Mecánica Cuántica II

Guía 6 - Noviembre de 2011

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

Problema 1: Considere dos partículas idénticas en el estado $\psi(\xi_1, \xi_2)$ donde ξ_j denota todas las variables asociadas con cada una de las dos partículas. Verifique que la densidad de partículas $\rho(\xi)$ ($\rho(\xi)\, d\xi$ es el número de partículas en el elemento infinitesimal $d\xi$ centrado en ξ) es

$$\rho(\xi) = 2 \int d\eta\, |\psi(\xi, \eta)|^2$$

tanto en el caso de bosones como fermiones. Si ahora

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = C\, [\ \psi_1(\xi_1)\psi_2(\xi_2) \pm \psi_1(\xi_2)\psi_2(\xi_1)\ ]$$

donde ψ_1 y ψ_2 son estados normalizados de una sola partícula, C es la constante de normalización apropiada y el signo tiene en cuenta si las partículas son bosones o fermiones, verifique que entonces

$$\rho(\xi) = 2|C|^2 \left[\ |\psi_1(\xi)|^2 + |\psi_2(\xi)|^2 \pm 2\ \mathrm{Re}\ \psi_1^*(\xi)\psi_2(\xi) \cdot \int d\eta\, \psi_1(\eta)\psi_2^*(\eta) \right]$$

El último término tiene en cuenta los llamados efectos de solapamiento o intercambio. Estudie en qué casos este término será despreciable, y qué relación hay entonces con el hecho de que las partículas sean indistinguibles.

Problema 2: En un sistema de partículas indistinguibles se ha definido el operador unitario P_α asociado con una dada permutación α de manera que

$$P_{n_1,\ldots,n_N}\ |\alpha_1, \ldots, \alpha_N\rangle\ =\ |n_1 : \alpha_1, \ldots, n_N : \alpha_N\rangle\ .$$

a) Verifique que

$$S = \frac{1}{N!}\sum_\alpha P_\alpha\ \ ,\ \ A = \frac{1}{N!}\sum_\alpha sgn(\alpha) P_\alpha\ ,$$

donde $sgn(\alpha)$ es la paridad de la permutación α, son los correspondientes operadores de simetrización y antisimetrización.

b) Pruebe que S y A son proyectores, de modo que se cumple

$$S^2 = S = S^\dagger\ \ , \qquad A^2 = A = A^\dagger \quad \text{y} \qquad SA = AS = 0\ .$$

c) Verifique que

$$SP_\alpha = P_\alpha S = S \qquad \text{y} \qquad AP_\alpha = P_\alpha A = sgn(\alpha) A$$

para cualquier permutación P_α.

Problema 3: Si el espacio de estados $\mathcal{H}$ de una partícula, es de dimensión D (finita), entonces la dimensión del espacio $\mathcal{H}^{(N)} = \mathcal{H} \otimes \mathcal{H} \ldots \otimes \mathcal{H}$ tendrá dimensión D^N.

a) Muestre que la dimensión de los subespacios $\mathcal{H}_S^{(N)}$ totalmente simétrico y $\mathcal{H}_A^{(N)}$ totalmente antisimétrico son

$$dim\left(\mathcal{H}_S^{(N)}\right) \;=\; \binom{D+N-1}{N} \quad ; \quad dim\left(\mathcal{H}_A^{(N)}\right) \;=\; \begin{cases} 0 & D < N \\ \binom{D}{N} & D \geq N \end{cases}$$

b) Muestre que $dim\left(\mathcal{H}_S^{(N)}\right) + dim\left(\mathcal{H}_A^{(N)}\right) \;<\; dim\left(\mathcal{H}^{(N)}\right) \;=\; D^N$ si $N \geq 3$.

c) Particularice para el caso $N = 3$ (y $D \geq 3$), sean $|\alpha_1\rangle$, $|\alpha_2\rangle$, $|\alpha_3\rangle$ estados ortogonales de una partícula. Muestre que el vector

$$|\psi\rangle \;=\; \frac{1}{2}\;\left(|\alpha_1\alpha_3\alpha_2\rangle - |\alpha_2\alpha_3\alpha_1\rangle + |\alpha_3\alpha_1\alpha_2\rangle - |\alpha_3\alpha_2\alpha_1\rangle\right)$$

no pertenece ni al subespacio simétrico ni al subespacio antisimétrico. Encuentre otro vector que tambien verifique esta condición.

