Mecánica Cuántica II

http://www.famaf.unc.edu.ar/∼serra/mcII.html

Guía 2 - Agosto de 2011

Problema 1: Considere un sistema de dos partículas de espín $s = 1/2$.

a) Muestre que la matriz correspondiente al operador S^2, en la base producto, está dada por

$$S^2 \to \hbar^2 \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} ++ & +- & -+ & -- \end{array} \\ \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \end{array}$$

en donde el signo $+(-)$ representa un estado con $m_s = 1/2 (m_s = -1/2)$.

Calcule también S_z, S_+ y S_- en esta base.

b) Muestre que la matriz de S^2 calculada en el punto anterior resulta diagonal si en el subespacio $S_z = 0$ se toman como vectores base

$$\frac{|+-\rangle + |-+\rangle}{\sqrt{2}} \qquad (s = 1)$$

$$\frac{|+-\rangle - |-+\rangle}{\sqrt{2}} \qquad (s = 0)$$

c) Considere un sistema formado por dos partículas de espín $s = 1/2$ acopladas por interacción dipolar magnética. Aplicando lo anterior muestre que los autoestados del Hamiltoniano del sistema son los estados singlete y triplete. Calcule las energías de los distintos estados.

Suponga que a este sistema se le aplica un campo magnético de magnitud B_0, a lo largo del eje que une las dos partículas. Calcule los nuevos autoestados y autoenergías en función de B_0.

Sugerencia: verifique y utilice la siguiente relación:

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = S_{1z}S_{2z} + \frac{1}{2}\left(S_{1+}S_{2-} + S_{1-}S_{2+}\right)$$

Problema 2:

a) Muestre que los operadores $P_1 = \frac{3}{4}I + (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)/\hbar^2$ y $P_0 = \frac{1}{4}I - (\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2)/\hbar^2$ cumplen $P_i P_j = \delta_{ij} P_j$.

b) Muestre que estos operadores proyectan un estado en los espacios de espín 1 y espín 0 en $\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = 1 \oplus 0$.

Problema 3: Calcule los coeficientes de Clebsh-Gordan de $\frac{1}{2} \otimes 1 = \frac{3}{2} \oplus \frac{1}{2}$

Problema 4: El protón es una partícula elemental de espín 1/2; su momento magnético intrínseco $\vec{M} = \gamma_p \vec{S}$ es proporcional al espín donde la razón giromagnética γ_p es igual a $g_p \mu_n/\hbar$ con $\mu_n = e\hbar/(2m_p)$ (magnetón nuclear) y $g_p \approx 5.585$. La interacción espín-espín entre dos protones es proporcional al producto de sus momentos magnéticos, $\kappa_{1,2}\vec{M}_1 \cdot \vec{M}_2$, donde la constante de proporcionalidad depende de la distancia entre los protones, de su estado orbital, etc.

Considere tres protones equivalentes, por ejemplo los tres protones en una molécula de amoníaco, con $\kappa_{1,2} = \kappa_{1,3} = \kappa_{2,3}$ en un campo magnético externo estático $\vec{B}$.

a) Escriba el Hamiltoniano espín-magnético del sistema teniendo en cuenta solamente la interacción con el campo magnético y las interacciones espín-espín.

b) Verifique que $\vec{S_1} \cdot \vec{S_2} + \vec{S_1} \cdot \vec{S_3} + \vec{S_2} \cdot \vec{S_3}$ es un operador escalar con respecto al espín total del sistema.

c) Obtenga los autovalores del Hamiltoniano y los autovectores correspondientes expresándolos en términos de la base ortonormal desacoplada $\{|1/2, m_1; 1/2, m_2; 1/2, m_3\rangle \ : \ m_1, m_2, m_3 = \pm 1/2\}$. Grafique el espectro en función de la magnitud del campo magnético y discuta la multiplicidad de las energías.

Problema 5:

a) Construya los operadores de proyección $P_\pm$ para los subespacios $j = l \pm 1/2$ en la suma $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$.

b) Para una partícula de espín $j_2 = 1/2$ y momento angular orbital j_1, calcule:

$\langle j_1, 1/2, m \mp 1/2, \pm 1/2 | j_1, 1/2, j_1 \pm 1/2, m\rangle$.

c) Si la repesentación coordenada es utilizada para los autoestados del momento angular orbital, y los autoestados de S_z son una base para representar el espín, usando el resultado del punto anterior con $j_1 = l$, muestre que los autoestados comunes de J_z y J^2 son:

$$Y_l^{j,m} = Y_l^{l\pm 1/2, m} = \frac{1}{\sqrt{2l+1}} \begin{pmatrix} \pm\sqrt{l \pm m + 1/2}\ Y_l^{m-1/2} \\ \sqrt{l \mp m + 1/2}\ Y_l^{m+1/2} \end{pmatrix}$$

Muestre que estos autoestados son autofunciones de $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ y calcule los autovalores.

