Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Facultad de Ciencias

Apuntes de clase MCII

Se abordara diferentes apuntes tomados en mecánica cuántica II y su utilidad en física atómica

Contribuciones:
Ronaldo Navarro Ambriz

enero 2022

Contents

1 Repaso general

£Cuál es el significado físico de la función de onda?
Podemos pensarlo como el de una partícula que se esparce en el espacio en función de la posición a un tiempo dado
£Cómo se calcula la probabilidad de encontrar a una partícula en alguna posición?
Para saber la probabilidad de encontrar una partícula en una posición comprendida entre un intervalo a, b(una dimensión) podemos usar:

$$\int_a^b |\Psi(x,t)|^2 dx = \ Prob. \tag{1.1}$$

£Tiene algún significado la fase de la función de onda, o está relacionada con algo?
Esta relacionada con la probabilidad de encontrar a la partícula especialmente i.e. teniendo una función de onda arbitraria como $\Psi = a_1\phi_1 + a_2\phi_2$ el hecho de obtener $|\Psi|^2$ nos dará un factor $C\exp(\delta\theta)$ Si tengo una función de onda arbitraria (no necesariamente una función propia) £cómo calculo el momento de la partícula, y su energía?
Podemos ver que para momento tenemos y energía:

$$\langle H \rangle = E = \int_{\infty}^{\infty} \psi^*(\hat{T} + \hat{V})\psi dx \tag{1.2}$$

donde $\hat{T}$ es $\hat{p}^2/2m$ y el potencial es dado, mientras que el momento se puede obtener de $p = \frac{h}{\lambda}$ donde nos basta encontrar con el vector de onda y encontrar dicho k para nuestro problema.
£Cuales son los valores "permitidos" al hacer una medición de momento o energía?
Ya teniendo condiciones de frontera y condiciones iniciales operamos para obtener los valores "permitidos" dados por nuestra función de onda.
£Cómo calculo la probabilidad de medir un cierto momento o una cierta energía al hacer la medición? Noten que esta es una pregunta diferente a dos preguntas arriba.

£A qué se debe el principio de incertidumbre, cual es su origen?
Que si se tiene una pareja de observables incompatibles i.e. que su conmutador no es 0, existe una incertidumbre entre dichas variables, son donde para x y p son vistas en la relación de conmutación canónica $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ en general

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle\left[\hat{A}, \hat{B}\right]\rangle\right)^2 \tag{1.3}$$

£Es la luz una onda o una partícula? y la misma pregunta para un electrón. En ambos casos den experimentos que den evidencia en favor de lo que hayan puesto de respuesta.
Tanto la luz(fotones) como los electrones tienen una dualidad onda-partícula demostrados por un patrón de interferencia en el experimento de la doble rendija, pero guiándonos por las fechas la dualidad del electrón fue demostrada hasta 1927 por Davisson y Germer, mientras que se observo el comportamiento en la luz(fotones) por Young en 1801, mientras que también se observo este comportamiento de interferencia en el uso de la interferometría de Mach-Zehnder desarrollada en 1892.
£Cómo se determina experimentalmente un valor esperado?
Suponqo que en la construcción de una función que nos de la probabilidad de densidad respecto a la variable a medir o realizar muchas mediciones(para dar con el valor esperado por la ley de los números grandes) así construyendo un histograma y observar cual es nuestro valor esperado.
£Cómo calculo las fluctuaciones esperadas en una medición?
?
£Qué diferencia hay entre una onda plana y un paquete de ondas y cuando aplica cada uno de ellos?
Inconcluso.
£Cuál es la relevancia de los valores propios y los estados propios?
Son los estados permitidos por el sistema.
Repasen la solución de la partícula libre, la partícula en un pozo cuadrado y la partícula en un potencial de oscilador armónico. De ser posible resuelva el problema de la partícula libre en el espacio de posición y en

el de momentos.
las soluciones para una partícula en un pozo cuadrado de longitud a

$$\Psi(x,t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\frac{n\pi}{a}x) \exp(\frac{-itn^2\pi^2\hbar}{2ma^2} \tag{1.4}$$

para encontrar c_n se aplican series de Fourier
las soluciones para la partícula en un potencial de oscilador armónico $\frac{1}{2}kx^2$ podemos darla de 2 maneras, por medio de función Hermite u operadores escalera, para operadores escalera:

$$\psi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp(\frac{-m\omega x^2}{2\hbar}) \tag{1.5}$$

