

Facultad de Ciencias

Universidad Autónoma de México Mecánica Cuántica - Tarea 3

Profesores:

Dr. Chumin Wang Chen Ayud. Tomas Javier Escamilla Lara Ayud. Oliver Isaac Barreto Quintanar Alumno: Sebastián González Juárez



sebastian_gonzalezj@ciencias.unam.mx

- 1.- Las matrices de Pauli $\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{i} \\ \mathbf{i} & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ y la identidad $\hat{\sigma}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ constituyen una base con $\hat{\sigma}_0$ y $\hat{\sigma}_z$ de forma diagonal.
 - (a) (0.8 pts.) Escriba los operadores $\hat{\sigma}_0$, $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ y $\hat{\sigma}_z$ en la representación donde $\hat{\sigma}_0$ y $\hat{\sigma}_x$ son diagonales.
 - (b) (0.8 pts.) Un electrón en un campo magnético uniforme $\hat{\mathbf{B}} = B_0 \, \mathbf{e}_x$ con $B_0 = 500$ gauss descrito por $\hat{H} = -\hat{\mathbf{\mu}}_s \cdot \hat{\mathbf{B}}$, donde $\hat{\mathbf{\mu}}_s = -g \, e \, \hat{\mathbf{S}} / \, 2 m_e$ siendo $g \approx 2.00232$ el factor de Landé. Al tiempo t = 0 se encuentra en el estado $s_z = \hbar/2$ ¿Cuánto tiempo se tarda en voltear la orientación del espín?

a)

La matriz de Pauli $\hat{\sigma}_x$ está dada por: $\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

Vamos a encontrar sus autovalores y autovectores para poder construir una base en la que $\hat{\sigma}_x$ sea diagonal. Para encontrar los autovalores, resolvemos el determinante de la ecuación característica: $\det(\hat{\sigma}_x - \lambda I) = 0$

$$\widehat{\sigma}_{x} - \lambda I = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{pmatrix}$$

El determinante de esta matriz es: $\det(\widehat{\sigma}_x - \lambda I) = (-\lambda)(-\lambda) - (1)(1) = \lambda^2 - 1$

Igualando a cero: $\lambda^2 - 1 = 0 \Rightarrow \lambda^2 = 1 \Rightarrow \lambda = \pm 1$.

Los autovalores son $\lambda_1 = 1$ y $\lambda_2 = -1$.

Los autovectores asociados a cada autovalor salen de la ecuación $(\hat{\sigma}_x - \lambda I)\vec{v} = 0$ para cada λ .

Sustituimos $\lambda = 1$:

$$\left(\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}1&0\\0&1\end{pmatrix}\right)\vec{v}=0\Rightarrow\begin{pmatrix}-1&1\\1&-1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}v_1\\v_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}\Rightarrow-v_1+v_2=0,\qquad v_1=v_2$$

Por lo tanto, un autovector correspondiente a $\lambda = 1$ es cualquier múltiplo del vector: $\binom{1}{1}$

Para normalizarlo, dividimos cada componente por la norma del vector, que es $\sqrt{1^2 + 1^2} = \sqrt{2}$:

$$|+\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \binom{1}{1}.$$

Sustituimos $\lambda = -1$:

$$\left(\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}-\begin{pmatrix}-1&0\\0&-1\end{pmatrix}\right)\vec{v}=0\Rightarrow\begin{pmatrix}1&1\\1&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}v_1\\v_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix}\Rightarrow v_1+v_2=0, \qquad v_1=-v_2$$

Entonces, un autovector correspondiente a $\lambda = -1$ es cualquier múltiplo del vector: $\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$

Dividamos cada componente por la norma del vector, que es $\sqrt{1^2 + (-1)^2} = \sqrt{2}$:

$$|-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Los autovectores $|+\rangle_x$ y $|-\rangle_x$ forman la nueva base en la que $\hat{\sigma}_x$ es diagonal. La matriz de cambio de base U es la matriz que tiene estos autovectores como columnas:

$$U = (|+\rangle_x \quad |-\rangle_x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Esta matriz nos permite cambiar a la base en la cual $\hat{\sigma}_x$ es diagonal. Para transformar cada operador a esta base, calculamos: $\hat{\sigma}' = U\hat{\sigma}U^{\dagger}$

$$\begin{split} \hat{\sigma}_0 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{\sigma}_0' = U \hat{\sigma}_0 U^\dagger = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \hat{\sigma}_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{\sigma}_y' = U \hat{\sigma}_y U^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \\ \hat{\sigma}_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \Rightarrow \hat{\sigma}_z' = U \hat{\sigma}_y U^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{split}$$

b)

El electrón se encuentra en un campo magnético uniforma $\bar{B} = B_0 \hat{x}$, donde $B_0 = 500$ gauss, pasemos estas unidades a teslas:

$$B_0 = 500 \; gauss = 500 \times 10^{-4} \; teslas = 0.05 \; T$$

EL hamiltoniano del sistema está dado por:

$$\widehat{H} = -\overline{\mu}_{\scriptscriptstyle S} \cdot \overline{B}$$

Donde $\bar{\mu}_s$ es el momento megneito de espín del electrón. Este está dado por: $\bar{\mu}_s = -\frac{ge}{2m_e}\hat{S}$, donde:

- g es el factor de Landé, $g \approx 2.00232$
- e es la carga del electrón, $e \approx 1.602 \times 10^{-19} C$
- m_e es la masa del electrón, $m_e \approx 9.109 \times 10^{-31} \ kg$
- \hat{S} es el operador de espín del electrón.

Al tiempo t=0, el espín del electrón está en el estado $s_z=+\frac{\hbar}{2}$. Hay que calcular el tiempo necesario para que su orientación se voltee, i. e. que $s_z=-\frac{\hbar}{2}$.

Como el campo magnético está en la dirección \hat{x} , podemos escribir el hamiltoniano de interacción como:

$$\widehat{H} = -\bar{\mu}_S \cdot \bar{B} = -\left(-\frac{ge}{2m_e} \hat{S}_x\right) B_0 = \frac{ge}{2m_e} \left(\frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_x\right) B_0 = \frac{geB_0\hbar}{4m_e} \hat{\sigma}_x$$

De modo que el hamiltoniano en función de las matrices de Pauli es:

$$\widehat{H} = \frac{geB_0\hbar}{4m_e} \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

El hamiltoniano actúa como una perturbación en el espín del electrón, causando una precesión alrededor del eje del campo. Esta precesión tiene una frecuencia angular ω , llamada frecuencia de Larmor, que está dada por:

$$\omega = \frac{geB_0}{2m_e}$$

Para que el espín del electrón cambie de orientación completamente, el estado debe rotar media vuelta en el plano perpendicular al campo magnético. El tiempo necesario para que ocurra esta rotación de π , t. q. $t=\pi/\omega$. Sustituyendo,

$$t = \frac{\pi}{\frac{geB_0}{2m_e}} = \frac{2\pi m_e}{geB_0} = \frac{2\pi (9.109 \times 10^{-31} \, kg)}{(2.00232)(1.602 \times 10^{-19} \, C)(0.05 \, T)} \approx 3.57 \times 10^{-10} s$$

El tiempo que tarda en voltearse la orientación del espín es aproximadamente $3.57 \times 10^{-10} s$.

