

Ejercicio 1

$$PV = AT + \frac{B}{V} \quad (1)$$

10 diez

El primer principio en forma diferencial nos dice $dE = dQ - dW_{int}$

Por definición, el calor específico a $V=const$ $C_V = \left. \frac{\partial Q}{\partial T} \right|_V$

a) En principio $C_V = C_V(T, V)$

Para demostrar que $C_V = C_V(T)$ veremos que $\frac{\partial C_V}{\partial V} = 0$ y como conocemos la ecuación de estado (1) \Rightarrow es demostración

Se define en un proceso reversible $\left. dQ \right|_{reversible} = T dS$

Como S es función de estado, desarrollo $dS = \left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_V dT + \left. \frac{\partial S}{\partial V} \right|_T dV$

Luego si $V=const$, $dV=0$ y:

$$C_V = \left. \frac{\partial Q}{\partial T} \right|_V = T \left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_V$$

$$\text{Analizo: } \frac{\partial C_V}{\partial V} = \frac{\partial}{\partial V} \left(T \left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_V \right) = T \frac{\partial}{\partial V} \left(\left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_V \right)$$

como S función de estado

$$\frac{\partial^2 S}{\partial V \partial T} = \frac{\partial^2 S}{\partial T \partial V}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{\partial C_V}{\partial V} &= T \frac{\partial}{\partial T} \left(\left. \frac{\partial S}{\partial V} \right|_T \right) \\ &= T \frac{\partial}{\partial T} \left(\left. \frac{\partial P}{\partial T} \right|_V \right) \\ &= T \frac{\partial}{\partial T} \left[\frac{A}{V} \right] = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{C.A. } dF(T, V) &= \left. \frac{\partial F}{\partial T} \right|_V dT + \left. \frac{\partial F}{\partial V} \right|_T dV \\ &= d(E - TS) \\ &= TdS - PdV - SdT - TdS \\ &\stackrel{!}{=} -PdV - SdT \end{aligned}$$

Finalmente $\frac{\partial C_V}{\partial V} = 0$

$$\Rightarrow \boxed{C_V = C_V(T)} \quad \checkmark$$

como es función de constante
 $\frac{\partial^2 F}{\partial V \partial T} = \frac{\partial^2 F}{\partial T \partial V} \Leftrightarrow \left. \frac{\partial S}{\partial V} \right|_T = \left. \frac{\partial P}{\partial T} \right|_V$

b) $E(T, V)$; $S(T, V)$

Primer principio, reversible

$$\begin{aligned} dE &= \left. \frac{\partial E}{\partial T} \right|_V dT + \left. \frac{\partial E}{\partial V} \right|_T dV \stackrel{!}{=} T dS - P dV = T \left. \frac{\partial S}{\partial T} \right|_V dT + \underbrace{\left(T \left. \frac{\partial S}{\partial V} \right|_T - P \right) dV}_{C_V} \\ &\text{Efecto exacto} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \frac{\partial E}{\partial V} \Big|_T = T \frac{\partial S}{\partial V} \Big|_T - P = T \frac{\partial P}{\partial T} \Big|_V - P = T \left(\frac{A}{V} \right) - AT - \frac{B}{V^2} = -\frac{B}{V^2}$$

$$\therefore dE = C_V(T)dT - \frac{B}{V^2}dV$$

$$\text{Con lo cual } \Delta E = \int_{T_0}^T C_V(T)dT - \int_{V_0}^V \frac{B}{V^2}dV = \int_{T_0}^T C_V(T)dT + B \left(\frac{1}{V} - \frac{1}{V_0} \right)$$

yo puedo continuar
sin más información
de C_V

$$dS = \frac{C_V(T)}{T}dT + \frac{\partial S}{\partial V} \Big|_T dV = \frac{C_V(T)}{T}dT + \frac{\partial P}{\partial T} \Big|_V dV = \frac{C_V(T)}{T}dT + \frac{A}{V}dV$$

$$\Rightarrow \Delta S = \int_{T_0}^T \frac{C_V(T)}{T}dT + A \ln \left(\frac{V}{V_0} \right)$$

$$\therefore \Delta E = \int_{T_0}^T C_V(T)dT + B \left(\frac{1}{V} - \frac{1}{V_0} \right)$$



c) Si tengo una expansión libre aislada el sistema se expandirá sin hacer trabajo ni intercambiar calor de la forma que $dE = \delta Q - \delta W = 0$
(con el exterior)

$$dE = 0, \text{ pero } dT; dV \neq 0$$

$$\text{Puedo hallar una relación así } dE = 0 \Leftrightarrow C_VdT - \frac{B}{V^2}dV = 0 \Rightarrow dT = \frac{B}{V^2C_V}dV$$

$$\Rightarrow dS = \frac{C_V(T)dT}{T} + \frac{A}{V}dV = \frac{B}{V^2TC_V}dV + \frac{A}{V}dV = \left(\frac{B}{TV^2} + \frac{A}{V} \right)dV = \frac{P}{T}dV$$

donde $dV > 0$ y se ve que $dS > 0$.