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_+)^n \psi_0 \tag{1.6}$$

con

$$\hat{a}_\pm \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar m\omega}}(\mp i\hat{p} + m\omega x) \tag{1.7}$$

para una partícula libre

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\infty}^{\infty} \phi(k) \exp(i(kx - \frac{\hbar k^2 t}{2m}))dk \tag{1.8}$$

donde para $\phi(k)$ está dado para una condición inicial:

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\infty}^{\infty} \Psi(x,0) \exp(-ikx)dx \tag{1.9}$$

y ya teniendo $Psi(x,t)$ podemos pasar al espacio de momento:

$$\Phi(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\infty}^{\infty} \exp(\frac{-ipx}{\hbar})\Psi(x,t)dx \tag{1.10}$$

£Cómo paso de un espacio a otro?
Con una transformada de Fourier y una transformada inversa de Fourier dadas por el teorema de Plancherel

$$\Phi(p,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\infty}^{\infty} \exp(\frac{-ipx}{\hbar})\Psi(x,t)dx \tag{1.11}$$

y

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{\infty}^{\infty} \exp(\frac{ipx}{\hbar})\Phi(p,t)dp \tag{1.12}$$

£Puede una partícula en un pozo cuadrado tener una energía diferente a la de las energías propias del problema?
No, estas son energías definidas.
£Cual es la receta general para calcular la evolución temporal de una función de onda?
Separación de variables
Explique la diferencia entre el formalismo de Schrodinger y el de Heissenberg para resolver problemas de cuántica. El formalismo de Heisenberg toma los observadores como la representacion adjunta, siendo dependientes del tiempo siendo un ejemplo el conmutador que se obtiene para llegar a ecuaciones importantes como la ecuación de Gross Pitaevskii mientras que en la de Schrodinger no es así, la dependencia temporal se añade aparte del observador.

2 Momentos permitidos para el pozo cuadrado

Cuales son los momentos permitidos para una partícula en un pozo cuadrado? Suponemos que para el pozo cuadrado infinito tenemos el potencial dado como:

$$V(x) = \begin{cases} 0 \rightarrow x \text{ } esta \text{ } entre \text{ } 0 \text{ } y \text{ } a \\ \infty \rightarrow x \text{ } no \text{ } esta \text{ } entre \text{ } 0 \text{ } y \text{ } a \end{cases} \tag{2.1}$$

donde la solución aplicando las condiciones de fronteras dada por el potencial y la normalización:

$$\Psi_n(x,t) = c_n \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(\frac{n\pi}{a}x) \exp(\frac{-itn^2\pi^2\hbar}{2ma^2}) \tag{2.2}$$

y sea para la parte espacial:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \tag{2.3}$$

notese que para las eigenfunciones del momento k es negativo y positivo, donde tenemos que la ecuación de valores propios para el momento:

$$\hat{p}\psi_n(x) = p\psi_n \tag{2.4}$$

donde estando en el espacio de posición tenemos a $\hat{p}_x$ como $-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ pero también podemos facilitarnos nuestras operaciones si obtenemos $\hat{p}^2$, entonces

$$\hat{p}^2\psi(x)_n = p_n^2\psi_n \tag{2.5}$$

donde

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \tag{2.6}$$

donde al aplicar $\hat{p}^2\psi(x)_n = p_n^2\psi_n$ tenemos:

$$\hbar^2 \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) = \hbar^2 \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \psi_n \tag{2.7}$$

entonces

$$p_n = \pm\hbar\left(\frac{n\pi}{a}\right) \tag{2.8}$$

siendo lo mismo obtenido en con las relaciones del vector de onda y la longitud de onda de D'Broglie $p = \hbar k$

Operadores de momento angular en coordenadas esféricas

Recordemos que lo que definimos como momento angular es:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \tag{2.9}$$

donde para mecánica cuántica el momento lo podemos interpretar como un operador, siendo para espacio tridimensional en coordenadas cartesianas el momento en cada eje:

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \tag{2.10}$$

$$\hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \tag{2.11}$$

$$\hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} \tag{2.12}$$

y estos tomados como el vector en la expresión del momento angular$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ podemos reescribirlo como

$$\vec{L} = -i\hbar(\vec{r} \times \vec{\nabla}) \tag{2.13}$$

donde el gradiente en coordenadas esféricas es:

$$\vec{\nabla} = \hat{r}\frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta}\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\phi}\frac{1}{r\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial \phi} \tag{2.14}$$

y con $\vec{r} = r\hat{r}$ el momento angular es:

$$\vec{L} = -i\hbar\left[r\left(\hat{r} \times \hat{r}\right)\frac{\partial}{\partial r} + \left(\hat{r} \times \hat{\theta}\right)\frac{\partial}{\partial \theta} + \left(\hat{r} \times \hat{\phi}\right)\frac{1}{\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial \phi}\right] \tag{2.15}$$

con $(\hat{r} \times \hat{r}) = 0$, $\left(\hat{r} \times \hat{\theta}\right) = -phi$, $\left(\hat{r} \times \hat{\phi}\right) = -\theta$ entonces tenemos:

$$\vec{L} = -i\hbar\left[\hat{\phi}\frac{\partial}{\partial \theta} - \hat{\theta}\frac{1}{\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial \phi}\right] \tag{2.16}$$

donde podemos pasar de coordenadas esféricas a cartesianas:

$$\hat{\theta} = (\cos(\theta)\cos(\phi))\hat{\imath} + (\cos(\theta)\sin(\phi))\hat{\jmath} - (\sin(\theta))\hat{k} \tag{2.17}$$

$$\hat{\phi} = -(\sin(\phi))\hat{\imath} + (\cos(\phi))\hat{\jmath} \tag{2.18}$$

entonces:

$$\vec{L} = -i\hbar\left[(-(\sin(\phi))\hat{\imath} + (\cos(\phi))\hat{\jmath})\frac{\partial}{\partial \theta} - ((\cos(\theta)\cos(\phi))\hat{\imath} + (\cos(\theta)\sin(\phi))\hat{\jmath} - (\sin(\theta))\hat{k})\frac{1}{\sin(\theta)}\frac{\partial}{\partial \phi}\right] \tag{2.19}$$

entonces las componentes del momento angular en coordenadas esféricas es:

$$\hat{L}_x = -i\hbar\left(-\sin\phi\frac{\partial}{\partial \theta} - \cos\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial \phi}\right) \tag{2.20}$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar\left(\cos\phi\frac{\partial}{\partial \theta} - \sin\phi\cot\theta\frac{\partial}{\partial \phi}\right) \tag{2.21}$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \phi} \tag{2.22}$$

y para L^2 simplemente volvemos a aplicar nuestros operadores a si mismos y sumamos $L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ entonces

$$L_z^2 = -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \tag{2.23}$$

entonces L^2:

$$L^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial \phi^2}\right] \tag{2.24}$$

A estados n y n+1 corresponden energías n y n+1

Sabemos que para la energía debemos obtener el valor esperado del Hamiltoniano:

$$E_n = \langle H \rangle = \int \psi_n^* \hat{H} \psi_n dx \tag{2.25}$$

entonces en general tomemos los estados n y n+1 $\psi_n + \psi_{n+1}$ y obtengamos sus energías:

$$E = \int (\psi_n^* + \psi_{n+1}^*) \hat{H} (\psi_n + \psi_{n+1}) dx \tag{2.26}$$

siendo igual a:

$$E = \int (\psi_n^* + \psi_{n+1}^*)(\hat{H}\psi_n + \hat{H}\psi_{n+1}) dx \tag{2.27}$$

$$E = \int \psi_n^* \hat{H} \psi_n dx + \int \psi_n^* \hat{H} \psi_{n+1} dx + \int \psi_{n+1}^* \hat{H} \psi_n dx + \int \psi_{n+1}^* \hat{H} \psi_{n+1} dx \tag{2.28}$$

Donde sabemos de la ecuación de valores propios para ψ_n es $\hat{H}\psi_= E\psi_n$ entonces $\hat{H}\psi_n \propto \psi_n$ y sabiendo que estamos en una base ortogonal:

$$\int \psi_{n'}^* \psi_n dx = 0 \rightarrow \quad n' \neq n \tag{2.29}$$

Entonces descarnando los términos que dan 0, tenemos:

$$E = \int \psi_n^* \hat{H} \psi_n dx + \int \psi_{n+1}^* \hat{H} \psi_{n+1} dx = E_n + E_{n+1} \tag{2.30}$$