- 2.- Una partícula con momento angular orbital l = 1, espín s = 1/2 y momento angular total $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$, descrita por el hamiltoniano $\hat{H} = \alpha \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}}$, donde α es una constante.
 - (a) (0.6 pts.) Encuentre los niveles de energía producidos por \hat{H} y sus degeneraciones.
 - (b) (0.6 pts.) Calcule los coeficientes de Clebsch-Gordan usando los operadores $\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_x \pm i \hat{J}_y$.
 - (c) (0.6 pts.) Si el sistema se encuentra a t = 0 en el estado $|\hat{\mathbf{L}}, \hat{L}_z; \hat{\mathbf{S}}, \hat{S}_z\rangle = |1, 0; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$, determine la evolución temporal del sistema y la probabilidad a t > 0 de encontrarse en $|1, 1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$.

a)

El hamiltoniano está dado por: $\widehat{H} = \alpha \widehat{L} \cdot \widehat{S}$, donde α es una constante. Este término representa el acoplamiento espín-órbita, que describe la interacción entre el momento angular orbital \widehat{L} y el espín \widehat{S} de la partícula.

Podemos reescribir $(\hat{L} \cdot \hat{S})$ en términos de \hat{f} , con la siguiente identidad: $\hat{L} \cdot \hat{S} = \frac{1}{2} (\hat{f}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$ donde $\hat{f} = \hat{L} + \hat{S}$ es el momento angular total.

Dado que l=1 (momento angular orbital), $s=\frac{1}{2}$ (espín), los posibles valores del momento angular total j son: $j=l+s=\frac{3}{2}$ y $j=l-s=\frac{1}{2}$ Por lo tanto, el sistema tendrá dos valores posibles de $j=\frac{3}{2}$ y $j=\frac{1}{2}$.

Sustituyamos la expresión de $\hat{L} \cdot \hat{S}$ en el hamiltoniano: $\hat{H} = \alpha \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$

La energía dependerá de los valores propios de \hat{J}^2 , \hat{L}^2 , \hat{S}^2 . Recordemos que:

$$\begin{split} \hat{J}^2\big|j,m_j\big\rangle &= j(j+1)\hbar^2\big|j,m_j\big\rangle, \qquad \hat{L}^2\big|l,m_l\big\rangle = l(l+1)\hbar^2\big|l,m_l\big\rangle, \\ \hat{S}^2\big|s,m_s\big\rangle &= s(s+1)\hbar^2\big|s,m_s\big\rangle \end{split}$$

Dado que l = 1 y $s = \frac{1}{2}$:

$$\widehat{L^2} = l(l+1)\hbar^2 = 1 \cdot 2 \, \hbar^2 = 2\hbar^2, \qquad \widehat{S^2} = s(s+1)\hbar^2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} \, \hbar^2 = \frac{3}{4} \hbar^2$$

Ahora calculamos los niveles de energía para cada valor de j.

• Caso
$$j = \frac{3}{2}$$
: $\widehat{J}^2 = j(j+1)\hbar^2 = \frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2} \hbar^2 = \frac{15}{4} \hbar^2$

Entonces, la energía correspondiente es:

$$E_{j=\frac{3}{2}} = \alpha \frac{1}{2} \left(\frac{15}{4} \hbar^2 - 2 \hbar^2 - \frac{3}{4} \hbar^2 \right) = \alpha \frac{1}{2} \left(\frac{15 - 8 - 3}{4} \right) \hbar^2 = \alpha \frac{1}{2} \cdot \frac{4}{4} \hbar^2 = \alpha \frac{1}{2} \hbar^2 = \frac{\alpha \hbar^2}{2}$$

• Caso
$$j = \frac{1}{2}$$
: $\hat{J}^2 = j(j+1)\hbar^2 = \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{2} \hbar^2 = \frac{3}{4} \hbar^2$

Entonces, la energía correspondiente es:

$$E_{j=\frac{1}{2}} = \alpha \, \frac{1}{2} \Big(\frac{3}{4} \, \hbar^2 - 2 \hbar^2 - \frac{3}{4} \, \hbar^2 \Big) = \alpha \, \frac{1}{2} \Big(\frac{3-8-3}{4} \Big) \, \hbar^2 = \alpha \, \frac{1}{2} \cdot \frac{-8}{4} \, \hbar^2 = -\alpha \, \hbar^2$$

Por lo tanto, los niveles de energía y sus degeneraciones son:

-
$$E_{j=\frac{3}{2}} = \frac{\alpha \hbar^2}{2}$$
, con degeneración 4.

-
$$E_{j=\frac{1}{2}}=-\alpha \, \hbar^2$$
, con degeneración 2.
b)

En este inciso, queremos construir los estados de momento angular total $|J, m_J\rangle$ como combinaciones lineales de los estados $|l, m_l\rangle|s, m_s\rangle$, donde:

- El momento angular orbital es (l = 1, así que m_l puede tomar los valores (-1, 0, 1).
- El espín es $s=\frac{1}{2}$, así que m_s puede tomar los valores $-\frac{1}{2}$ y $\frac{1}{2}$.
- El momento angular total J puede tomar los valores $J = l + s = \frac{3}{2}$ y $J = l s = \frac{1}{2}$.

Cada uno de estos valores de J tiene una serie de valores posibles para m_J , y para cada caso, vamos a expresar el estado $|J,m_J\rangle$ en función de los estados $|l,m_l\rangle|s,m_s\rangle$ utilizando los coeficientes de Clebsch-Gordan.

Para $J=\frac{3}{2}$, los valores de m_J pueden ser $(m_J=\frac{3}{2},\frac{1}{2},-\frac{1}{2},-\frac{3}{2})$.

• Estado $\left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right|$

Para este caso, el valor total de $m_J = \frac{3}{2}$ se obtiene solo cuando:

-
$$m_l = 1$$
 y $m_s = \frac{1}{2}$, ya que $m_J = m_l + m_s = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$.

Entonces:

$$\left|\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\right\rangle = \left|1, 1\right\rangle \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$$

Es el único estado posible en esta combinación, así que el coeficiente de Clebsch-Gordan es 1.

• Estado $\left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle$

Para obtener $m_J = \frac{1}{2}$ tenemos dos combinaciones posibles de m_l y m_s :

1.
$$m_l = 1$$
 y $m_s = -\frac{1}{2}$, lo cual da $m_J = 1 + \left(-\frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2}$.

2.
$$m_l = 0$$
 y $m_s = \frac{1}{2}$, lo cual da $m_J = 0 + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$.

Por lo tanto, el estado $\left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right|$ es una combinación lineal de estos dos casos:

$$\left|\frac{3}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\left|1,1\right\rangle \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}\left|1,0\right\rangle \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

Tenemos los coeficientes de Clebsch-Gordan $\sqrt{\frac{2}{3}}$ y $\sqrt{\frac{1}{3}}$ para obtener la combinación lineal.

• Estado $\left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle$

Para obtener $m_J = \frac{1}{2}$, también tenemos dos combinaciones posibles de m_l y m_s :

1.
$$m_l = 0$$
 y $m_s = -\frac{1}{2}$, lo cual da $m_J = 0 - \frac{1}{2} = -\frac{1}{2}$.

