

Tarea 3

Entrega: 31 de octubre de 2023

Problema 1: Estructura hiperfina

Primero, explica el origen físico de la estructura hiperfina. Explica por qué se espera que el efecto de la estructura hiperfina sea del orden de $\frac{m}{M_p}$ menor que el de la estructura fina. Aquí m es la masa del electrón y M_p la del protón.

Ahora, recuerda que en clase se demostró que la corrección de primer orden de la energía debida a la estructura hiperfina está dada por

$$\Delta E = \frac{C}{2} [F(F+1) - I(I+1) - j(j+1)]$$

en donde

$$C = \frac{\mu_0}{4\pi} 4g_I \mu_B \mu_N \frac{1}{j(j+1)(2\ell+1)} \left(\frac{Z}{a_\mu n} \right)^3.$$

- (a) (Valor: 1pt) - Utilizando este resultado demuestra que en un **mismo** multiplete hiperfino, la separación entre dos niveles hiperfinos **subsecuentes** está dada por

$$\Delta E(F) - \Delta E(F-1) = CF.$$

Notemos que esta separación, conocida como *separación hiperfina*, es proporcional a F . Esta propiedad es un ejemplo de los que se conoce como *regla del intervalo*.

Solución

En estructura fina considerábamos al núcleo como algo puntual que generaba un campo de Coulomb electrostático. Sin embargo, hay más desdoblamientos adicionales en la estructura de niveles de Dirac mucho menores a la estructura fina. Es decir, el núcleo ya no es una partícula puntual, sino una distribución de carga.

¿Pero por qué el efecto de la estructura hiperfina es menor al de la estructura fina? Esto se debe a que en la estructura hiperfina se introduce el magnetón magnético μ_N , el cual está dado como:

$$\mu_N = \frac{m}{M_p} \mu_B.$$

Por lo tanto, el efecto de la estructura hiperfina es del orden de $\frac{m}{M_p}$ menor que el de la estructura fina, ya que $\mu_N \ll \mu_B$ debido a que la masa del protón es 2000 veces mayor a la del electrón.

Queremos demostrar que

$$\Delta E(F) - \Delta E(F - 1) = CF.$$

Entonces,

$$\begin{aligned}\Delta E(F) - \Delta E(F - 1) &= \frac{C}{2} [F(F + 1) - I(I + 1) - j(j + 1) - (F - 1)(F - 1 + 1) + I(I + 1) + j(j + 1)], \\ &= \frac{C}{2} [F(F + 1 - F + 1)],\end{aligned}$$

$$\Delta E(F) - \Delta E(F - 1) = CF.$$

- (b) (Valor: 1pt) - En un **mismo** multiplete hiperfino, las componentes hiperfinas más separadas tienen como valores del número cuántico a F a $F_{\text{máx}} = I + j$ y $F_{\text{mín}} = |I - j|$. Demuestre que la separación entre estos dos niveles hiperfinos está dada por

$$\delta E \equiv \Delta E(F_{\text{máx}}) - \Delta E(F_{\text{mín}}) = 2C \times \begin{cases} j(I + \frac{1}{2}) & \text{si } j \leq I \\ I(j + \frac{1}{2}) & \text{si } j \geq I \end{cases}$$

Solución

Por un lado, para $j \leq I$,

$$\begin{aligned}\delta E &= \Delta E(F_{\text{max}}) - \Delta E(F_{\text{min}}), \\ &= \frac{C}{2} \{[(I + j)(I + j + 1) - I(I + 1) - j(j + 1)] - [(I - j)(I - j + 1) - I(I + 1) - j(j + 1)]\}, \\ &= \frac{C}{2} \{4Ij + 2j\},\end{aligned}$$

$$\delta E = 2Cj(I + \frac{1}{2}). \quad j \leq I$$

Por el otro, para $j \geq I \implies I - j \leq 0$. Así,

$$\begin{aligned}\delta E &= \frac{C}{2} \{[(I + j)(I + j + 1) - I(I + 1) - j(j + 1)] - [-(I - j)(j - I + 1) - I(I + 1) - j(j + 1)]\}, \\ &= \frac{C}{2} \{(I + j)(I + j + 1) + (I - j)(j - I + 1)\}, \\ &= \frac{C}{2} \{4Ij + 2I\},\end{aligned}$$

$$\delta E = 2CI(j + \frac{1}{2}). \quad j \geq I$$

Por lo tanto,

$$\delta E = 2C \times \begin{cases} j(I + \frac{1}{2}) & \text{si } j \leq I \\ I(j + \frac{1}{2}) & \text{si } j \geq I \end{cases}$$