3 Demostración de conmutadores L y ecuación de armónicos esféricos

Sean los operadores $L_\pm$

$$\hat{L}_\pm = \hat{L}_x \pm i\hat{L}_y \tag{3.1}$$

Donde:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2. \tag{3.2}$$

Con $[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = 0$ para lo cual estos 2 operadores tiene eigenestados simultáneos:

$$\hat{L}^2 |X_\alpha, Y_\beta\rangle = X_\alpha |X_\alpha, Y_\beta\rangle \tag{3.3}$$

$$\hat{L}_z |X_\alpha, Y_\beta\rangle = Y_\beta |X_\alpha, Y_\beta\rangle \tag{3.4}$$

con $[\hat{L}^2, \hat{L}_\pm] = 0$ y $[\hat{L}_z, \hat{L}_\pm] = \pm\hbar \hat{L}_\pm$ para observar si crecen o decrecen al aplicarlos:

$$\hat{L}_\pm |X_\alpha, Y_\beta >= |X_\alpha, Y_\beta \pm \hbar > C_\pm(X_\alpha, Y_\beta), \tag{3.5}$$

Sea:

$$L_x = yp_z - zp_y \tag{3.6}$$

$$L_y = zp_x - xp_z \tag{3.7}$$

$$L_z = xp_y - yp_x \tag{3.8}$$

Sean los conmutadores para L_x

$$[L_x, L_x] = 0 \tag{3.9}$$

$$[L_x, L_y] = [yp_z - zp_y, zp_x - xp_z] = [yp_z, zp_x] - [yp_z, xp_z] - [zp_y, zp_x] + [zp_y, xp_z] \tag{3.10}$$

donde solo es incompatible x con p_x, y con p_y y z con p_z

$$[L_x, L_y] = yp_x[p_z, z] + xp_y[z, p_z] = i\hbar(xp_y - yp_x) = i\hbar L_z \tag{3.11}$$

$$[L_x, L_z] = [yp_z - zp_y, xp_y - yp_x] = [yp_z, xp_y] - [yp_z, yp_x] - [zp_y, xp_y] + [zp_y, yp_x] \tag{3.12}$$

donde solo es incompatible x con p_x, y con p_y y z con p_z

$$[L_x, L_z] = xp_z[y, p_y] + zp_x[p_y, y] = i\hbar(-zp_x + xp_z) = -i\hbar L_y \tag{3.13}$$

Sean los conmutadores para L_y

$$[L_y, L_x] = [zp_x - xp_z, yp_z - zp_y] = [zp_x, yp_z] - [xp_z, yp_z] - [zp_x, zp_y] + [xp_z, zp_y] \tag{3.14}$$

donde solo es incompatible x con p_x, y con p_y y z con p_z

$$[L_y, L_x] = yp_x[z, p_z] + xp_y[p_z, z] = i\hbar(-xp_y + yp_x) = -i\hbar L_z \tag{3.15}$$

$$[L_y, L_y] = 0 \tag{3.16}$$

$$[L_y, L_z] = [zp_x - xp_z, xp_y - yp_x] = [zp_x, xp_y] - [zp_x, yp_x] - [xp_z, xp_y] + [xp_z, yp_x] \tag{3.17}$$

donde solo es incompatible x con p_x, y con p_y y z con p_z

$$[L_y, L_z] = zp_y[p_x, x] + yp_z[x, p_x] = i\hbar(yp_z - zp_y) = i\hbar L_x \tag{3.18}$$