2.
$$m_l = -1$$
 y $m_s = \frac{1}{2}$, lo cual da $m_J = -1 + \frac{1}{2} = -\frac{1}{2}$.

Entonces, el estado $\left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right|$ es:

$$\left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |1, 0\rangle \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, -1\rangle \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$$

• Estado $\left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right|$

Para obtener $m_J=-\frac{3}{2}$, la única posibilidad es:

-
$$m_l = 0$$
 y $m_s = -\frac{1}{2}$, ya que $m_J = -1 - \frac{1}{2} = -\frac{3}{2}$.

Entonces:

$$\left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle = |1, -1\rangle \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle$$

Este es el único estado posible en esta combinación, así que el coeficiente de Clebsch-Gordan es 1.

Para $J = \frac{1}{2}$ los valores de m_J pueden ser $m_J = \frac{1}{2}$ y $m_J = -\frac{1}{2}$.

• Estado $\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right|$

Para obtener $m_J = \frac{1}{2}$, tenemos dos combinaciones posibles:

1.
$$m_l = 1$$
 y $m_s = -\frac{1}{2}$, lo cual da $m_J = 0 - \frac{1}{2} = -\frac{1}{2}$

2.
$$m_l = 0$$
 y $m_s = \frac{1}{2}$, lo cual da $m_J = -1 + \frac{1}{2} = -\frac{1}{2}$.

Entonces, el estado $\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right|$ es:

$$\left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}}\left|1,1\right\rangle \left|\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}\left|1,0\right\rangle \left|\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle$$

• Estado $\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right|$

Para obtener $m_J = -\frac{1}{2}$, también tenemos dos combinaciones posibles:

1.
$$m_l = 0$$
 y $m_s = -\frac{1}{2}$, lo cual da $m_J = 0 - \frac{1}{2} = -\frac{1}{2}$

2.
$$m_l = 1$$
 y $m_s = \frac{1}{2}$, lo cual da $m_J = -1 + \frac{1}{2} = -\frac{1}{2}$.

Entonces, el estado $\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right|$ es:

$$\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \left|1, 1\right\rangle \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} \left|1, -1\right\rangle \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle$$

En cada estado podemos apreciar quienes son los coeficientes de Clebsch-Gordan

c)

En el primer inciso encontramos los valores propios del hamiltoniano:

- Para
$$j = \frac{3}{2}$$
: $E_{3/2} = \alpha \cdot \frac{1}{2} \hbar^2 = \frac{\alpha \hbar^2}{2}$.

- Para
$$j = \frac{1}{2}$$
: $E_{1/2} = \alpha \cdot (-\hbar^2) = -\alpha \hbar^2$.

El estado inicial $|1,0;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\rangle$ es una combinación lineal de los estados de momento angular total $|j,m_j\rangle$. Para expresarlo en términos de estos estados, utilizamos los coeficientes de Clebsch-Gordan obtenidos anteriormente:

$$\left|1,0;\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}\left|j=\frac{3}{2},m_j=\frac{1}{2}\right\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}\left|j=\frac{1}{2},m_j=\frac{1}{2}\right\rangle$$

Bajo la acción del hamiltoniano, los estados $|j, m_i\rangle$ evolucionan en el tiempo como:

$$|j, m_j\rangle(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_jt}|j, m_j\rangle$$

Entonces, el estado del sistema en un tiempo t > 0 es:

$$|\psi(t)\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}e^{-\frac{i}{\hbar}E_{3/2}t} \left| j = \frac{3}{2}, m_j = \frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}e^{-\frac{i}{\hbar}E_{1/2}t} \left| j = \frac{1}{2}, m_j = \frac{1}{2} \right\rangle.$$

Sustituyendo los valores de $E_{3/2}$ y $E_{1/2}$:

$$|\psi(t)\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}e^{-\frac{i\alpha\hbar^2}{\hbar^2}t} \left| j = \frac{3}{2}, m_j = \frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}e^{\frac{i}{\hbar}\alpha\hbar^2t} \left| j = \frac{1}{2}, m_j = \frac{1}{2} \right\rangle.$$

Simplificando:

$$|\psi(t)\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}e^{-\frac{i\alpha t}{2}}|j = \frac{3}{2}, m_j = \frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}e^{i\alpha t}|j = \frac{1}{2}, m_j = \frac{1}{2}\rangle.$$

El estado $\left|1,1;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right|$ corresponde a $\left|j=\frac{3}{2},m_j=\frac{1}{2}\right|$ con un coeficiente de Clebsch-Gordan de $\sqrt{\frac{1}{3}}$ en la descomposición.

Entonces, la amplitud de probabilidad de encontrar el sistema en el estado $\left|1,1;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right|$ en el tiempo t>0 es:

$$\left\langle 1, 1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \middle| \psi(t) \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} e^{-\frac{i\alpha t}{2}} \cdot \sqrt{\frac{1}{3}} = \sqrt{\frac{2}{9}} e^{-\frac{i\alpha t}{2}}$$

La probabilidad es el cuadrado del módulo de esta amplitud:

$$P(t) = \left| \left\langle 1, 1; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \left| \psi(t) \right\rangle \right|^2 = \left| \sqrt{\frac{2}{9}} e^{-\frac{i\alpha t}{2}} \right|^2 = \frac{2}{9}.$$

La probabilidad de encontrar el sistema en el estado $\left|1,1;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}\right|$ en t > 0 es $P(t)=\frac{2}{9}$.

- 3.- Un haz de partículas está sujeto a una medición simultánea de las variables del momento angular \hat{L}^2 y \hat{L}_z , cuyos resultados son $\{l=0,m=0\}$ y $\{l=1,m=-1\}$ con probabilidades 5/9 y 4/9 respectivamente.
 - (a) (0.4 pts.) Escriba el estado del haz inmediatamente antes de la medición.
 - (b) (0.8 pts.) Las partículas del haz con l = 1 y m = -1 se separan y se someten a una segunda medición de \hat{L}_v . ¿Cuáles son los posibles resultados y sus probabilidades?
 - (c) (0.6 pts.) Construya las posibles funciones de onda derivadas de la segunda medición de \hat{L}_{v} .

a)

Para este sistema cuántico se realiza una medición simultánea de las variables $\widehat{L^2}$ y $\widehat{L_z}$. Esto significa que el sistema está en un estado propio conjunto de ambos operadores, es decir, un estado $|l,m\rangle$, donde l representa el número cuántico total del momento angular y m representa el número cuántico de la proyección del momento angular en la dirección z.

En este caso, se nos indica que hay dos posibles resultados de la medición:

- 1. $\{l=0, m=0\}$ con una probabilidad de $\frac{5}{9}$.
- 2. $\{l=1, m=-1\}$ con una probabilidad de $\frac{4}{9}$.

Veamos que el estado $|\psi\rangle$ se puede escribir como una combinación lineal de los estados propios de $\widehat{L^2}$ y $\widehat{L_z}$ con sus respectivos coeficientes de probabilidad.