- (c) (Valor: 1pt) - Considera ahora el caso del átomo de hidrógeno, es decir, el caso en el que el núcleo que interactúa con el electrón está compuesto apenas por un protón. El número cuántico de spin del protón es $I = \frac{1}{2}$. En este caso, el estado fundamental del sistema, el nivel $1s_{1/2}$ se divide en dos estados hiperfinos con $F = 0$ y $F = 1$. Demuestra que la separación entre estos dos estados hiperfinos es

$$\delta E = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{16g_I\mu_B\mu_N}{3a_0^3}.$$

Solución

Sabemos que $F = \frac{1}{2} + j, \frac{1}{2} - j$. Por lo que, $j = \frac{1}{2}$ y usando cualquiera de los resultados obtenidos en el inciso anterior, tenemos que

$$\begin{aligned} \delta E &= 2C \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right) \right], \\ &= 2C \left(\frac{1}{2} \right), \end{aligned}$$

$$\delta E = C.$$

Recordando la expresión para C ,

$$C = \frac{\mu_0}{4\pi} 4g_I\mu_B\mu_N \frac{1}{j(j+1)(2\ell+1)} \left(\frac{Z}{a_\mu n} \right)^3.$$

Sustituyendo los valores correspondientes,

$$C = \frac{\mu_0}{4\pi} 4g_I\mu_B\mu_N \frac{1}{\frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) (2(0) + 1)} \left(\frac{1}{a_\mu(1)} \right)^3,$$

$$C = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{16g_I\mu_B\mu_N}{3a_\mu^3}.$$

- (d) (Valor: 0.5pt) - Calcula la diferencia de energía (en unidades de eV) del desdoblamiento hiperfino del estado fundamental del átomo de hidrógeno (para el protón $g_I \simeq 5.588$), ¿cuál es la frecuencia ν (en MHz) y la longitud de onda λ (en cm) de la transición entre estos niveles?

- (e) (Valor: 0.5pt) - El núcleo del átomo de deuterio está compuesto por un protón y un neutrón. Para este núcleo $I = 1$ y $g_I \simeq 0.857$. Calcula el cociente entre los desdoblamientos hiperfinos del estado fundamental de los átomos de hidrógeno y deuterio.
-

Problema 2: Igualdad con operadores de spin (2 pt)

En clase se utilizó, sin demostrar, la siguiente expresión para una partícula con número cuántico de spin $s = \frac{1}{2}$,

$$\hat{S}^2 - 3 \frac{(\hat{S} \cdot \vec{r})^2}{r^2} = 0.$$

Demuéstrala.

Problema 3: Efecto Stark

Cuando un átomo se encuentra en presencia de un campo eléctrico constante \vec{E}_s los niveles de energía se desplazan, un fenómeno conocido como “**Efecto Stark**”. En este problema analizamos únicamente el efecto Stark en los estados $n = 1$ y $n = 2$ del átomo de hidrógeno. Supongamos que el campo eléctrico apunta en la dirección z , de manera que la energía potencial del electrón es

$$\hat{W}_S = -eE_s z = eE_s r \cos \theta.$$

Considera que \hat{W}_S es una perturbación sobre el átomo de hidrógeno de Bohr (es decir, no es necesario que consideres la estructura fina e hiperfina). También puedes ignorar al spin del electrón en este problema.

(a) (Valor: 1pt) - Demuestra que, a primer orden, esta perturbación no altera al estado fundamental.

Solución

Sabemos que el estado base es no-degenerado, pues $n = 1$,

$$0 \leq \ell < 1 \implies \ell = 0 \implies m = 0.$$

Recordando que la corrección a primer orden para la energía del estado base está dada como

$$\begin{aligned} E_0^{(1)} &= \langle 100 | \hat{W}_S | 100 \rangle, \\ &= \langle 100 | -eE_s r \cos \theta | 100 \rangle, \\ E_0^{(1)} &= -eE_s \langle 100 | r \cos \theta | 100 \rangle, \end{aligned}$$

donde $|100\rangle = \psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_\mu^3}} e^{-r/a_\mu}$.