Lo val concuerda bien, pues si recordamos $\int_{x_1}^{x_2} \frac{dS}{T} \Big|_{\text{Irrev}} \leq S(x_2) - S(x_1)$ (x_2, x_1 estados)

en una adiabática $\delta Q = 0 \Rightarrow S(x_2) > S(x_1)$ donde vale el igual en

un proceso reversible, que no es mi caso (expansión libre = irrev) $\therefore dS > 0$

d) En un proceso adiabático lo caracterizamos con $\delta Q = 0$ (no intercambia calor con el exterior)

$$\text{Luego } dE = -dW_{\text{int}} = -PdV$$

$$\text{Pero además, } dE = C_VdT - \frac{B}{V^2}dV$$

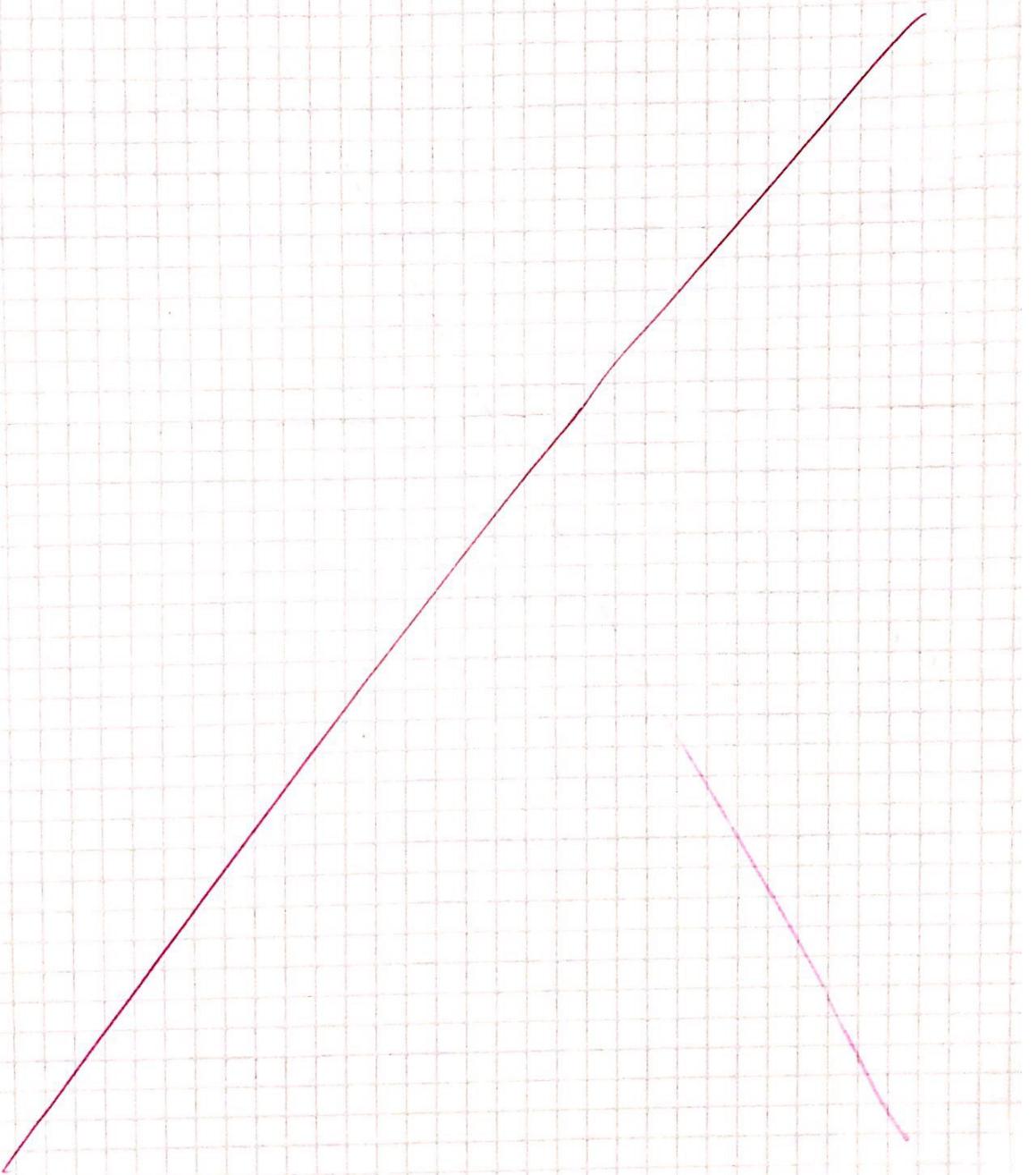
$$\Rightarrow -PdV = C_VdT - \frac{B}{V^2}dV \Leftrightarrow C_VdT = \left(\frac{B}{V^2} - AT - \frac{B}{V^2} \right)dV$$

$$\Leftrightarrow \frac{C_V(T) dT}{T} = -\frac{\Delta T}{V} dV$$

$$\Rightarrow \int_{T_0}^{T_f} \frac{C_V(T) dT}{T} = -A \ln\left(\frac{V_f}{V_0}\right) = A \ln\left(\frac{V_0}{V_f}\right) \quad \text{adiabática}$$

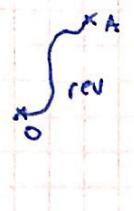
generalmente se despeja una relación como la del gas ideal $T_f V_f^{\gamma-1} = T_0 V_0^{\gamma-1} = \text{cte.}$

Que se puede, pero como no conoce $C_V(T)$ me parece mejor dejarlo así.



