para  $+$  en el Hilbert  $i$  del producto tensorial y con  $down$  para  $-$ .

Entonces:

$$|U\rangle_{sim} = \frac{1}{\sqrt{12}} \left[ \begin{vmatrix} up_1 & down_1 & up_1 \\ up_2 & down_2 & up_2 \\ up_2 & down_3 & up_3 \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} down_1 & up_1 & up_1 \\ down_2 & up_2 & up_2 \\ down_2 & up_3 & up_3 \end{vmatrix} \right]$$

Ahora calculamos cada matriz, con lo que obtenemos:

$$\begin{aligned} \begin{vmatrix} up_1 & down_1 & up_1 \\ up_2 & down_2 & up_2 \\ up_2 & down_3 & up_3 \end{vmatrix} &= |+ \quad - \quad +\rangle + |- \quad + \quad +\rangle + | + \quad + \quad -\rangle + | + \quad - \quad +\rangle + | + \quad + \quad -\rangle + |- \quad + \quad +\rangle \\ \begin{vmatrix} down_1 & up_1 & up_1 \\ down_2 & up_2 & up_2 \\ down_2 & up_3 & up_3 \end{vmatrix} &= |- \quad + \quad +\rangle + | + \quad + \quad -\rangle + | + \quad - \quad +\rangle + | + \quad + \quad -\rangle + |- \quad + \quad +\rangle + | + \quad - \quad +\rangle \end{aligned}$$

Cuando restamos, se anulan, de modo que:

$$|U\rangle_{sim} = 0$$

Para el caso antisimétrico haremos lo mismo, pero ahora calculamos el determinante de matriz como es usual, es decir:

$$|U\rangle_{sim} = \frac{1}{\sqrt{12}} \left[ \begin{vmatrix} up_1 & down_1 & up_1 \\ up_2 & down_2 & up_2 \\ up_2 & down_3 & up_3 \end{vmatrix} - \begin{vmatrix} down_1 & up_1 & up_1 \\ down_2 & up_2 & up_2 \\ down_2 & up_3 & up_3 \end{vmatrix} \right]$$

Calculando cada uno de ellos:

$$\begin{vmatrix} up_1 & down_1 & up_1 \\ up_2 & down_2 & up_2 \\ up_2 & down_3 & up_3 \end{vmatrix} = |+-+\rangle + |-++\rangle + |++-\rangle - |+ - +\rangle - |++-\rangle - |-++\rangle = 0$$

$$\begin{vmatrix} down_1 & up_1 & up_1 \\ down_2 & up_2 & up_2 \\ down_2 & up_3 & up_3 \end{vmatrix} = |-++\rangle + |++-\rangle + |+ - +\rangle - |++-\rangle - |-++\rangle - |+ - +\rangle = 0$$

en este caso cada una se anula.

**No es posible construir un estado simétrico ni uno antisimétrico.**