Así,

$$\begin{aligned} E_0^{(1)} &= -eE_s \int \left(\frac{1}{\sqrt{\pi a_\mu^3}} e^{-r/a_\mu} \right) (r \cos \theta) \left(\frac{1}{\sqrt{\pi a_\mu^3}} e^{-r/a_\mu} \right) r^2 \sin \theta \, dr \, d\theta \, d\phi, \\ &= \frac{-eE_s}{\pi a_\mu^3} \int_0^\infty r^3 e^{-2r/a_\mu} \, dr \int_0^\pi \cos \theta \sin \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi. \end{aligned}$$

Por lo que la perturbación a primer orden no altera al estado fundamental, *i.e.*,

$$E_0^{(1)} = 0.$$

- (b) (Valor: 3pt) - El primer estado excitado presenta degeneración cuádruple: ψ_{200} , ψ_{211} , ψ_{210} y ψ_{21-1} . Usando teoría de perturbaciones para el caso degenerado, determina la corrección de la energía a primer orden. ¿En cuántos niveles se desdobra la energía E_2 ?

Solución

Por teoría de perturbaciones par ael caso degenerado sabemos que

$$W_{ij} = \langle \psi_i^{(0)} | \hat{W} | \psi_j^{(0)} \rangle.$$

Entonces,

$$\hat{W} = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} & W_{13} & W_{14} \\ W_{21} & W_{22} & W_{23} & W_{24} \\ W_{31} & W_{32} & W_{33} & W_{34} \\ W_{41} & W_{42} & W_{43} & W_{44} \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

Y para simplificar la notación consideramos lo siguiente:

$$|1\rangle = |200\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi a_\mu}} \frac{1}{2a_\mu} \left(1 - \frac{r}{2a_\mu}\right) e^{-r/2a_\mu},$$

$$|2\rangle = |210\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi a_\mu}} \frac{1}{4a_\mu} r e^{-r/2a_\mu} \cos \theta,$$

$$|3\rangle = |211\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi a_\mu}} \frac{1}{8a_\mu^2} r e^{-r/2a_\mu} \sin \theta e^{i\phi},$$

$$|4\rangle = |21-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi a_\mu}} \frac{1}{8a_\mu^2} r e^{-r/2a_\mu} \sin \theta e^{-i\phi}.$$

Calculando cada uno de los elementos de matriz de (3.1) donde únicamente consideramos la parte angular para determinar si el elemento de matriz se anula o no; tal que

$$\langle 1|W|1\rangle = \int (\dots) \int_0^\pi \cos \theta \sin \theta d\theta = 0,$$

$$\langle 1|W|3\rangle = \langle 1|W|4\rangle = \langle 3|W|1\rangle = \langle 4|W|1\rangle = \int (\dots) \int_0^\pi \cos \theta \sin^2 \theta d\theta = 0,$$

$$\langle 2|W|2\rangle = \int (\dots) \int_0^\pi \cos^3 \theta \sin \theta d\theta = 0,$$

$$\langle 2|W|3\rangle = \langle 4|W|2\rangle = \int (\dots) \int_0^{2\pi} e^{i\phi} d\phi = 0,$$

$$\langle 2|W|4\rangle = \langle 3|W|2\rangle = \int (\dots) \int_0^{2\pi} e^{-i\phi} d\phi = 0,$$

$$\langle 3|W|3\rangle = \langle 4|W|4\rangle = \langle 3|W|4\rangle = \langle 4|W|3\rangle = \int (\dots) \int_0^\pi \cos \theta \sin^3 \theta d\theta = 0,$$

$$\langle 1|W|2\rangle = \langle 2|W|1\rangle \neq 0.$$

Notamos que únicamente dos elementos de matriz son diferentes de cero, por lo que (3.1) queda como; recordando el orden de la base es $|200\rangle, |210\rangle, |211\rangle, |21-1\rangle$.

$$\hat{W} = \begin{pmatrix} 0 & \langle 1|W|2\rangle & 0 & 0 \\ \langle 2|W|1\rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Dividiendo en cuadrantes,

$$\hat{W} = \begin{pmatrix} 0 & \langle 1|W|2\rangle & \vdots & 0 & 0 \\ \langle 2|W|1\rangle & 0 & \vdots & 0 & 0 \\ 0 & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \vdots & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Entonces la matriz asociada a la perturbación es

$$\hat{W} = \begin{pmatrix} 0 & \langle 1|W|2\rangle \\ \langle 2|W|1\rangle & 0 \end{pmatrix}.$$