Ejercicio 2

a) Sea un proceso reversible X que va de un estado O a A

$$\text{Luego, recordando lo que use en el ejercicio anterior}$$


$$\int \left. \frac{\delta Q}{T} \right|_X = S(A) - S(O) \quad (1)$$

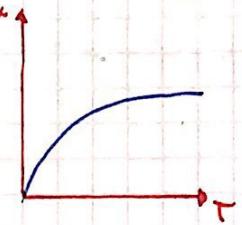
Además por definición $\left. \frac{\delta Q}{dT} \right|_X = C_X(T)$

$$\text{Si vuelvo a (1)} \Rightarrow \int \left. \frac{\delta Q}{T} \right|_X = \int \left. \frac{C_X(T)}{T} \right|_X dT = S(A) - S(O)$$

Si la $T \rightarrow 0^\circ K$, el término divisor 0 tiende a cero y las cosas divergerían.

Para que esto no suceda $C_X(T \rightarrow 0^\circ K) \rightarrow 0$.

Lo cual además se comprueba experimentalmente \Rightarrow



b) Eq térmico T_0 , partículas diatómicas, aproximación clásica válida

Supondremos una molécula diatómica como un conjunto de dos pelotitas unidas por un resorte . Bajo esta hipótesis, podemos caracterizar el

movimiento con tres grados de libertad de traslación $\sum_{i=1}^3 \frac{P_i^2}{2M}$ (CM).

A su vez, la molécula puede rotar en dos de sus ejes, $\Rightarrow \frac{I_1 w_1^2}{2} + \frac{I_2 w_2^2}{2}$

Por último, si el movimiento no está impedido podrá agregar la vibración en mis g.d.l.

$$\text{o } \Rightarrow \frac{K r^2}{2} + \frac{\mu i^2}{2}$$

$$\text{En definitiva } E = \sum_{i=1}^3 \frac{P_i^2}{2M} + \frac{I_1 w_1^2}{2} + \frac{I_2 w_2^2}{2} + \frac{K r^2}{2} + \frac{\mu i^2}{2}$$

Al estar a T_0 donde nos dicen que vale la teoría clásica, vale el teorema de equipartición, el cual nos dice que un grado de libertad con una coordenada en E de la forma $b q_i^2$ agregara a $\langle E \rangle$ $\frac{1}{2} k_B T$.

La demostración es sencilla. Sea p.ej. $E_i = \frac{Kb r^2}{2} = b r^2$

$$\langle E_i \rangle = \frac{\int br^2 e^{-\beta br^2}}{\int e^{-\beta br^2}}$$

$$\text{Si llamo } I = \int e^{-\beta x^2} \Rightarrow \langle E_i \rangle = -\frac{dI}{d\beta} \cdot \frac{1}{I} = -\frac{d}{d\beta} \ln(I)$$

$$\Rightarrow \text{sea } x = \beta^{1/2} r \quad I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-bx^2} dx \\ dx = \beta^{1/2} dr$$

$$\text{Luego } \langle E_i \rangle = -\frac{d}{d\beta} \left(\ln \left(\frac{1}{\beta^{1/2}} \cdot \int e^{-bx^2} dx \right) \right) = -\frac{d}{d\beta} \left(\ln \left(\int e^{-bx^2} dx \right) - \frac{1}{2} \ln(\beta) \right) \\ = \frac{1}{2\beta} = \frac{1}{2} k_B T.$$

\Rightarrow Con mi modelo de molécula tengo 7 g.d.l

$$\therefore \langle E \rangle = \frac{7}{2} k_B T \quad . \quad \text{Supongamos que tengo } N \text{ moléculas de estos}$$

$$\Rightarrow \langle E \rangle = N \langle E \rangle = \frac{7}{2} N k_B T$$

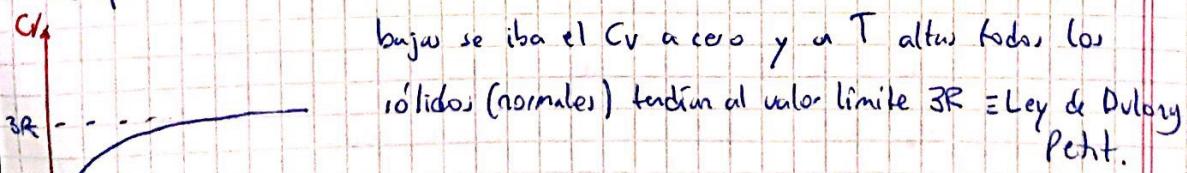
\Rightarrow por definición

$$C_V = \left. \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right|_V = \frac{7}{2} N k_B \quad \checkmark$$

