

Mecánica Cuántica II

Guía 4 - Octubre de 2011

Problema 1: Un modelo simple que describe al protón en un átomo de hidrógeno no como un punto sino como una carga con una distribución espacial, propone que el protón se represente como carga uniformemente distribuida en una esfera de radio r_o . En este caso el potencial al que es sometido el electrón es

$$V(r) = \begin{cases} -Ze^2/r & , \text{ si } r \geq r_o \\ \frac{Ze^2}{2r_o}((r/r_o)^2 - 3) & , \text{ si } r \leq r_o \end{cases} ,$$

donde Ze es la carga nuclear ($Z = 1$ para el hidrógeno).

Calcule la corrección a primer orden en Z de los niveles de energía del electrón en este potencial con respecto al potencial Coulombiano. Obtenga correcciones aproximadas suponiendo que las funciones de onda radiales del problema Coulombiano pueden aproximarse en la esfera de radio r_o por su valor en $r = 0$. Discuta esta aproximación en términos del parametro $r_o/a_o(Z)$ donde $a_o(Z)$ es el radio de Bohr asociado al problema $a_o(Z) = \hbar^2/(Zme^2)$. [Para el protón, r_o es del orden de $10^{-14} m$].

Problema 2: Un oscilador armónico en una dimensión, de masa m , carga q y frecuencia ω es sometido a la acción de un campo eléctrico constante en la dirección x positiva.

a) Considere el término de campo en el Hamiltoniano como una perturbación y estudie las correcciones a los niveles de energía hasta segundo orden.

b) Vea que este problema puede resolverse en forma exacta. Calcule las energías exactas y compárelas con las obtenidas en (a).

Problema 3: Para el oscilador anarmónico unidimensional con potencial

$$V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2 + ax^3 + bx^4$$

calcule las correcciones a las autoenergías del oscilador armónico asociado. Incluya correcciones de segundo orden con respecto al sumando cúbico.

Sugerencia: Trabaje en términos de los operadores de aniquilación y creación del oscilador armónico.

Problema 4: Considere dos partículas con espín $s = 1/2$ cuya interacción espín-espín es anisotrópica:

$$H_0 = -J_T (S_1^{(x)} S_2^{(x)} + S_1^{(y)} S_2^{(y)}) - J_{\parallel} S_1^{(z)} S_2^{(z)}$$

Suponga en particular $0 < J_T \leq J_{\parallel}$, y defina el parámetro de anisotropía $\Delta \equiv J_{\parallel} - J_T \geq 0$.

a) ¿Es el Hamiltoniano un operador escalar respecto al espín total del sistema?

b) Obtenga los autovalores del Hamiltoniano y gráfíquelos en función del parámetro de anisotropía Δ , señalando la degeneración correspondiente.

c) Escriba los correspondientes autovectores como combinación lineal de la base producto directo o desacoplada.

d) Considere el caso de una anisotropía débil en el plano $x - y$:

$$H = H_0 - \epsilon S_1^{(x)} S_2^{(x)}$$

con $\epsilon > 0$. Calcule la corrección a la energía en primer orden en ϵ . Haga un gráfico de energías vs. ϵ a J_T, Δ fijos. Comente sobre la validez del resultado perturbativo.

Problema 5: (*Efecto Stark*). Un átomo hidrogenoide cuyo estado fundamental es no degenerado (ignoramos el espín) se lo coloca en un campo eléctrico uniforme en la dirección z .

a) Obtenga una expresión aproximada para el momento dipolar eléctrico inducido del estado fundamental considerando el valor de expectación de ez con el estado corregido a primer orden.

b) Calcule el corrimiento de energía del estado fundamental en segundo orden. A partir de este corrimiento encuentre la expresión para el momento dipolar eléctrico inducido.