Para un estado en superposición de los estados $|l=0,m=0\rangle$ y $|l=1,m=-1\rangle$, el estado $|\psi\rangle$ se expresa como:

$$| \psi \rangle = c_1 | l = 0, m = 0 \rangle + c_2 | l = 1, m = -1 \rangle$$

donde c_1 y c_2 son los coeficientes complejos que determinan la amplitud de probabilidad de encontrar el sistema en cada uno de los estados correspondientes.

La probabilidad de cada estado en una superposición cuántica está dada por el cuadrado del valor absoluto del coeficiente que acompaña a ese estado. Es decir:

$$P(|l=0, m=0\rangle) = |c_1|^2 = \frac{5}{9}, \qquad P(|l=1, m=-1\rangle) = |c_2|^2 = \frac{4}{9}$$

Para obtener los valores de c_1 y c_2 , tomamos la raíz cuadrada de cada probabilidad, asumiendo que los coeficientes pueden ser reales y positivos:

$$c_1 = \sqrt{\frac{5}{9}} = \frac{\sqrt{5}}{3}, \qquad c_2 = \sqrt{\frac{4}{9}} = \frac{2}{3}$$

Sustituyendo los valores de c_1 y c_2 en la expresión del estado $|\psi\rangle$, obtenemos:

$$|\psi\rangle = \frac{\sqrt{5}}{3}|l = 0, m = 0\rangle + \frac{2}{3}|l = 1, m = -1\rangle$$

El estado representa la superposición cuántica del haz de partículas antes de la medición, con una mayor amplitud de probabilidad para el estado $|l=0,m=0\rangle$ en comparación con el estado $|l=1,m=-1\rangle$, debido a la probabilidad de $\frac{5}{9}$ frente a $\frac{4}{9}$.

b)

Se tiene el estado inicial $|l=1,m=-1\rangle_z$. En la base $|l=1,m=1\rangle$, $|l=1,m=0\rangle$, $|l=1,m=-1\rangle$, este estado se representa como:

$$|1, -1\rangle_z = \begin{pmatrix} 0\\0\\1 \end{pmatrix}$$

Así el sistema está en el estado de m=-1 en la dirección z, que corresponde a la última componente en esta representación.

Para l=1, el operador de momento angular $\widehat{L_y}$ en la base $\{|1,1\rangle,|1,0\rangle,|1,-1\rangle\}$ es:

$$\widehat{L_y} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0\\ i & 0 & -i\\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}.$$

Con sus autovalores siendo los posibles resultados de la medición de $\widehat{L_y}$. Para encontrar los valores de λ , calculamos el determinante de la matriz:

$$\det\begin{pmatrix} -\lambda & -\frac{i\hbar}{\sqrt{2}} & 0\\ \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} & -\lambda & -\frac{i\hbar}{\sqrt{2}}\\ 0 & \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} & -\lambda \end{pmatrix} = -\lambda \begin{vmatrix} -\lambda & -\frac{i\hbar}{\sqrt{2}}\\ \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} & -\lambda \end{vmatrix} - \left(-\frac{i\hbar}{\sqrt{2}}\right) \begin{vmatrix} \frac{i\hbar}{\sqrt{2}} & -\frac{i\hbar}{\sqrt{2}}\\ 0 & -\lambda \end{vmatrix} = -\lambda^3 + \hbar\lambda = 0$$

$$\Rightarrow \lambda = \pm \hbar$$
, 0

Los valores propios de $\widehat{L_y}$ son $+\hbar$, 0, y $-\hbar$. Los autovectores de $\widehat{L_y}$ ($\{|1,1\rangle, |1,0\rangle, |1,-1\rangle\}$) son:

• Para
$$+\hbar$$
: $\left| m_y = +1 \right\rangle_y = \begin{pmatrix} -1 \\ -i\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$, $\sqrt{1+2+1} = 2 \Rightarrow \left| m_y = +1 \right\rangle_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ -i\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$

• Para 0:
$$|m_y = 0\rangle_y = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \sqrt{1+1} = \sqrt{2} \Rightarrow |m_y = 0\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

• Para
$$-\hbar$$
: $\left| m_y = -1 \right\rangle_y = \begin{pmatrix} -1 \\ i\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$, $\sqrt{1+2+1} = 2 \Rightarrow \left| m_y = -1 \right\rangle_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ i\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$

De este modo la base del operador $\widehat{L_y}$ es:

$$\left\{|1,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\0\\1 \end{pmatrix}, \qquad |1,1\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1\\-i\sqrt{2}\\1 \end{pmatrix}, \qquad |1,-1\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1\\i\sqrt{2}\\1 \end{pmatrix}\right\}$$

Para las probabilidades de los posibles resultados, calculamos el cuadrado del valor absoluto de cada coeficiente:

• Probabilidad de obtener $m_y = -1$:

$$P(m_y = -1) = \left|\frac{1}{2}\right|^2 = \frac{1}{4}$$

• Probabilidad de obtener $m_y = 0$:

$$P(m_y = 0) = \left|\frac{1}{2}\right|^2 = \frac{1}{4}$$

• Probabilidad de obtener $m_y = +1$:

$$P(m_y = +1) = \left|\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2}$$

c)

Dado el estado inicial y las probabilidades de los resultados de $\widehat{L_y}$, podemos descomponer el estado $|l=1,m=-1\rangle_z$ en términos de los autovectores de $\widehat{L_y}$, que son:

$$|m_y = +1\rangle_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ -i\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad |m_y = 0\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad |m_y = -1\rangle_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ i\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$$

Para las posibles funciones de onda derivadas de la segunda medición de $\widehat{L_y}$, tenemos:

1. Para l=1, m=0: El posible valor de $\widehat{L_y}$ es 0. La función de onda es:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|1,0\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\0\\1\end{pmatrix}.$$

2. Para l=1, m=+1: El posible valor de $\widehat{L_y}$ es \hbar . La función de onda es:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}|1,1\rangle_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} \\ -i\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$$

1. Para l=1, m=-1: El posible valor de $\widehat{L_y}$ es $-\hbar$. La función de onda es:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{2}|1, -1\rangle_y = \frac{1}{2} {-1 \choose i\sqrt{2}}.$$

4.- (1.6 pts.) Considere un estado atómico especificado por momentos angulares $\hat{\mathbf{L}}$, $\hat{\mathbf{S}}$ y $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$ colocado en un campo magnético uniforme \mathbf{B} . Tratando la interacción entre el momento magnético del electrón y el campo magnético como la perturbación en el hamiltoniano, es decir, $\hat{H}' = -\hat{\mathbf{\mu}} \cdot \hat{\mathbf{B}}$, donde $\hat{\mathbf{\mu}} = \hat{\mathbf{\mu}}_L + \hat{\mathbf{\mu}}_S$. Usando teoría de perturbaciones a primer orden, calcule la corrección de la energía en términos de la proyección de $\hat{\mathbf{J}}$ en la dirección $Z(m_t)$ y dibuje los niveles de energía para el caso l=2.