La cual es válida en los sistemas en los cuales despreciamos interacción entre vecinos cercanos y las temperaturas son "altas". Con altas se refiere a que la agitación térmica sea suficiente como para activar todos los grados de libertad de movimiento, pues para ciertos rangos de T algunos son energéticamente inaccesibles y eso no lo contempla este modelo. $k_B \ll bT$

c) Sigo sobre esta. Como mencione recién. Lo que ocurrirá es que en ciertas temperaturas solo están permitido el movimiento principal y no las rotaciones o vibraciones, luego al aumentar la T se permite agregar las rotaciones y el Cv dará un salto, y si se aumenta más se liberan todos. Para contemplar esto es necesario introducir cuantización a la energía. NO

Lo que ocurría con sólidos cristalinos (tomo 1 mol para el gráfico) es que a temperaturas



baja se iba el Cv a cero y a T altas todos los sólidos (normales) tienden al valor límite $3R$ \exists Ley de Dulong y Petit.

Planck había propuesto para el espectro de radiación cuantizar la energía de los modos de vibración. (que era equivalente a cuantizar los niveles de energía)

Einstein recordó tanto el problema en los CV como la teoría de Planck y se dio cuenta que si ahora $E = \nu a$ con $a = h\nu$ (Planck) la frecuencia de vibración del oscilador

$$\Rightarrow \langle E \rangle = \frac{\sum n_a e^{-\beta n_a a}}{\sum e^{-\beta n_a a}}$$

Este es análogo a lo anterior con I .

$$\text{Sea } S = \sum e^{-\beta n_a a} = \sum (e^{-\beta h\nu})^n = \frac{1}{1 - e^{-\beta h\nu}}$$

serie geométrica de razón < 1 converge

$$\Rightarrow \langle E \rangle = -\frac{d}{d\beta} \ln(S) = -\frac{d}{d\beta} [\ln(1) - \ln(1 - e^{-\beta h\nu})] \\ = \frac{1}{1 - e^{-\beta h\nu}} (-h\nu)(-e^{-\beta h\nu})$$

$$\Rightarrow \langle E \rangle = \frac{h\nu}{e^{h\nu} - 1}$$

Supongamos ahora 1 mol del sólido cristalino $\Rightarrow N = N_A$. Einstein consideró que todas las direcciones del sólido vibraban a igual frecuencia, lo cual no resultó ser cierto, pero es una buena primera aproximación.

$$\Rightarrow \text{direcciones} = 3 \quad \therefore \langle E \rangle = 3N \langle E \rangle = \frac{3N h\nu}{e^{h\nu} - 1}$$

Al tomar $C_V = \left. \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \right|_V$ se obtiene un valor que a $T \rightarrow 0$

$$\rightarrow 3N_A h\nu = 3R \quad \text{como el gráfico y a } T \rightarrow 0$$

se anula

Si modelamos el sólido como cristal tendría



$$E = \sum_{i=1}^3 \underbrace{\frac{p_i^2}{2M}}_{CM} + \underbrace{\frac{k_i x_i^2}{2}}_{Cm} \quad \therefore 6 y dL, que estimaría un$$