Problema 6: (*Acoplamiento espín-órbita en átomos hidrogenoides*). El Hamiltoniano para un electrón en el hidrógeno en la aproximación del protón fijo pero teniendo en cuenta el acoplamiento espín-órbita es:

$$H = (1/2m)\vec{p}^2 + V_c(r) + \frac{1}{2m^2c^2r} \frac{dV_c}{dr}(r) \vec{L} \cdot \vec{S},$$

donde V_c es el potencial de Coulomb generado por el protón.

a) Verifique que $\vec{L} \cdot \vec{S}$ es un operador escalar con respecto al momento angular total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ del electrón.

b) Muestre que las autofunciones del Hamiltoniano son de la forma $f_{j,l}|j, m\rangle$ donde $f_{j,l}$ es una función de la distancia protón-electrón r y $\vec{J}^2|j, m\rangle = \hbar^2 j(j+1)|j, m\rangle$ y $J_3|j, m\rangle = \hbar m|j, m\rangle$, o sea que $\{|j, m\rangle : m = -j, -j+1, \dots, j-1, j\}$ es la base canónica asociada con el par (\vec{J}^2, J_3) para magnitud j . ¿Qué valores de j aparecen?

c) Obtenga la ecuación radial para $f_{j,l}$. ¿Qué puede decir sobre el estado fundamental de H ?

d) Calcule a primer orden la corrección en la energía para el estado $2p$ debida a la interacción espín-órbita.

Problema 7: (*Estructura fina*). Incluyendo las correcciones relativistas, o de estructura fina [energía cinética relativista (H_c), término de Darwin (H_D) y acoplamiento espín-órbita (H_{LS})] el Hamiltoniano de un electrón en el campo Coulombiano de una carga $Z|e|$ es entonces

$$H_o + \underbrace{H_c + H_D + H_{LS}}_{=H'}$$

con

$$H_o = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta - \frac{Ze^2}{r}.$$

No tenemos en cuenta el corrimiento de Lamb ni el espín del núcleo, que conduce a la estructura hiperfina del espectro.

Se vio que en la base $\{|n, j = \ell \pm \frac{1}{2}, m_j; \ell\rangle : n = 1, 2, \dots; \ell = 0, 1, \dots, n-1; m_j = -j, \dots, j\}$ obtenida de la autobase $\{|n, \ell, m_\ell\rangle \otimes |m_s\rangle : n = 1, 2, \dots; \ell = 0, 1, \dots, n-1; m_\ell = -\ell, \dots, \ell; m_s = \pm 1/2\}$ de H_o al sumar \vec{L} y \vec{S} para obtener el momento angular total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ se tiene:

$$H_o |n, j = \ell \pm \frac{1}{2}, m_j; \ell\rangle = E_n |n, j = \ell \pm \frac{1}{2}, m_j; \ell\rangle; E_n = -\frac{MZ^2e^4}{2\hbar^2n^2} \text{ con multiplicidad } 2n^2$$

$$\langle n, j, m_j; \ell | H' | n', j', m'_{j'}; \ell' \rangle = \delta_{\ell, \ell'} \langle n, j, m_j; \ell | H' | n', j', m'_{j'}; \ell' \rangle.$$

Usando teoría de perturbaciones a primer orden (es decir, despreciando los elementos de matriz de H' que conectan estados de distinto número cuántico principal n) obtenga

$$\langle n, j, m_j; \ell | H' | n, j', m'_{j'}; \ell \rangle = \delta_{j, j'} \delta_{m_j, m'_{j'}} E_n \frac{Z^2 e^4}{\hbar^2 c^2 n^2} \left(\frac{2n}{2j+1} - \frac{3}{4} \right).$$

Las energías de $H_o + H'$ a primer orden son entonces

$$E_{n, j, \ell} = E_n \left\{ 1 + \frac{Z^2 e^4}{\hbar^2 c^2 n^2} \left(\frac{2n}{2j+1} - \frac{3}{4} \right) \right\},$$

con multiplicidad $(2j+1)$ cuando $j = j_{max} = n - 1/2$ y $2(2j+1)$ cuando $j < n - 1/2$.

Grafique el espectro de estructura fina $E_{n, j, \ell}$ incluyendo hasta $n = 3$ para el hidrógeno ($Z = 1$) con todos los términos espectroscópicos ($n^{2s+1} L_j$) que aparecen. Indique multiplicidades. El gráfico se cuantifica adecuadamente en términos de la constante de estructura fina $\alpha = e^2 \hbar^{-1} c^{-1} \approx (1/137)$ y de la energía fundamental $E_1 = -\frac{Mc^2}{2} \alpha^2 \approx -13.6 \text{ eV}$.