Sean los conmutadores para L_z

$$[L_z, L_x] = [xp_y - yp_x, yp_z - zp_y] = [xp_y, yp_z] - [yp_x, yp_z] - [xp_y, zp_y] + [yp_x, zp_y] \tag{3.19}$$

donde solo es incompatible x con p_x, y con p_y y z con p_z

$$[L_z, L_x] = xp_z[p_y, y] + zp_x[y, p_y] = i\hbar(zp_x - xp_z) = i\hbar L_y \tag{3.20}$$

$$[L_z, L_y] = [xp_y - yp_x, zp_x - xp_z] = [xp_y, zp_x,] - [yp_x, zp_x] - [xp_y, xp_z] + [yp_x, xp_z] \tag{3.21}$$

donde solo es incompatible x con p_x, y con p_y y z con p_z

$$[L_z, L_y] = zp_y[x, p_x] + yp_z[p_x, x] = i\hbar(-yp_z + zp_y) = -i\hbar L_x \tag{3.22}$$

$$[L_z, L_z] = 0 \tag{3.23}$$

Comutador L^2 con L_i

con la propiedad de conmutadores:

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \tag{3.24}$$

Sea $[L^2, L_x]$

$$[L^2, L_x] = [L_x^2, L_x] + [L_y^2, L_x] + [L_z^2, L_x] \tag{3.25}$$

$$[L^2, L_x] = L_y[L_y, L_x] + [L_y, L_x]L_y + L_z[L_z, L_x] + [L_z, L_x]L_z = 0 \tag{3.26}$$

Sea $[L^2, L_y]$

$$[L^2, L_y] = [L_x^2, L_y] + [L_y^2, L_y] + [L_z^2, L_y] \tag{3.27}$$

$$[L^2, L_x] = L_x[L_x, L_y] + [L_x, L_y]L_x + L_z[L_z, L_y] + [L_z, L_y]L_z = 0 \tag{3.28}$$

Sea $[L^2, L_z]$

$$[L^2, L_z] = [L_x^2, L_z] + [L_y^2, L_z] + [L_z^2, L_z] \tag{3.29}$$

$$[L^2, L_x] = L_y[L_y, L_z] + [L_y, L_z]L_y + L_x[L_x, L_z] + [L_x, L_z]L_x = 0 \tag{3.30}$$

Expresión que deriva los armónicos esféricos

$$\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial\theta}\right) + \frac{\partial^2 Y}{\partial\phi^2} = -\ell(\ell+1)\sin^2\theta Y \tag{3.31}$$

$$Y_\ell^m(\theta,\phi) = (-1)^\ell \sqrt{\frac{(2\ell+1)}{4\pi}\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_\ell^m(\cos\theta)e^{im\phi} \tag{3.32}$$

4 Problemas Gasiorowicz

3. Calcule $\langle l, m_1|L_x|l, m_2\rangle$ y $\langle l, m_1|L_y|l, m_2\rangle$
sean los operadores de ascenso y descenso $L_\pm = L_x \pm iL_y$ entonces $L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)$ y $L_y = \frac{i}{2}(L_- + L_+)$ entonces

$$\langle l, m_1|L_x|l, m_2\rangle = \frac{1}{2}\langle l, m_1|L_+|l, m_2\rangle + \frac{1}{2}\langle l, m_1|L_-|l, m_2\rangle \tag{4.1}$$

y

$$\langle l, m_1|L_y|l, m_2\rangle = \frac{i}{2}\langle l, m_1|L_-|l, m_2\rangle - \frac{i}{2}\langle l, m_1|L_+|l, m_2\rangle \tag{4.2}$$

con

$$L_\pm|l, m\rangle = \hbar\sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)}|l, m \pm 1\rangle \tag{4.3}$$

$$\langle l, m_1|L_\pm|l, m_2\rangle = \hbar\sqrt{(l \mp m_2)(l \pm m_2 + 1)}\delta_{m_1,\ m_2 \pm 1} \tag{4.4}$$

entonces

$$\langle l, m_1|L_x|l, m_2\rangle = \frac{\hbar}{2}\left(\sqrt{(l-m_2)(l+m_2+1)}\delta_{m_1,\ m_2+1} + \sqrt{(l+m_2)(l-m_2+1)}\delta_{m_1,\ m_2-1}\right) \tag{4.5}$$

y

$$\langle l, m_1|L_y|l, m_2\rangle = \frac{\hbar i}{2}\left(\sqrt{(l+m_2)(l-m_2+1)}\delta_{m_1,\ m_2-1} - \sqrt{(l-m_2)(l+m_2+1)}\delta_{m_1,\ m_2+1}\right) \tag{4.6}$$