$$C_V = 3N_A h\nu_3 = 3R \quad \text{que es constante}$$

y no cumple lo experimental

EXTRA . Me saboro tiempo

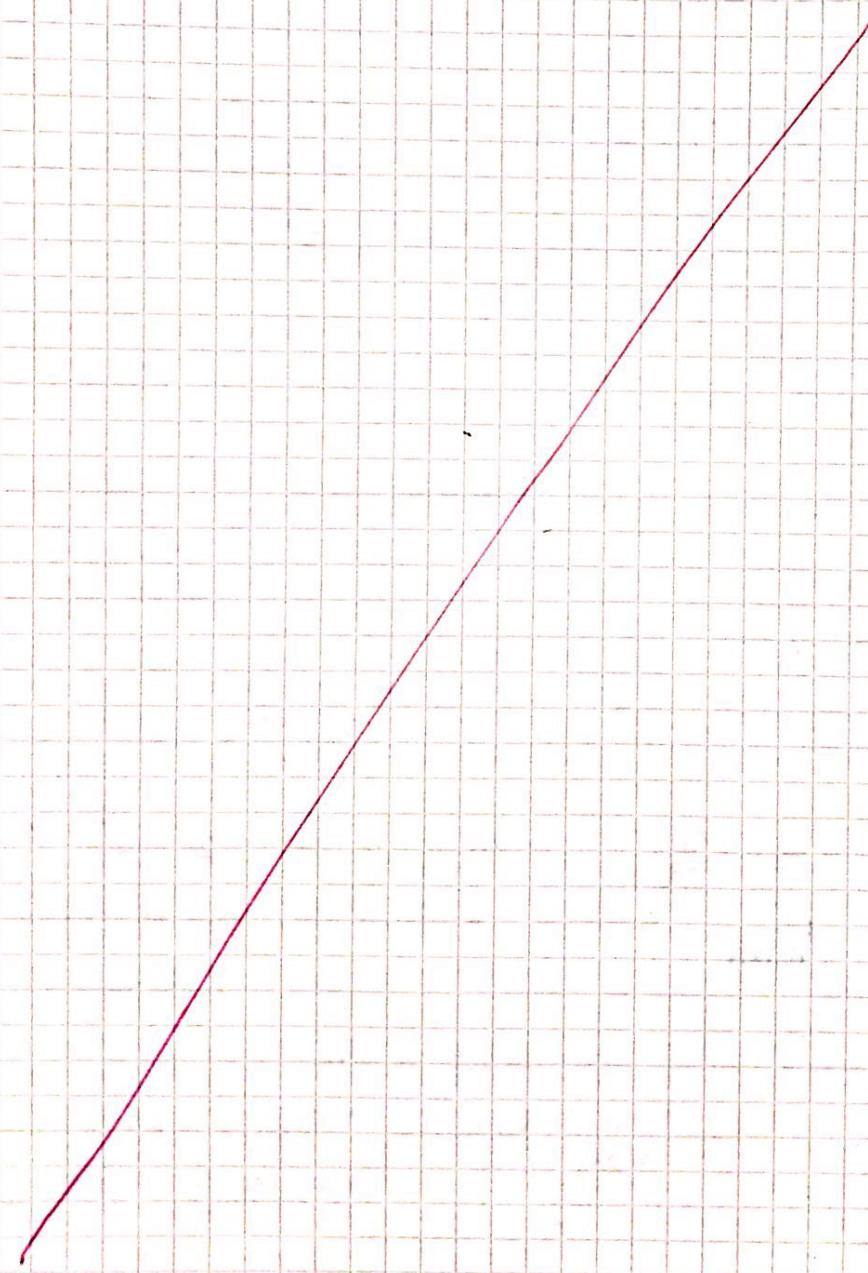
$$\Rightarrow \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \Big|_V = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{3N h V}{e^{\frac{hV}{k_B T}} - 1} \right) = \frac{3N h V}{- \left(e^{\frac{hV}{k_B T}} - 1 \right)^2} \cdot e^{\frac{hV}{k_B T}} \cdot \left(-\frac{hV}{k_B T^2} \right)$$

$$= \frac{3N k_B \cdot e^{\frac{hV}{k_B T}}}{\left(e^{\frac{hV}{k_B T}} - 1 \right)^2} \cdot \left(\frac{hV}{k_B T} \right)^2$$

y como verás formando

un mol siempre

$$3N k_B = 3R$$



Ejercicio 3Partícula masa m , spin s

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < a \\ V_0 & a < r < b \\ 0 & r > b \end{cases}$$

a) ctes de mov & CCOC

Teorema de Ehrenfest me dice $\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \rangle + i \frac{\hbar}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{A}] \rangle$

Los operadores que usamos

en general en la materia no dependen explícitamente de t

$$\Rightarrow (1) = 0$$

 \Rightarrow Se sigue que si cte de mov

$$[\hat{H}, \hat{A}] = 0 \Rightarrow \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = 0$$

↓
Comparten
autovalores, se plantea $\hat{H}\psi = E\psi$
 $\hat{A}\psi = a\psi$

Como tengo simetría esférica, el Hamiltoniano

me lo traduce a ser invariante ante rotaciones $\Rightarrow [\hat{H}, \hat{L}] = 0$ (esto es clásico lo vimos con que \hat{L} commutaba con rotaciones infinitesimales, lo cual llevaba a $[\hat{H}, \hat{L}] = 0$ y como \hat{L} era cualquier dirección valía)Así $\hat{L} = \text{cte de mov}$

$$\text{Además } [\hat{H}, \hat{L}^2] = [\hat{H}, \hat{L}] \hat{L} - \hat{L} [\hat{L}, \hat{H}] = 0$$

Por otro lado, la partícula tiene spin, lo cual es un agregado al formalismo de Schrödinger pues no interactúa mediante el Hamiltoniano con el spin

$$\Rightarrow [\hat{H}, \hat{S}] = 0$$

$$[\hat{H}, \hat{S}^2] = 0$$

Y por supuesto $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$

$$\Rightarrow \text{ctes de mov} = \{\hat{H}, \hat{L}, \hat{L}^2, \hat{S}, \hat{S}^2\}$$



Para armar el CCOC, voy a quedarme con una dirección de $\hat{C}_y \hat{S}$

$$\Rightarrow \text{CCOC potencial: } \{\hat{H}, \hat{C}^z, \hat{L}_z, \hat{S}^z, \hat{S}_z\}$$