Problema 6: *El Hamiltoniano de Heisenberg para un anillo.*

Considere un anillo de N espines $1/2$ donde cada espín interactúa solamente con sus dos vecinos inmediatos y la energía de interacción entre el espín j y el espín contiguo k es proporcional a $\vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_k$. Aquí, $\vec{\sigma}_j = (\sigma_j^{(x)}, \sigma_j^{(y)}, \sigma_j^{(z)})$ es el vector formado con las tres matrices de Pauli actuando solamente sobre el espín j (en otra notación, $\vec{\sigma}_j = \underbrace{\mathbf{1} \otimes \mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}}_{j-1} \otimes \vec{\sigma} \otimes \mathbf{1} \otimes \cdots \otimes \mathbf{1}$).

Si la constante de proporcionalidad es independiente del par considerado –todos los espines son equivalentes aunque distinguibles– entonces el Hamiltoniano del anillo es $H = -J \sum_{j=1}^{N} \vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+1}$, conocido como Hamiltoniano de Heisenberg (se <u>identifica</u> <u>a</u> $j = N+1$ <u>con</u> $j = 1$).

a) ¿Cuál es el espacio de Hilbert de los estados del anillo, y que dimensión tiene? Describa una base ortonormal completa (tenga en cuenta los puntos siguientes).

b) Si para un solo espín, α respectivamente β, denota el autovector normalizado de $\sigma^{(z)}$ al autovalor $+1$, respectivamente -1, y $\sigma^{(\pm)} = (\sigma^{(x)} \pm i\sigma^{(y)})/2$, verifique que $\sigma^{(+)}\alpha = 0$, $\sigma^{(-)}\alpha = \beta$, $\sigma^{(+)}\beta = \alpha$, y $\sigma^{(-)}\beta = 0$.

c) Usando las relaciones $(\sigma^{(x)})^2 = \mathbf{1}$, $\sigma^{(x)}\sigma^{(y)} = -\sigma^{(y)}\sigma^{(x)}$ y $\sigma^{(x)}\sigma^{(z)} = -\sigma^{(z)}\sigma^{(x)}$ construya el "flipeador de espines" U –un operador unitario y autoadjunto que intercambia α con β para cada espín. Verifique que $U^* H U = H$.

d) Verifique que $H = -J \sum_{j=1}^{N} \left(\sigma_j^{(z)} \sigma_{j+1}^{(z)} + 2 \left[\sigma_j^{(+)} \sigma_{j+1}^{(-)} + \sigma_j^{(-)} \sigma_{j+1}^{(+)} \right] \right)$.

e) Verifique que los vectores $\alpha \otimes \alpha \otimes \cdots \otimes \alpha$ y $\beta \otimes \beta \otimes \cdots \otimes \beta$ son autovectores de H al mismo autovalor.

f) Considerando el caso (llamado ferromagnético) donde $J > 0$, verifique que los dos vectores del punto anterior son estados fundamentales de H.

Sugerencia: Considere solamente dos espines enumerados con 1 y 2 y un vector $\psi = c_{\alpha,\alpha}(\alpha \otimes \alpha) + c_{\alpha,\beta}(\alpha \otimes \beta) + c_{\beta,\alpha}(\beta \otimes \alpha) + c_{\beta,\beta}(\beta \otimes \beta)$ con coeficientes complejos arbitrarios. Calcule

$$\frac{\langle\psi|\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}$$

y demuestre que este número es menor o igual a 1.

g) Sea Λ_k, $k = 1, 2, \cdots, N$ el estado en el cual todos los espines están en el estado α salvo el k-ésimo que está en el estado β, i.e., $\Lambda_k = \underbrace{\alpha \otimes \alpha \otimes \cdots \otimes \alpha}_{k-1} \otimes \beta \otimes \alpha \otimes \alpha \otimes \cdots \otimes \alpha$. Estos estados se conocen como excitaciones simples (un solo espín flipeado) del estado fundamental $\alpha \otimes \alpha \otimes \cdots \alpha$.

i) ¿Es cierto que $\{\Lambda_k : \ k = 1, 2, \cdots, N\}$ es un sistema ortonormal? ¿Es completo?

ii) Muestre que

$$(\vec{\sigma}_j \cdot \vec{\sigma}_{j+1})\, \Lambda_k = \begin{cases} \Lambda_k & , \quad \text{si } k \neq j \text{ o } k \neq j+1 \\ 2\Lambda_{j+1} - \Lambda_j & , \quad \text{si } k = j \\ 2\Lambda_j - \Lambda_{j+1} & , \quad \text{si } k = j+1 \end{cases} .$$

iii) ¿Es cierto que H deja invariante el subespacio generado por $\{\Lambda_k : \ k = 1, 2, \cdots, N\}$?