4. Calcule $\langle l, m_1|L_x^2|l, m_2\rangle$ y $\langle l, m_1|L_y^2|l, m_2\rangle$
Sea

$$L_x^2 = \frac{1}{4}(L_+ + L_-)(L_+ + L_-) \tag{4.7}$$

$$L_x^2 = \frac{1}{4}(L_+^2 + L^2 + L^2 L_z^2 + \hbar L_z + L^2 L_z^2 \hbar L_z) \tag{4.8}$$

$$L_x^2 = \frac{1}{4}(L_+^2 + L^2) + \frac{1}{2}(L^2 L_z^2) \tag{4.9}$$

y

$$L_y^2 = -\frac{1}{4}(L_+^2 + L^2) + \frac{1}{2}(L^2 L_z^2) \tag{4.10}$$

con

$$\langle l, m_1 | L_\pm^2 | l, m_2 \rangle = \hbar \sqrt{(l \mp m_2)(l \pm m_2 + 1)} \langle l, m_1 | L_\pm | l, m_2 \pm 1 \rangle \tag{4.11}$$

$$\langle l, m_1 | L_\pm^2 | l, m_2 \rangle = \hbar^2 \sqrt{(l \mp m_2)(l \pm m_2 + 1)(l \mp (m_2 + 1)(l \pm (m_2 + 1) + 1)} \delta_{m_1,\ m_2 \pm 2} \tag{4.12}$$

donde sabemos que:

$$L^2 | l, m \rangle = \hbar^2 l(l+1) | l, m \rangle \tag{4.13}$$

$$L_z^2 | l, m \rangle = \hbar^2 m^2 | l, m \rangle \tag{4.14}$$

entonces:

$$\frac{1}{2} \langle l, m_1 | (L^2 L_z^2) | l, m_2 \rangle = \frac{\hbar^2}{2} (l(l+1) - m_2^2) \delta_{m_1,\ m_2} \tag{4.15}$$

entonces

$$L_x^2 = \frac{1}{4} \left(\hbar^2 \sqrt{(l - m_2)(l + m_2 + 1)(l - (m_2 + 1)(l + (m_2 + 1) + 1)} \delta_{m_1,\ m_2+2} + \cdots \right) \tag{4.16}$$

$$\left(\cdots \hbar^2 \sqrt{(l + m_2)(l - m_2 + 1)(l + (m_2 + 1)(l - (m_2 + 1) + 1)} \delta_{m_1,\ m_2-2} \right) \tag{4.17}$$

$$+ \frac{\hbar^2}{2} (l(l+1) - m_2^2) \delta_{m_1,\ m_2} \tag{4.18}$$

$$L_y^2 = -\frac{1}{4} \left(\hbar^2 \sqrt{(l - m_2)(l + m_2 + 1)(l - (m_2 + 1)(l + (m_2 + 1) + 1)} \delta_{m_1,\ m_2+2} + \cdots \right) \tag{4.19}$$

$$\left(\cdots \hbar^2 \sqrt{(l + m_2)(l - m_2 + 1)(l + (m_2 + 1)(l - (m_2 + 1) + 1)} \delta_{m_1,\ m_2-2} \right) \tag{4.20}$$

$$+ \frac{\hbar^2}{2} (l(l+1) - m_2^2) \delta_{m_1,\ m_2} \tag{4.21}$$

5. Sea el Hamiltoniano

$$H = \frac{L_x^2 + L_y^2}{2I_1} + \frac{L_z^2}{2I_3} \tag{4.22}$$

reescribiendo el Hamiltoniano:

$$H = \frac{L^2}{2I_1} + L_z^2 \left(\frac{1}{2I_3} - \frac{1}{2I_1} \right) \tag{4.23}$$

sean los eigenvalores dados por:

$$L^2 | l, m \rangle = \hbar^2 l(l+1) | l, m \rangle \tag{4.24}$$

$$L_z^2 | l, m \rangle = \hbar^2 m^2 | l, m \rangle \tag{4.25}$$

Donde las constantes I's salen de nuestra ecuación de valores propios al ser constantes, siendo los eigenvalores:

$$= \hbar^2 \left(\frac{l(l+1)}{2I_1} + m^2 \left(\frac{1}{2I_3} - \frac{1}{2I_1} \right) \right) \tag{4.26}$$

sea un caso limite con $I_1 \gg I_3$ el espectro:

$$= \frac{\hbar^2 m^2}{2I_3} \tag{4.27}$$

8. calcula los conmutadores

- $[x, L_x] = [x, yp_z - zp_y] = 0$
- $[y, L_x] = [y, yp_z - zp_y] = z[p_y, y] = -i\hbar z$
- $[z, L_x] = [z, yp_z - zp_y] = -y[p_z, z] = i\hbar y$
- $[x, L_y] = [x, zp_x - xp_z] = -z[p_x, x] = i\hbar z$
- $[y, L_y] = [y, zp_x - xp_z] = 0$
- $[z, L_y] = [z, zp_x - xp_z] = x[p_z, z] = -i\hbar x$

se nota un patrón cíclico $x, y \to z$, $y, z \to x$ que nos permite decir que sigue el patrón $y, z \to x$ y que en variables iguales el conmutador es 0,dándonos:

- $[x, L_z] = -i\hbar y$
- $[y, L_z] = i\hbar x$
- $[z, L_z] = 0$

11. escribiendo en coordenadas esféricas

$$(r^2 sin^2\theta sin\phi cos\phi + r^2(sin\phi + cos\phi)sin\theta cos\theta)\exp(-\alpha r^2) \tag{4.28}$$

Donde podemos verla como $R(r)\Phi(Y_\ell^m(\theta,\phi))$ tal que sea igual a:

$$\frac{1}{2}\sin^2(\theta)\left(\frac{e^{2i\phi} - e^{2i\phi}}{2i}\right) + \sin\theta\cos\theta\left(\frac{e^{i\phi} - e^{i\phi}}{2i} + \frac{e^{i\phi} + e^{i\phi}}{2}\right) \tag{4.29}$$

Siendo armónicos esféricos:

$$e^{2i\phi}\sin^2\theta = \sqrt{\frac{32\pi}{15}}Y_2^2 \tag{4.30}$$

$$e^{-2i\phi}\sin^2\theta = \sqrt{\frac{32\pi}{15}}Y_2^{-2} \tag{4.31}$$

$$e^{i\phi}\sin\theta\cos\theta = \sqrt{\frac{8\pi}{15}}Y_2^1 \tag{4.32}$$

$$e^{-i\phi}\sin\theta\cos\theta = \sqrt{\frac{8\pi}{15}}Y_2^{-1} \tag{4.33}$$

reescribiendo nuestra función:

$$= \frac{1}{4i}\sqrt{\frac{32\pi}{15}}Y_2^2 - \frac{1}{4i}\sqrt{\frac{32\pi}{15}}Y_2^{-2} - \frac{1-i}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{15}}Y_2^1 + \frac{i+1}{2}\sqrt{\frac{8\pi}{15}}Y_2^{-1} \tag{4.34}$$

sabiendo que para estar en cierto estado la probabilidad es el cuadrado del coeficiente, siendo la suma de cuadrados de los coeficientes = 1 al normalizar, entonces la suma de cuadrados de los coeficientes ahora es:

$$\frac{2\pi}{15} + \frac{2\pi}{15} + \frac{4\pi}{15} + \frac{4\pi}{15} = \frac{4\pi}{5} \tag{4.35}$$

entonces para normalizar nuestros coeficientes tenemos que multiplicarlos por $\sqrt{\frac{5}{4\pi}}$, entonces la probabilidad de encontrarlo en $m = 2$ es igual a encontrarlo en $m = -2$ es:

$$P_{\pm 2} = \frac{5}{4\pi}\frac{2\pi}{15} = \frac{1}{6} \tag{4.36}$$

igual con $m = 1$ y $m = -1$:

$$P_{\pm 1} = \frac{5}{4\pi}\frac{4\pi}{15} = \frac{1}{3} \tag{4.37}$$

5 Expandir una onda plana en armónicos esféricos

Sea una onda plana dada por $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ donde el producto punto viene dado por $\vec{k}\cdot\vec{r} = kr\cos(\theta)$ siendo la onda plana reescrita:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{ikr\cos(\theta)} \tag{5.1}$$

donde no hay términos para un segundo angulo ϕ siendo que el armónico esférico sin dependencia de ϕ es con $m = 0$, entonces al ser un conjunto completo, podemos escribir nuestra onda plana como una superposición de los armónicos esféricos:

$$e^{ikr\cos(\theta)} = \sum_{n=1}^{\infty} c_n Y_\ell^0\left(\cos(\theta)\right) \tag{5.2}$$

donde Y_ℓ^0 es igual a :

$$Y_\ell^0 = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell\left(\cos(\theta)\right) \tag{5.3}$$