Bastaría ver condiciones

Como \hat{S} y \hat{L} viven en diferentes espacios

$$[\hat{C}^z, \hat{S}^z] = 0$$
$$[\hat{L}_z, \hat{S}^z] = 0$$
$$[\hat{L}_z, \hat{S}_z] = 0$$
$$[\hat{C}^z, \hat{S}_z] = 0$$

Basta ver que $[\hat{C}^z, \hat{L}_z] = 0$ y $[\hat{S}^z, \hat{S}_z] = 0$ pues cumple lo mismo que en impulso angular

$$[\hat{C}^z, \hat{L}_z] = [\hat{L}_x^z, \hat{L}_z] + [\hat{L}_y^z, \hat{L}_z] + \underbrace{[\hat{L}_z^z, \hat{L}_z]}_{=0}$$
$$= \hat{L}_x^z \hat{L}_x^z \hat{L}_z - \hat{L}_z^z \hat{L}_x^z \hat{L}_x + \hat{L}_y^z \hat{L}_y^z \hat{L}_z - \hat{L}_z^z \hat{L}_y^z \hat{L}_y$$

usando $[\hat{L}_i^z, \hat{L}_j^z] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k$

$$\Rightarrow \hat{L}_x^z \hat{L}_x^z \hat{L}_z = \hat{L}_x^z \hat{L}_z \hat{L}_x - i\hbar \hat{L}_x^z \hat{L}_y \hat{L}_y \quad \hat{L}_z^z \hat{L}_x^z \hat{L}_x = \hat{L}_x^z \hat{L}_z \hat{L}_x + i\hbar \hat{L}_y^z \hat{L}_x^z \hat{L}_x$$
$$\hat{L}_y^z \hat{L}_y^z \hat{L}_z = \hat{L}_y^z \hat{L}_z \hat{L}_y + i\hbar \hat{L}_z^z \hat{L}_y^z \hat{L}_y \quad \hat{L}_z^z \hat{L}_y^z \hat{L}_y = \hat{L}_y^z \hat{L}_z \hat{L}_y - i\hbar \hat{L}_x^z \hat{L}_y^z \hat{L}_y$$

Reemplazando $[\hat{C}^z, \hat{L}_z] = 0 \Rightarrow [\hat{S}^z, \hat{S}_z] = 0$

∴

$$\boxed{\text{CCOC} = \{\hat{H}, \hat{C}^z, \hat{L}_z, \hat{S}^z, \hat{S}_z\}}$$

b) Planteamos así

$$\psi = \varphi e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\mathcal{H}\varphi = E\varphi \quad (\text{Schrödinger estacionario})$$

$$\begin{cases} \hat{L}^2\varphi = \hbar^2(l+1)l\varphi & l \geq 0 \\ \hat{L}_z\varphi = m\hbar\varphi & -l \leq m \leq l \quad \Delta m = 1 \\ \hat{S}^z\varphi = \hbar(s\varphi) & s \geq 0 \\ \hat{S}_z\varphi = m_s\hbar\varphi & -s \leq m_s \leq s \quad \Delta m = 1 \end{cases}$$

l = nro cuántico orbital
 m = nro cuántico magnético

De ① obtengo dos ecuaciones donde $\hat{L}^2 = -\hbar^2 r^2 \nabla^2 \varphi$ y $\hat{L}_z = i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta}$

es decir dos ecuaciones donde solo operan los angulos. La resolución de esta ecuación solo angular me separa la función de onda espacial en una radial y otra angular. Cuya solución son (o armónicos) estéticos $R_{lm}(r, \theta, \varphi)$

De ② ya dijimos que las partículas no interactúan con spin mediante \hat{H}_1 , lo cual también termina en una función de onda de spin $G_{S,MS}$ separable de la espacial.

Por último $\hat{H}\psi = E\psi$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r)$$

$$\Leftrightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{\text{esp}}^2 + V(r) \right] \psi = E\psi$$

De lo anterior dijimos $\psi_{l,m,s,ms} = R(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) G_{S,MS}$

y recordando $L^2 = -\hbar^2 r^2 \nabla_{\text{esp}}^2 \psi \Rightarrow \nabla_{\text{esp}}^2 \psi = -\frac{L^2}{\hbar^2 r^2}$

Introduciendo todo

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) G_{S,MS} = E R(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) G_{S,MS}$$

aplico

no opera en \hat{H}

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R(r) = E R(r)$$

Hasta ahora tengo $\psi_{l,m,s,ms} = R(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) G_{S,MS}$

osea una función de onda separada en una radial $R(r)$ dependiente de E y l .

Los armónicos esféricos $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ dependiendo de l, m más cuánticos.

$G_{S,MS}$ función de spin dependiente de s, ms .

mi ecuación principal a resolver puede reescribirse con $R(r) = \frac{U(r)}{r}$

$$\Rightarrow \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m(E-V(r))}{\hbar^2} \right] U(r) = 0$$

a partir de aquí se podrían analizar soluciones cuánticas, estando no es lo propuesto.