h) Considere las combinaciones lineales de los estados Λ_k del punto anterior, i.e., $\Lambda = \sum_{k=1}^{N} c_k \Lambda_k$. Obtenga una ecuación para los coeficientes c_k tal que el vector Λ asociado sea un autoestado de H. Tenga en cuenta que $c_{N+1} = c_1$. Resuelva esta ecuación con el "Ansatz" $c_k = e^{i\lambda k}$ donde λ es un número real, y determine los posibles valores de λ y las correspondientes autoenergías.

j) Si $\Lambda(\lambda)$ son los autoestados encontrados en el punto anterior, deduzca con el "flipeador de espines" que las autoenergías correspondientes son, a lo menos, doblemente degeneradas.

k) Si Usted llegó hasta aquí debe haber encontrado 4 estados fundamentales y $2(N-1)$ estados excitados con energías doblemente degeneradas. Muestre que si $N = 3$ entonces ha terminado. ¿Que falta para el caso general $N \geq 4$? ¿Como intentaría Usted encontrar los demás autovalores de H?

Problema 7:

a) Muestre que si $M_{k_1}^{q}$, $q = -k_1, -k_1 + 1, \cdots, k_1$ son las componentes esféricas de un operador tensorial irreducible de rango k_1 y $N_{k_2}^{p}$, $p = -k_2, -k_2+1, \cdots, k_2$ aquellas de un operador tensorial irreducible de rango k_2 actuando sobre el mismo espacio y con respecto al mismo momento angular $\vec{J}$, entonces para cada $k \in \{k_1 + k_2, k_1 + k_2 - 1, \cdots, |k_1 - k_2|\}$ los $2k + 1$ operadores

$$T_k^r = \sum_{q=-k_1}^{k_1} \sum_{p=-k_2}^{k_2} \langle k_1, q; k_2, p|kr\rangle M_{k_1}^{q}\, N_{k_2}^{p} \ , \quad r = -k, -k+1, \cdots, k \ ,$$

son las componentes esféricas de un operador tensorial irreducible de rango k con respecto a $\vec{J}$.

b) Sea $T_{i,j}$ el operador tensorial cartesiano $T_{i,j} = A_i\, B_j$, donde $\vec{A}$, $\vec{B}$ son operadores vectoriales respecto al mismo momento angular $\vec{J}$. Escriba las componentes de T en términos de tensores esféricos de rango 0, 1 y 2.

Problema 8: La energía potencial $\mathcal{E}(\vec{r})$ de una partícula de carga q en un campo electrostático $U(\vec{r})$ es $qU(\vec{r})$. En la región $\mathcal{R}$ libre de las cargas que generan el potencial, se tiene la ecuación de Laplace $\Delta U = 0$.

a) A partir del desarrollo en $\mathcal{R}$ (el origen de coordenadas se supone dentro de $\mathcal{R}$)

$$U(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} f_{\ell,m}(r) Y_{\ell}^{m}(\theta, \varphi)$$

determine las funciones $f_{\ell,m}$ y muestre que

$$\mathcal{E}(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} c_{\ell,m} \Xi_{\ell}^{m}(\vec{r}) \ ,$$

donde

$$\Xi_{\ell}^{m}(\vec{r}) = q\sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} r^{\ell} Y_{\ell}^{m}(\theta, \varphi) \ ,$$

y los $c_{\ell,m}$ son coeficientes reales (que dependen del potencial).

b) Los llamados operadores multipolares eléctricos Q_{ℓ}^{m} son –en la representación de posición– los operadores de multiplicación por Ξ_{ℓ}^{m}. Muestre que los Q_{ℓ}^{m}, $m = -\ell, -\ell+1, \cdots, \ell$ son la componentes de un operador tensorial irreducible de grado ℓ con respecto al momento angular orbital.

c) Calcule los Q_{ℓ}^{m} para $\ell = 0, 1, 2$ y asócielos con la carga, el momento dipolar eléctrico y el momento cuadrupolar eléctrico.

Problema 9: Una rotación arbitraria de un cuerpo rígido puede ser realizada en tres etapas, conocidas como rotaciones de Euler. En término de matrices, la rotación puede ser expresada como:

$$R(\alpha, \beta, \gamma) \equiv R_{z'}(\gamma) R_{y'}(\beta) R_{z}(\alpha)$$

En donde y' es el eje y del cuerpo rígido después de la primera rotación en un ángulo α alrededor del eje z, y el eje z' es el eje z del cuerpo rígido después de la segunda rotación en un ángulo β alrededor del eje y'.

Verificando las relaciones

$$R_{y'}(\beta) = R_{z}(\alpha) R_{y}(\beta) R_{z}^{-1}(\alpha) \qquad R_{z'}(\gamma) = R_{y'}(\beta) R_{z}(\gamma) R_{y'}^{-1}(\beta)$$

muestre que la rotación $R(\alpha, \beta, \gamma)$ se puede escribir como

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_{z}(\alpha) R_{y}(\beta) R_{z}(\gamma)$$

Problema 10: Calcule las matrices de rotación de Wigner $D^{(j)}_{m'm}(\alpha, \beta, \gamma)$ para $j = 1/2$ y $j = 1$.