Veamos los eigenvalores, para eso recordemos que $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S} \Rightarrow \hat{J}^2 = (\hat{L} + \hat{S}) \cdot (\hat{L} + \hat{S}) = \hat{L}^2 + 2\hat{L}\hat{S} + \hat{S}^2$, donde $\hat{\mu}\hat{S} = \frac{1}{2}(\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2)$, llegamos con esto a:

$$\left\langle nljm \middle| \hat{L} \cdot \hat{S} \middle| nljm \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$$

Tomamos un campo magnético uniforme \hat{B} y la interacción del momento magnético del electrón, el Hamiltoniano perturbado se define como:

$$\widehat{H'} = -\widehat{\mu} \cdot \widehat{B}$$

donde el momento magnético total $\hat{\mu}$ es la suma de los momentos magnéticos orbital $\widehat{\mu_L}$ y de espín $\widehat{\mu_S}$:

$$\hat{\mu} = \widehat{\mu_L} + \widehat{\mu_S}$$

Los momentos magnéticos orbital y de espín están dados por:

$$\widehat{\mu_L} = -\frac{e}{2m_e c}\widehat{L}, \qquad \widehat{\mu_S} = -\frac{ge}{2m_e c}\widehat{S}$$

donde $g \approx 2$ es el factor de Landé del espín, e la carga del electrón, y m_e la masa del electrón.

Así, el momento magnético total es:

$$\hat{\mu} = -\frac{e}{2m_oc}(\hat{L} + g\hat{S})$$

La interacción entre el momento y el campo magnéticos \hat{B} es:

$$-\hat{\mu} \cdot \hat{B} = \frac{e}{2m_e c} (\hat{L} + g\hat{S}) \cdot \hat{B}$$

Como estamos interesados en la proyección de \hat{J} en la dirección Z (eje del campo magnético), podemos escribir:

$$-\hat{\mu} \cdot \hat{B} = \frac{eB}{2m_o c} (\hat{L}_z + g\hat{S}_z)$$

De la teoría de perturbaciones tenemos que $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{H}'$, de modo que el hamiltoniano es,

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{H}', \quad con \quad \widehat{H}' = -\widehat{\mu} \cdot \widehat{B} = \frac{eB}{2m_o} (\widehat{L}_z + g\widehat{S}_z)$$

La correlación a primer orden es: $E_n^{(1)} = \langle \psi_n^0 | \hat{H}' | \psi_n^0 \rangle = \frac{eB}{2m_e} \langle n \ l \ j \ m_j | \hat{L}_z + g \hat{S}_z | n \ l \ j \ m_j \rangle, \ g \approx 2$

Lo que nos lleva a,

$$\begin{split} E_n^{(1)} &= \frac{eB}{2m_ec} \left\langle n \, l \, j \, m_j \middle| \hat{J}_z + \hat{S}_z \middle| n \, l \, j \, m_j \right\rangle \\ &= \frac{eB}{2m_ec} \left(\left\langle n \, l \, j \, m_j \middle| \hat{J}_z \middle| n \, l \, j \, m_j \right\rangle + \left\langle n \, l \, j \, m_j \middle| \hat{S}_z \middle| n \, l \, j \, m_j \right\rangle \right) \\ &= \frac{eB}{2m_ec} \left(\hbar m_j + \left\langle n \, l \, j \, m_j \middle| \hat{S}_z \middle| n \, l \, j \, m_j \right\rangle \right) \\ &= \frac{eB}{2m_ec} \left(\hbar m_j + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \hbar m_j \right) \\ &= \frac{eB}{2m_ec} \hbar m_j \left(1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \right) \end{split}$$

Tomando, $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ es el magnetón de Bohr, y g_j es el factor de Landé efectivo, dado por:

$$g_j = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$$

De este modo, la corrección de primer orden de la energía para un estado con un valor dado de $j y m_i es: E_n^{(1)} = B \mu_B m_i g_i$

Para un electrón con momento angular orbital l=2 y espín $s=\frac{1}{2}$, los posibles valores de j son:

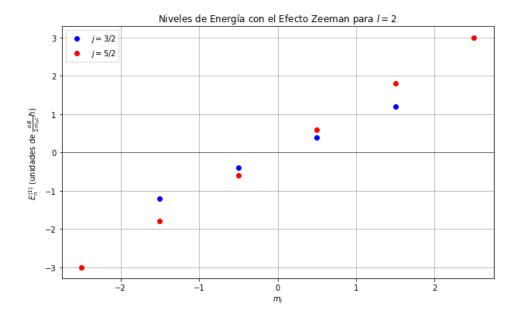
$$j = l \pm s = 2 \pm \frac{1}{2} = \frac{3}{2}, \frac{5}{2}$$

De este modo.

- Para $j = \frac{3}{2}$, se tiene $m_j = -\frac{3}{2}$, $-\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, $\frac{3}{2}$ Para $j = \frac{5}{2}$, se tiene $m_j = -\frac{5}{2}$, $-\frac{3}{2}$, $-\frac{1}{2}$, $\frac{1}{2}$, $\frac{3}{2}$, $\frac{5}{2}$

Vamos a sustituir en la correlación de energía

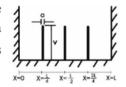
$$\begin{split} j &= \frac{3}{2}, \qquad E_n^{(1)} = \frac{eB}{2m_ec} \hbar m_j \left(1 + \frac{\frac{3}{2} \left(\frac{3}{2} + 1 \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) - 2(2+1)}{2 \left(\frac{3}{2} \right) \left(\frac{3}{2} + 1 \right)} \right) = \frac{4}{5} \frac{eB}{2m_ec} \hbar m_j \\ j &= \frac{5}{2}, \qquad E_n^{(1)} = \frac{eB}{2m_ec} \hbar m_j \left(1 + \frac{\frac{5}{2} \left(\frac{5}{2} + 1 \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) - 2(2+1)}{2 \left(\frac{5}{2} \right) \left(\frac{5}{2} + 1 \right)} \right) = \frac{6}{5} \frac{eB}{2m_ec} \hbar m_j \end{split}$$



import matplotlib.pyplot as plt

```
import numpy as np
eB_2mec = 1
hbar = 1
mj_3_2 = np.array([-3/2, -1/2, 1/2, 3/2])
mj_5_2 = np.array([-5/2, -3/2, -1/2, 1/2, 3/2, 5/2])
E_{j_3_2} = (4/5) * eB_2 mec * hbar * mj_3_2
E_j_5_2 = (6/5) * eB_2 mec * hbar * mj_5_2
plt.figure(figsize=(10, 6))
plt.plot(mj_3_2, E_j_3_2, 'o', color="blue", label=r'$j = 3/2$')
plt.plot(mj_5_2, E_j_5_2, 'o', color="red", label=r'$j = 5/2$')
plt.xlabel(r'$m_j$')
plt.ylabel(r'E_n^{(1)}\ (unidades de \frac{eB}{2m_e c} \hbar)')
plt.title('Niveles de Energía con el Efecto Zeeman para $l=2$')
plt.axhline(0, color='black', linewidth=0.5)
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()
```

5.- (1.6 pts.) Un pozo infinito con paredes en x=0 y x=L, así como tres barras de potencial de ancho a y altura V localizadas en $x=\frac{L}{4}$, $x=\frac{L}{2}$ y $x=\frac{3L}{4}$. Usando la teoría de perturbaciones a primer orden, estime la diferencia entre las energías perturbadas definida como $\Delta E = E_6^{(1)} - E_4^{(1)}$.