Pero V está partido, es decir

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r \leq a \\ V_0 & a < r < b \\ 0 & r \geq b \end{cases} \Rightarrow R(r) = \begin{cases} R_I(r) & r \leq a \\ R_{II}(r) & a < r < b \\ R_{III}(r) & b < r \end{cases}$$

$$\Rightarrow I, III) \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \right] u_{I, II}(r) = 0 \quad \left. \right\} (3)$$

$$II) \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2} \right] u_{III}(r) = 0$$

Debido a esto (pediremos varios contornos) \Rightarrow

$$R_I(a) = R_{II}(a)$$

$$\frac{dR_I(a)}{dr} = \frac{dR_{II}(a)}{dr}$$

$$R_{II}(b) = R_{III}(b)$$

$$\frac{dR_{III}(b)}{dr} = \frac{dR_{II}(b)}{dr}$$

Por supuesto, normalización

$$\int R(r) R(r) r^2 dr = 1$$

$$\int Y_l^* Y_l d\Omega = 1$$

$$\int Y_{l,m}^* Y_{l,m} d\Omega = 1$$

$$\int G_{ms}^* G_{ms} dm = 1$$

Y además de Ψ continua, pediremos

$$\Psi(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$$

$$\Rightarrow R(r \rightarrow \infty) \rightarrow 0$$

$$\Psi(r \rightarrow 0) \neq 0$$

$$\Rightarrow R(r \rightarrow 0) \neq 0$$

Micromos (3). Si $l=0 \Rightarrow$ resuelvo el problema de barrera de potencial en 1-D,

donde tendré un número cuántico n para E , ψ se resolverá como antes
principal

Pero si $l \neq 0$, lo tengo acoplado a la ecuación como un $V_{eff} = V(r) - \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mr^2}$

Ahora \therefore mis energías dependerán de l y la solución $R(r)$ también.

Esto me trae una degeneración en las autofunciones esencial debido a la simetría esférica, pues para cada valor de l , tendré $(2l+1)$ valores de m que no afectarán mi valor de energía.

Además, lo mismo me ocurrirá con los m_s debido a S , me darán otra degeneración adicional que dependerá de s . En clase resolvimos $s=\frac{1}{2} \Rightarrow m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ y nos multiplicó en dos las degeneraciones. $(2s+1)$

En resumen: $E_{nl}, R_{nl}(r)$ $(2l+1)$ degeneraciones por simetría esférica
y algún valor extra debido al spin.

$$\Psi_{nlms} = R_{nl}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) G_{s,m} \xrightarrow{\text{FORMA DE AUTOFUNCIONES}}$$

c) Si aparece un $\underline{B} = B_0 \hat{z}$ cte, uniforme y fuerte, se produce un efecto Zeeman anómalo. Como el campo me da una dirección privilegiada y es lo suficientemente fuerte para alinear los impulso \Rightarrow me agrega un término al Hamiltoniano

$$\text{Si antes tenía } \mathcal{H} = \mathcal{H}_0$$

$$\text{ahora tendrá } \mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$$

Donde $\mathcal{H}_1 = -\mu_- \cdot \underline{B}$. Recordemos μ_- asociada a impulso complejo

$$\mu_L = -g_S \frac{\mu_B}{\hbar} L \quad g_S = 1 \quad \mu_B = \text{magnetón de Bohr}$$

$$\mu_S = -g_S \frac{\mu_B}{\hbar} S \quad g_S = 2$$

$$\Rightarrow \mathcal{H}_1 = \frac{\mu_B}{\hbar} (L_z + 2S_z) B_0 \hat{z} = \frac{\mu_B}{\hbar} (L_z + 2S_z) B_0$$

$$\text{Ahora tendrá mi nuevo } \boxed{\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \frac{\mu_B}{\hbar} (L_z + 2S_z) B_0}$$



Es decir que ahora:

$$\mathcal{H}\Psi = \left(\mathcal{H}_0 + \frac{\mu_B}{\hbar} (L_z + 2S_z) B_0 \right) \Psi = \underbrace{\left[E_0 + \frac{\mu_B}{\hbar} (m_L + 2m_S) B_0 \right]}_E \Psi$$

EN CUANTO A LOS NIVELES DE ENERGÍA \star

Pierdo la simetría estérica puer el campo me dio una dirección privilegiada.

Ahora pierdo mis degeneraciones $(2l+1)$ puer m se acopla a mis energías.

Además, también se acopla m_S y podríamos decir que $m' = m + 2m_S$ será un nuevo nro cuántico al qual habría que analizar sus valores posibles.

No se si importa mencionar, pero el CCOC se mantiene igual.

Sí importa !! Si no, no podrás calcular \star

Ejercicio 4

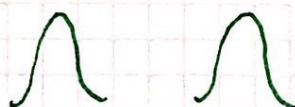
Dos partículas son idénticas si tienen las mismas propiedades fundamentales (carga, masa, spin)

Lo que ocurre es que si tengo un sistema de partículas idénticas y las intercambio, el sistema físico será el mismo y evolucionara igual.