Problema 4: Suponga que el Hamiltoniano H_0 de una partícula sólo actúa sobre variables orbitales y suponga además que H_0 posee sólo tres niveles no degenerados de energías 0, $\hbar\omega_0$ y $2\hbar\omega_0$ con autoestados ψ_0, ψ_1 y ψ_3 respectivamente. Considere ahora un sistema de tres de tales partículas no interactuantes, es decir descripto por el hamiltoniano

$$H = H_0(1) + H_0(2) + H_0(3).$$

Calcule los niveles de energía, sus degeneraciones y sus correspondientes autofunciones para el caso de

a) Partículas distinguibles.

b) Electrones.

c) Bosones de espín 0.

Problema 5: Es posible estudiar la energía fundamental de un átomo con carga nuclear Ze_o y dos electrones mediante el método variacional. La función de prueba más simple es

$$\Psi_\zeta(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{\zeta^3}{\pi a^3}\, e^{-\zeta(r_1+r_2)/a} \;, \quad a = \frac{\hbar^2}{\mu e_o^2}$$

tomando ζ como parámetro de ajuste. Teniendo en cuenta que Ψ_ζ es el producto de estados fundamentales para un electrón (de masa μ) en el campo coulombiano generado por una carga ζe_o, se interpreta a ζ como carga efectiva en el átomo.

a) Verifique que Ψ_ζ está adecuadamente normalizada.

b) Encuentre el valor de expectación para la energía del átomo en el el estado Ψ_ζ, y verifique que la mejor cota para la energía fundamental se obtiene cuando $\zeta = Z - 5/16$. Compare esta cota a la energía fundamental con el valor obtenido mediante otros métodos.

Problema 6: Dé una estimación para la energía de los estados $1s\,nl$, con $n = 0, 1$ para el átomo de helio, utilizando autofunciones hidrogenoides. Discuta la degeneración de las mismas.

Problema 7: (a) Escriba el Hamiltoniano electrostático básico para un átomo de carga nuclear Ze, masa nuclear M y N electrones. Luego introduciendo la posición del centro de masa y las posiciones relativas r_i de los electrones respecto del núcleo, obtenga el Hamiltoniano coulombiano en coordenadas relativas:

$$H = \sum_{i=1}^{N} \left(\frac{p_i^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r_i} \right) + \sum_{i>j} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - \frac{1}{M} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j$$

donde μ es la masa reducida y el sumando proporcional a $1/M$ es el término de Hughes-Eckart.

(b) Calcule perturbativamente la contribución del término de Hughes-Eckart para el átomo de Helio partiendo de los autoestados apropiadamente simetrizados del Hamiltoniano sin la repulsión interelectrónica. Sugerencia: analice si $\nabla_1 \cdot \nabla_2$ es o no un operador escalar.

Problema 8: *"Átomos" bosónicos.* Estime la energía del estado fundamental de un "átomo" de carga nuclear Z pero donde los N electrones son reemplazados por N bosones de igual carga y masa, proponiendo una función de prueba simétrica de la forma

$$\phi_a(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \cdots, \vec{r}_N) = \mathcal{N}\, e^{-\alpha \sum_i^N r_i} \,.$$

a) Calcule la constante de normalización $\mathcal{N}$.

b) Calcule el valor optimo de α y el correspondiente valor esperado de la energía.

c) Verifique que para N suficientemente grande (estimelo) este simple cálculo predice la existencia de "átomos" doblemente ionizados negativamente. Experimentalmente no se encuentran átomos doblemente ionizados. Mostramos así que la repulsión Coulombiana y el principio de incerteza no bastan para explicar este hecho experimental y es necesario incluir el carácter fermiónico de los electrones.

Problema 9: El circonio tiene número atómico 40. ¿Cuál es su configuración electrónica asociada al estado fundamental, en la aproximación de campo central? ¿Cuáles son los posibles términos espectroscópicos asociados con esta configuración? ¿Cuál de ellos corresponde al estado fundamental de acuerdo a las reglas de Hund?

Recordar que la capa 5s se llena antes que la 4d.