En un pozo infinito de anchura L, las funciones de onda no perturbadas y los niveles de energía están dados por:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right), \qquad n = 1, 2, 3, ..., \qquad E_n^{(0)} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

La perturbación consiste en tres potenciales adicionales de ancho a y altura V, localizados en: $x = \frac{L}{4}$, $x = \frac{L}{2}$, $x = \frac{3L}{4}$. Usando la correlación de la energía a primer orden:

$$\begin{split} E_n^{(1)} &= \langle \psi_n^0 | V_0 | \psi_n^0 \rangle = V_0 \langle \psi_n^0 | \psi_n^0 \rangle = V_0 \left[\int_{\frac{L}{4} - \frac{a}{2}}^{\frac{L}{4} + \frac{a}{2}} |\psi_n^0(x)|^2 dx + \int_{\frac{L}{2} - \frac{a}{2}}^{\frac{L}{2} + \frac{a}{2}} |\psi_n^0(x)|^2 dx + \int_{\frac{3L}{4} - \frac{a}{2}}^{\frac{3L}{4} + \frac{a}{2}} |\psi_n^0(x)|^2 dx + \int_{\frac{3L}{4} - \frac{a}{2}}^{\frac{3L}{4} + \frac{a}{2}} |\psi_n^0(x)|^2 dx \right] \\ &= \frac{2V_0}{L} \left[\int_{\frac{L}{4} - \frac{a}{2}}^{\frac{L}{4} + \frac{a}{2}} \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{L} \right) dx + \int_{\frac{L}{2} - \frac{a}{2}}^{\frac{L}{2} + \frac{a}{2}} \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{L} \right) dx + \int_{\frac{3L}{4} - \frac{a}{2}}^{\frac{3L}{4} + \frac{a}{2}} \sin^2 \left(\frac{n\pi x}{L} \right) dx \right] \end{split}$$

De donde, $\int \sin^2(x) dx = \frac{1}{2} \left(x + \frac{1}{2} \sin(2x) \right)$

$$\begin{split} \int_{\frac{L}{4} - \frac{a}{2}}^{\frac{L}{4} + \frac{a}{2}} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{L}{4} + \frac{a}{2}\right) - \frac{L}{4n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi}{L}\left(\frac{L}{4} + \frac{a}{2}\right)\right) - \frac{1}{2} \left(\frac{L}{4} - \frac{a}{2}\right) + \frac{L}{4n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi}{L}\left(\frac{L}{4} - \frac{a}{2}\right)\right) \\ &= \frac{a}{2} - \frac{L}{2n\pi} \left(\cos\left(\frac{n\pi}{2}\right)\sin\left(\frac{an\pi}{L}\right)\right) \end{split}$$

$$\int_{\frac{L}{2} - \frac{a}{2}}^{\frac{L}{2} + \frac{a}{2}} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx =$$

$$= \frac{1}{2} \left(\frac{L}{2} + \frac{a}{2}\right) - \frac{L}{4n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi}{L}\left(\frac{L}{2} + \frac{a}{2}\right)\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{L}{2} - \frac{a}{2}\right) + \frac{L}{4n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi}{L}\left(\frac{L}{2} - \frac{a}{2}\right)\right)$$

$$= \frac{a}{2} - \frac{L}{2n\pi} \left(\cos(n\pi)\sin\left(\frac{an\pi}{L}\right)\right)$$

$$\int_{\frac{3L}{4} - \frac{a}{2}}^{\frac{3L}{4} + \frac{a}{2}} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx$$

$$= \frac{1}{2} \left(\frac{3L}{4} + \frac{a}{2}\right) - \frac{L}{4n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi}{L}\left(\frac{3L}{4} + \frac{a}{2}\right)\right) - \frac{1}{2}\left(\frac{3L}{4} - \frac{a}{2}\right)$$

$$+ \frac{L}{4n\pi} \sin\left(\frac{2n\pi}{L}\left(\frac{3L}{4} - \frac{a}{2}\right)\right) = \frac{a}{2} - \frac{L}{2n\pi} \left(\cos\left(\frac{3n\pi}{2}\right)\sin\left(\frac{an\pi}{L}\right)\right)$$

De modo que,

$$\begin{split} E_n^{(1)} &= \frac{2V_0}{L} \left[\frac{a}{2} - \frac{L}{2n\pi} \left(\cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) \sin\left(\frac{an\pi}{L}\right) \right) + \frac{a}{2} - \frac{L}{2n\pi} \left(\cos(n\pi) \sin\left(\frac{an\pi}{L}\right) \right) + \frac{a}{2} \right. \\ & \left. - \frac{L}{2n\pi} \left(\cos\left(\frac{3n\pi}{2}\right) \sin\left(\frac{an\pi}{L}\right) \right) \right] \\ &= \frac{2V_0}{L} \left[\frac{3}{2} a - \frac{L}{2n\pi} \left(\cos\left(\frac{n\pi}{2}\right) \sin\left(\frac{an\pi}{L}\right) + \cos(n\pi) \sin\left(\frac{an\pi}{L}\right) + \cos\left(\frac{3n\pi}{2}\right) \sin\left(\frac{an\pi}{L}\right) \right) \right] \end{split}$$

Para n = 6:

$$\begin{split} E_6^{(1)} &= \frac{2V_0}{L} \left[\frac{3}{2} a - \frac{L}{2(6)\pi} \left(\cos\left(\frac{(6)\pi}{2}\right) \sin\left(\frac{a(6)\pi}{L}\right) + \cos\left((6)\pi\right) \sin\left(\frac{a(6)\pi}{L}\right) \right. \\ &\quad + \cos\left(\frac{3(6)\pi}{2}\right) \sin\left(\frac{a(6)\pi}{L}\right) \right] \\ &= \frac{2V_0}{L} \left[\frac{3}{2} a - \frac{L}{12\pi} \left(\cos(3\pi) \sin\left(\frac{a6\pi}{L}\right) + \cos(6\pi) \sin\left(\frac{a6\pi}{L}\right) + \cos(9\pi) \sin\left(\frac{a6\pi}{L}\right) \right) \right] \\ &= \frac{2V_0}{L} \left[\frac{3}{2} a - \frac{L}{12\pi} \left(-\sin\left(\frac{a6\pi}{L}\right) + \sin\left(\frac{a6\pi}{L}\right) - \sin\left(\frac{a6\pi}{L}\right) \right) \right] \\ &= \frac{2V_0}{L} \left[\frac{3}{2} a + \frac{L}{12\pi} \sin\left(\frac{a6\pi}{L}\right) \right] \end{split}$$