⇒ Simetría de intercambio!

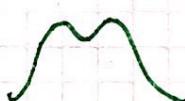
Clásicamente: Etiqueto las partículas y las puedo seguir.

Cuánticamente: Pierde el sentido pues las partículas tienen funciones de onda asociadas. ¿Qué quiere decir? Supongamos por ejemplo dos electrones LEJOS UNO DEL OTRO



Puedo identificar las funciones de onda y las puedo diferenciar.

CERCANOS



La función de onda empieza a interactuar, pierde identidad. Podrían repelerse o seguir de largo. Pierde la definición de un estado final.

Hablamos de la simetría de intercambio. Es decir que el Hamiltoniano de un sistema de partículas idénticas será invariante ante este tipo de transformaciones

$$\hat{H}(1,2) = \hat{H}(2,1) \quad \text{Sea } \hat{P}(1,2) \text{ operador permutación } \hat{P}f_{(1,2)} = f_{(2,1)}$$

$$\Rightarrow \hat{P}(1,2) \hat{H}(1,2) \psi_{(1,2)} = \hat{H}(2,1) \psi_{(2,1)} = \hat{H}(1,2) \hat{P}(1,2) \psi_{(1,2)}$$

$$\Rightarrow [\hat{H}, \hat{P}] = 0 \quad \text{comparten autofunciones, no importa el orden de aplicación}$$

$$\text{Si } \hat{P}(1,2) \psi_{(1,2)} = \lambda \psi_{(1,2)} = \psi_{(2,1)} \quad \xrightarrow{\begin{aligned} |\psi_{(1,2)}| &= |\psi_{(2,1)}| \\ \Rightarrow |\lambda| &= 1 \end{aligned}}$$

$$\Rightarrow \hat{P}(1,2) \hat{P}(1,2) \psi_{(1,2)} = \hat{P}(1,2) \lambda \psi_{(1,2)} = \lambda^2 \psi_{(1,2)} = \psi_{(1,2)}$$

$$\Rightarrow \lambda^2 = \pm 1 \quad \text{Luego } \psi_{(1,2)} = \begin{cases} \psi_{(2,1)} & \text{simétrica} \\ -\psi_{(2,1)} & \text{antisimétrica} \end{cases}$$

Distinguimos así dos tipos de partículas

$$\psi \left\{ \begin{array}{l} \psi_s \text{ simétrica} \Rightarrow \text{bosones} \\ \psi_a \text{ antisimétrica} \Rightarrow \text{fermiones} \end{array} \right. \begin{array}{l} \text{spin} = k \in \mathbb{Z} \\ \text{spin} = \frac{2k+1}{2} \in \mathbb{Z} \end{array}$$

Siguiendo lo de antes

$$\left. \begin{array}{l} \mathcal{H}(1,2)\psi_{(1,2)} = E_{(1,2)}\psi_{(1,2)} \\ \mathcal{H}(1,2)\psi_{(2,1)} = E_{(1,2)}\psi_{(2,1)} \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{degeneración} \\ \text{de intercambio.} \end{array}$$

Para armar $\psi_{s,a}$

Supongo $\psi_{(1,2)} = \psi_{\mu(1)}\psi_{\mu(2)}$ μ, ν cijo de números cuánticos de cada caso

$$\Rightarrow \text{defino } \psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{\mu(1)}\psi_{\mu(2)} + \psi_{\nu(1)}\psi_{\nu(2)}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{\mu\nu} + \psi_{\nu\mu})$$

$$\text{Si tomo } \psi_s^* \cdot \psi_s = \frac{1}{2} \left[\underbrace{(\psi_{\mu\nu}^*\psi_{\mu\nu} + \psi_{\nu\mu}^*\psi_{\nu\mu})}_{\text{SUMA DE DENSIDAD}} \pm (\psi_{\mu\nu}^*\psi_{\nu\mu} + \psi_{\nu\mu}^*\psi_{\mu\nu}) \right] \underbrace{\pm}_{\text{INTERFERENCIA, PIERDE IDENTIDAD}}$$

$$\text{Luego } \psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{\mu(1)} & \psi_{\mu(2)} \\ \psi_{\nu(1)} & \psi_{\nu(2)} \end{vmatrix}_+ \quad (\det \text{ positivo})$$

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_{\mu(1)} & \psi_{\mu(2)} \\ \psi_{\nu(1)} & \psi_{\nu(2)} \end{vmatrix}_- \quad (\text{determinante})$$

ψ para caño mayor

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_1(2) & \dots & \psi_1(N) \\ \psi_2(1) & \psi_2(2) & \dots & \psi_2(N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_N(1) & \psi_N(2) & \dots & \psi_N(N) \end{vmatrix} + (S) - (A)$$

Si son partículas independientes

independientes

✓