Problema 8: (*Efecto Zeeman*). La interacción de un electrón (masa M , carga $-e$) con un campo magnético estático y homogéneo \vec{B} se describe con el Hamiltoniano Zeeman

$$H_B = \frac{\mu_B}{\hbar} (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{B}, \quad \mu_B = \frac{e\hbar}{2Mc},$$

que no incluye los términos diamagnéticos de orden $|\vec{B}|^2$. Considere el caso de campo magnético débil y calcule el efecto Zeeman como perturbación a primer orden de los niveles $E_{n, j, \ell}$ para $n = 1, 2$. Puede utilizar aquí los resultados del Problema anterior. ¿Qué quiere decir campo magnético débil?

Nota: este ejercicio es un tanto académico pues si el campo es débil (¿cuanto?) la estructura hiperfina del espectro domina sobre el efecto Zeeman.

Problema 9: Si el campo magnético aplicado no es débil el cálculo del problema anterior es inútil; se debe diagonalizar $H' + H_B$ en el autoespacio (de dimensión $2n^2$) de H_o asociado al autovalor E_n . Considere los elementos de matriz

$$\langle n, j, m_j; \ell | H_B | n', j', m'_{j'}; \ell' \rangle$$

a) Verifique que $[\vec{L}^2, H_B] = 0$, $[H_o, H_B] = 0$ y use esto para demostrar que los elementos de matriz se anulan para $\ell \neq \ell'$ y para $n \neq n'$.

b) Demuestre que los elementos de matriz se anulan si $m'_{j'} \neq m_j$.

c) Demuestre que los únicos elementos de matriz no nulos son los elementos diagonales (que ya calculó en el problema anterior) y los siguientes elementos no diagonales:

$$\langle n, \ell \pm \frac{1}{2}, m_j; \ell | H_B | n, j' = \ell \mp \frac{1}{2}, m_j; \ell \rangle$$

d) Calcule las matrices para $n = 1, 2$ y diagonalícelas para obtener las correcciones a primer orden en $H' + H_B$ de las energías E_n correspondientes¹. Rehaga el gráfico del Problema 7 para $n = 1, 2$.

e) Reobtenga los resultados para campo débil, y considere el caso de campo magnético fuerte.

¹Necesitará aquí los coeficientes de Clebsch-Gordan apropiados; use una tabla.

Problema 10: *Factores de Landé.*

Considere el momento angular total $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$, suma de dos momentos angulares que conmutan. Sea $\{|\alpha, j, m; \ell, s\rangle\}$ la base ortonormal asociada con el par (\vec{J}^2, J_z) donde el índice α enumera otros grados de libertad no asociados con \vec{J}_1 y \vec{J}_2 .

a) Demuestre que $\vec{K} = a\vec{J}_1 + b\vec{J}_2$ es un operador vectorial con respecto a \vec{J} para cualquier par de números reales a y b .

b) Demuestre que

$$\langle \alpha, j, m; j_1, j_2 | \vec{K} | \alpha, j, m'; j_1, j_2 \rangle = g(\alpha, j; j_1, j_2) \langle \alpha, j, m; j_1, j_2 | \vec{J} | \alpha, j, m'; j_1, j_2 \rangle$$

c) Verifique que $2\vec{J} \cdot \vec{J}_1 = \vec{J}^2 + \vec{J}_1^2 - \vec{J}_2^2$ y que $2\vec{J} \cdot \vec{J}_2 = \vec{J}^2 + \vec{J}_2^2 - \vec{J}_1^2$. Luego demuestre que

$$\vec{J} \cdot \vec{K} = \frac{a+b}{2} \vec{J}^2 + \frac{a-b}{2} (\vec{J}_1^2 - \vec{J}_2^2)$$

d) Demuestre que, para $j \neq 0$ (el caso $j = 0$ es trivial),

$$g(\alpha, j; j_1, j_2) = G(\alpha) \frac{(a+b)j(j+1) + (a-b)[j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)]}{2j(j+1)}$$

Problema 11: Calcular el efecto Stark para los niveles $2S_{1/2}$ y $2P_{1/2}$ para un campo eléctrico E suficientemente pequeño tal que eEa_0 es pequeño comparado con la estructura fina, pero tenga en cuenta el corrimiento de Lamb δ (puede ignorar el estado $2P_{3/2}$). Mostrar que para $eEa_0 \ll \delta$ (o $eEa_0 \gg \delta$) los corrimientos en la energía son cuadráticos (o lineales) en E .