Para n = 4:

$$\begin{split} E_6^{(1)} &= \frac{2V_0}{L} \left[\frac{3}{2} \, a - \frac{L}{2(4)\pi} \left(\cos\left(\frac{(4)\pi}{2}\right) \sin\left(\frac{a(4)\pi}{L}\right) + \cos\left((4)\pi\right) \sin\left(\frac{a(4)\pi}{L}\right) \right. \\ &\quad + \cos\left(\frac{3(4)\pi}{2}\right) \sin\left(\frac{a(4)\pi}{L}\right) \right] \\ &= \frac{2V_0}{L} \left[\frac{3}{2} \, a - \frac{L}{8\pi} \left(\cos(2\pi) \sin\left(\frac{a4\pi}{L}\right) + \cos(4\pi) \sin\left(\frac{a4\pi}{L}\right) + \cos(6\pi) \sin\left(\frac{a4\pi}{L}\right) \right) \right] \\ &= \frac{2V_0}{L} \left[\frac{3}{2} \, a - \frac{L}{8\pi} \left(\sin\left(\frac{a4\pi}{L}\right) + \sin\left(\frac{a4\pi}{L}\right) + \sin\left(\frac{a4\pi}{L}\right) \right) \right] \\ &= \frac{2V_0}{L} \left[\frac{3}{2} \, a + \frac{3L}{8\pi} \sin\left(\frac{a4\pi}{L}\right) \right] \end{split}$$

La diferencia $\Delta E = E_6^{(1)} - E_4^{(1)}$ es entonces:

$$\begin{split} \Delta E &= \frac{2V_0}{L} \left[\frac{3}{2} a + \frac{L}{12\pi} \sin\left(\frac{a6\pi}{L}\right) \right] - \frac{2V_0}{L} \left[\frac{3}{2} a + \frac{L}{12\pi} \sin\left(\frac{a4\pi}{L}\right) \right] \\ &= \frac{2V_0}{L} \left(\frac{3}{2} a + \frac{L}{12\pi} \sin\left(\frac{a6\pi}{L}\right) - \frac{3}{2} a - \frac{L}{12\pi} \sin\left(\frac{a4\pi}{L}\right) \right) \\ &= V_0 \left(\frac{1}{6\pi} \sin\left(\frac{a6\pi}{L}\right) - \frac{3}{4\pi} \sin\left(\frac{a4\pi}{L}\right) \right) \end{split}$$

6.- (1.6 pts.) Una partícula de masa m en una caja rectangular con paredes de potencial infinito dado por $V(x,y) = \begin{cases} 0, & \text{si } 0 < x < L \text{ y } 0 < y < \pi L \\ \infty, & \text{otros casos} \end{cases}$ se encuentra sujeta a un campo eléctrico uniforme en la dirección $\tan(\theta) = \pi$. Calcule la energía del estado base y del primer estado excitado usando la teoría de

perturbaciones a primer y segundo orden.

La partícula de masa m se encuentra en una caja rectangular en la que el potencial V(x,y) es cero dentro de la región (0 < x < L) y $(0 < y < \pi L)$, y es infinito en los bordes de esta región. Además, se aplica un campo eléctrico uniforme en una dirección determinada por el ángulo θ con $\tan(\theta) = \pi$.

Dado que $tan(\theta) = \pi$, se tiene que:

$$\cos\theta = \frac{1}{\sqrt{1+\pi^2}}, \quad \sin\theta = \frac{\pi}{\sqrt{1+\pi^2}}.$$

Tenemos una versión del pozo cuadrado bidimensional, donde los estados propios y las energías del sistema sin perturbación están bien definidos. Dado el potencial de paredes infinitas, los estados propios $\psi_{n_x,n_y}(x,y)$ y las energías E_{n_x,n_y} del sistema sin perturbación son:

$$\psi_{n_x,n_y}(x,y) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \sqrt{\frac{2}{\pi L}} \sin\left(\frac{n_y \pi y}{\pi L}\right) = \frac{2}{L\sqrt{\pi}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_y y}{L}\right)$$

donde n_x , n_y son números enteros positivos, y las energías correspondientes son:

$$E_{n_x,n_y}^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left(n_x^2 + \frac{n_y^2}{\pi^2} \right)$$

Además, tenemos que,

$$\bar{E} = -\nabla \phi \Rightarrow \phi = \int \bar{E} \cdot d\bar{l} = \frac{V'(x, y)}{q}$$

$$\Rightarrow V'(x, y) = \frac{qE}{\sqrt{1 + \pi^2}} \left[\int (\hat{x} + \pi \hat{y}) \cdot \left(d_x \hat{x} + d_y \hat{y} \right) \right] = \frac{qE}{\sqrt{1 + \pi^2}} (x + \pi y)$$

Vamos a calcular las perturbaciones de primer y segundo orden.

Estado de perturbación de primer orden.

$$\begin{split} E_{n_{x},n_{y}}^{(1)} &= \left\langle \psi_{n_{x},n_{y}}^{(0)} | H' | \psi_{n_{x},n_{y}}^{(0)} \right\rangle \\ &= \int_{0}^{\pi L} \int_{0}^{L} V'(x,y) \left| \psi_{n_{x},n_{y}}^{(0)} \right|^{2} dx dy \\ &= \int_{0}^{\pi L} \int_{0}^{L} \frac{qE}{\sqrt{1+\pi^{2}}} (x+\pi y) \left| \frac{2}{L\sqrt{\pi}} \sin \left(\frac{n_{x}\pi x}{L} \right) \sin \left(\frac{n_{y}\pi y}{\pi L} \right) \right|^{2} dx dy \\ &= \frac{4qE}{L^{2}\pi\sqrt{1+\pi^{2}}} \int_{0}^{\pi L} \int_{0}^{L} (x+\pi y) \sin^{2} \left(\frac{n_{x}\pi x}{L} \right) \sin^{2} \left(\frac{n_{y}\pi y}{\pi L} \right) dx dy \\ &= \frac{4qE}{L^{2}\pi\sqrt{1+\pi^{2}}} \int_{0}^{\pi L} \sin^{2} \left(\frac{n_{y}\pi y}{\pi L} \right) \left(\int_{0}^{L} \sin^{2} \left(\frac{n_{x}\pi x}{L} \right) (x+\pi y) dx \right) dy \end{split}$$