Calculamos ahora los elementos de matriz notando que $\langle 1|W|2\rangle = \langle 2|W|1\rangle^*$. Así,

$$\begin{aligned}\langle 1|W|2\rangle &= \frac{1}{2\pi a_\mu} \frac{-eE_S}{8a_\mu^3} \int_0^\infty \left(1 - \frac{r}{2a_\mu}\right) r^4 e^{-r/a_\mu} dr \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi, \\ &= 3a_\mu E_S e,\end{aligned}\tag{3.2}$$

$$\boxed{\langle 1|W|2\rangle = 3a_\mu E_S e.}\tag{3.3}$$

Sustituyendo (3.3) en solución 5,

$$\hat{W} = 3a_\mu E_S e \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Notemos que la matriz anterior tiene la forma de σ_x , cuyos eigenvalores conocemos, *i.e.*, ± 1 y sus eigenkets correspondientes son

$$|\psi_+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad y \quad |\psi_-\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}.\tag{3.4}$$

Por lo que las correcciones a primer orden de las energía son

$$\boxed{E_\pm^{(1)} = \pm 3a_\mu E_S e.}$$

Y de (3.4), la nueva base está dada por

$$\begin{aligned}\psi_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle), \\ \psi_- &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle).\end{aligned}$$

¿En cuántos niveles se desdobra la energía E_2 ? Se desdobra en 3 niveles.

$$\psi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle) \text{ con energía } E_2 \simeq E_0^{(1)} + 3a_\mu E_S e,$$

$$\psi_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle) \text{ con energía } E_2 \simeq E_0^{(1)} - 3a_\mu E_S e,$$

$$|3\rangle = |4\rangle \text{ con energía imperturbada.}$$

- (c) Inciso extra (+2.5pt) - ¿Cuál es la mejor base para realizar el cálculo del inciso (b)? Encuentra el valor esperado del operador de momento dipolar eléctrico ($\vec{\mathcal{P}} = -e\vec{r}$) para cada uno de los miembros de dicha base que son pertinentes para este problema.

Pista: La “mejor base” es justamente aquella que diagonaliza a la matriz \hat{W}_S .

Solución

Calculamos únicamente el valor esperado de $\vec{\mathcal{P}}$ para ψ_+ y ψ_- , ya que para $|2, 1, m = \pm 1\rangle$ es 0.

Así,

$$\langle \psi_{\pm} | \vec{\mathcal{P}} | \psi_{\pm} \rangle = \int \left[\frac{1}{2} \left(\frac{e^{-r/2a_{\mu}}}{2\pi a_{\mu}} \right) \left\{ \left(1 - \frac{r}{2a_{\mu}} \right) \pm \frac{1}{4a_{\mu}^2} r \cos \theta \right\} \right]^2 (-er)(\sin \theta \cos \phi \hat{\mathbf{i}} + \sin \theta \sin \phi \hat{\mathbf{j}} + \cos \theta \hat{\mathbf{k}}) r^2 \sin \theta \, d\phi \, d\theta \, dr$$

Calculamos la integral para ϕ , de la cual únicamente sobrevive aquella en la dirección $\hat{\mathbf{k}}$

$$\begin{aligned} \langle \psi_{\pm} | \vec{\mathcal{P}} | \psi_{\pm} \rangle &= \mp \frac{e\hat{\mathbf{k}}}{2a_{\mu}} \left(\frac{2}{3} \right) \int_0^{\infty} \frac{1}{8a_{\mu}^3} \left(1 - \frac{r}{2a_{\mu}} \right) r^4 e^{-r/a_{\mu}} \, dr, \\ &= \mp \frac{e\hat{\mathbf{k}}}{2a_{\mu}} \left(\frac{2}{3} \right) \left(\frac{2}{8a_{\mu}^3} \right) (-36a_{\mu}^5), \end{aligned}$$

$$\boxed{\langle \psi_{\pm} | \vec{\mathcal{P}} | \psi_{\pm} \rangle = \pm 3a_{\mu} e\hat{\mathbf{k}}.}$$