$$\begin{split} &= \frac{2qE}{L^2\pi\sqrt{1+\pi^2}} \int_0^{\pi L} \sin^2\left(\frac{n_y\pi y}{\pi L}\right) \left(\int_0^L \left(x \sin^2\left(\frac{n_x\pi x}{L}\right) + \pi y \sin^2\left(\frac{n_x\pi x}{L}\right)\right) dx\right) dy \\ &= \frac{2qE}{L^2\pi\sqrt{1+\pi^2}} \int_0^{\pi L} \sin^2\left(\frac{n_y\pi y}{\pi L}\right) \left(\frac{L^2}{2} - \frac{Lx \sin\left(\frac{2n_x\pi x}{L}\right)}{2n_x\pi}\right) \bigg|_0^L - \frac{L^2}{4n_x^2\pi^2} \cos\left(\frac{2n_x\pi x}{L}\right) \bigg|_0^L + \pi y L \\ &- \frac{\pi y}{2n_x\pi} \sin\left(\frac{2n_x\pi x}{L}\right) \bigg|_0^L \right) dy \\ &= \frac{2qE}{L^2\pi\sqrt{1+\pi^2}} \int_0^{\pi L} \sin^2\left(\frac{n_y\pi y}{\pi L}\right) \left(\frac{L^2}{2} + \pi y L\right) dy \\ &= \frac{2qE}{L^2\pi\sqrt{1+\pi^2}} \left(\frac{L}{2} \int_0^{\pi L} \sin^2\left(\frac{n_yy}{L}\right) dy + \pi L \int_0^{\pi L} y \sin^2\left(\frac{n_yy}{L}\right) dy\right) \\ &= \frac{2qE}{L\pi\sqrt{1+\pi^2}} \left(\frac{L}{2} \int_0^{\pi L} \sin^2\left(\frac{n_yy}{L}\right) dy + \pi \int_0^{\pi L} y \sin^2\left(\frac{n_yy}{L}\right) dy\right) \\ &= \frac{2qE}{L\pi\sqrt{1+\pi^2}} \left(\frac{L}{2} \int_0^{\pi L} \sin^2\left(\frac{n_yy}{L}\right) dy + \pi \int_0^{\pi L} y \sin^2\left(\frac{n_yy}{L}\right) dy\right) \\ &= \frac{qE}{L\sqrt{1+\pi^2}} \left(\frac{L}{2\pi} \left(\pi L - \frac{L}{2n_y} \sin\left(\frac{2n_yy}{L}\right)\right) \right|_0^{\pi L}\right) + \frac{\pi^2 L^2}{2} - \frac{Ly \sin\left(\frac{2n_yy}{L}\right)}{2n_y} \left|_0^{\pi L}\right| \\ &- \frac{L^2}{4n_y^2} \cos\left(\frac{2n_yy}{L}\right) \left|_0^{\pi L}\right| \\ &= \frac{qE}{L\sqrt{1+\pi^2}} \left(\frac{L}{2\pi} (\pi L) + \frac{\pi^2 L^2}{2}\right) \\ &= \frac{qE}{L\sqrt{1+\pi^2}} \left(\frac{L^2}{2} + \frac{\pi^2 L^2}{2}\right) \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$E_{n_x,n_y}^{(1)} = \frac{qEL\sqrt{1+\pi^2}}{2}, \qquad \forall n$$

Estado de perturbación de segundo orden la corrección de segundo se calcula como:

$$E_{n_x,n_y}^{(2)} = \sum_{(n_x',n_y')\neq(n_x,n_y)} \frac{\left| \left\langle \psi_{m_x,m_y}^{(0)} | H' | \psi_{n_x,n_y}^{(0)} \right\rangle \right|^2}{E_{n_x,n_y}^{(0)} - E_{m_x,m_y}^{(0)}}$$

Aquí, necesitamos calcular los elementos de matriz $\left\langle \psi_{m_x,m_y}^{(0)}|H'|\psi_{n_x,n_y}^{(0)}\right\rangle$ entre el estado base y los estados excitados para determinar la corrección de segundo orden a la energía.

Vamos por partes,

$$\begin{split} E_{n_x,n_y}^{(0)} - E_{m_x,m_y}^{(0)} &= \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \left(n_x^2 + \left(\frac{n_y}{\pi} \right)^2 - m_x^2 - \left(\frac{m_y}{\pi} \right)^2 \right) \\ & \left(\psi_{m_x,m_y}^{(0)} |H'| \psi_{n_x,n_y}^{(0)} \right) \\ &= \int_0^{\pi L} \int_0^L \frac{qE}{\sqrt{1+\pi^2}} (x+\pi y) \frac{4}{L^2 \pi} \sin \left(\frac{n_x \pi x}{L} \right) \sin \left(\frac{n_y \pi y}{\pi L} \right) \sin \left(\frac{m_x \pi x}{L} \right) \sin \left(\frac{m_y \pi y}{\pi L} \right) dx dy \\ &= \frac{qE}{L^2 \pi \sqrt{1+\pi^2}} \int_0^{\pi L} \cos \left(\frac{(n_y - m_y)}{L} y \right) \\ & - \cos \left(\frac{(n_y + m_y)}{L} y \right) \left(\int_0^L x \cos \left(\frac{(n_x - m_x)\pi}{L} x \right) dx \right. \\ & - \int_0^L x \cos \left(\frac{(n_x + m_x)\pi}{L} x \right) dx + \pi y \int_0^L \cos \left(\frac{(n_x - m_x)\pi}{L} x \right) dx \\ & - \pi y \int_0^L \cos \left(\frac{(n_x + m_x)\pi}{L} x \right) dx \right) dy \\ &= \frac{qE}{L\pi^2 \sqrt{1+\pi^2}} \int_0^{\pi L} \left[\cos \left(\frac{(n_y - m_y)}{L} y \right) \right] \left[\frac{L}{(n_x - m_x)^2} \cos \left(\frac{(n_x - m_x)\pi}{L} x \right) \right]_0^L \\ & - \frac{L}{(n_x + m_x)^2} \cos \left(\frac{(n_x + m_x)\pi}{L} x \right) \left| \frac{L}{0} \right| dy \\ &= \frac{qE}{\pi^3 \sqrt{1+\pi^2}} \left(\frac{\cos ((n_x - m_x)\pi) - 1}{(n_x - m_x)^2} + \frac{1 - \cos ((n_x + m_x)\pi)\pi}{(n_x + m_x)^2} \right) \left[\int_0^{\pi L} \cos \left(\frac{(n_y - m_y)}{L} y \right) dy \right. \\ &= \frac{qE}{\pi^3 \sqrt{1+\pi^2}} \left(\frac{\cos ((n_x - m_x)\pi) - 1}{(n_x - m_x)^2} + \frac{1 - \cos ((n_x + m_x)\pi)\pi}{(n_x + m_x)^2} \right) (0) \\ &= \frac{qE}{\pi^3 \sqrt{1+\pi^2}} \left(\frac{\cos ((n_x - m_x)\pi) - 1}{(n_x - m_x)^2} + \frac{1 - \cos ((n_x + m_x)\pi)\pi}{(n_x + m_x)^2} \right) (0) \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$E_{n_x,n_y}^{(2)} = \sum_{(n_x',n_y')\neq(n_x,n_y)} \frac{\left| \left\langle \psi_{m_x,m_y}^{(0)} | H' | \psi_{n_x,n_y}^{(0)} \right\rangle \right|^2}{E_{n_x,n_y}^{(0)} - E_{m_x,m_y}^{(0)}} = 0$$

De este modo,

$$E_{n_x,n_y}^{(0)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left(n_x^2 + \frac{n_y^2}{\pi^2} \right), \qquad E_{n_x,n_y}^{(1)} = \frac{qEL\sqrt{1+\pi^2}}{2}, \qquad E_{n_x,n_y}^{(2)} = 0$$

Por lo tanto,

$$E_{n_x,n_y} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left(n_x^2 + \frac{n_y^2}{\pi^2} \right) + \frac{qEL\sqrt{1 + \pi^2}}{2}$$

Así,

$$\begin{split} E_{1,1} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left(1 + \frac{1}{\pi^2} \right) + \frac{qEL\sqrt{1 + \pi^2}}{2} \\ E_{2,1} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left(4 + \frac{1}{\pi^2} \right) + \frac{qEL\sqrt{1 + \pi^2}}{2} \\ E_{1,2} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left(1 + \frac{4}{\pi^2} \right) + \frac{qEL\sqrt{1 + \pi^2}}{2} \end{split}$$