Donde la ortogonalidad para Y_ℓ^0 nos lleva a que aplicándola nuestros símbolos n y ℓ son mudos:

$$c_n = 2\pi \int_0^\pi Y_n e^{ikr\cos\theta} \sin\theta d\theta \tag{5.4}$$

$$c_n = 2\pi \int_0^\pi \sqrt{\frac{2n+1}{4\pi}} P_n\left(\cos(\theta)\right) e^{ikr\cos\theta} \sin\theta d\theta \tag{5.5}$$

Donde la función esférica de Bessel es:

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z} = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} e^{izx} dx \tag{5.6}$$

$$j_n(z) = (-1)^n z^n \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^n \left(\frac{\sin z}{z}\right) \tag{5.7}$$

$$j_n(z) = (-1)^n z^n \left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^n \left(\frac{1}{2}\int_{-1}^{1} e^{izx} dx\right) \tag{5.8}$$

$$= \frac{z^n}{2}\int_{-1}^{1} \frac{(1-x^2)^n}{2^n n!} e^{izx} dx \tag{5.9}$$

$$= \frac{(-i)^n}{2}\int_{-1}^{1} \frac{(1-x^2)^n}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} e^{izx} dx \tag{5.10}$$

$$= \frac{(-i)^n}{2}\int_{-1}^{1} e^{izx} \frac{d^n}{dx^n} \frac{(x^2-1)^n}{2^n n!} dx \tag{5.11}$$

$$= \frac{(-i)^n}{2}\int_{-1}^{1} P_n(x) e^{izx} dx \tag{5.12}$$

ahora con el cambio de variables $z \to kr$ y $x \to \cos\theta$ tenemos:

$$j_n(kr) = \frac{-i^n}{2}\int_0^\pi P_n(\cos\theta) \sin\theta e^{ikr\cos\theta} d\theta \tag{5.13}$$

entonces tenemos que:

$$c_n = \sqrt{4\pi(2n+1)} i^n j_n(kr) \tag{5.14}$$

entonces la expansión de la onda plana en armónicos esféricos es:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{n=1}^{\infty} \sqrt{4\pi(2n+1)} i^n j_n(kr) Y_n^0\left(\cos(\theta)\right) \tag{5.15}$$

6 Solución radial para el átomo de hidrógeno

Sea la ecuación radial obtenida:

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)-\frac{2mr^2}{\hbar^2}[V(r)-E]R=\ell(\ell+1)R \tag{6.1}$$

donde haremos el cambio de variable $u(r)\equiv rR(r)$ entonces:

$$R=\frac{u}{r} \tag{6.2}$$

$$\frac{dR}{dr}=\frac{r\frac{du}{dr}-u}{r^2} \tag{6.3}$$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right)=r^2\frac{d^2u}{dr^2} \tag{6.4}$$

y condición de normalización:

$$\int_0^\infty |u|^2=1 \tag{6.5}$$

reescribiendo nuestra ecuación:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2u}{dr^2}+\left(V+\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)u=Eu \tag{6.6}$$

entonces sea para nuestro átomo de hidrógeno el potencial:

$$V(r)=-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r} \tag{6.7}$$

siendo nuestra ecuación con el potencial:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{d^2u}{dr^2}+\left(-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}+\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\ell(\ell+1)}{r^2}\right)u=Eu \tag{6.8}$$

Siendo ahora la sustitución:

$$\kappa=\frac{\sqrt{-2m_eE}}{\hbar} \tag{6.9}$$

sea para estados acotados $E<0$ entonces κ es real, entonces reescribiendo nuestra ecuación y dividiendo entre E:

$$\frac{1}{\kappa^2}\frac{d^2u}{dr^2}=\left(1-\frac{m_ee^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2\kappa}\frac{1}{\kappa r}+\frac{\ell(\ell+1)}{(\kappa r)^2}\right)u \tag{6.10}$$

entonces podemos tomar:

$$\rho\equiv\kappa r \qquad \rho_0=\frac{m_ee^2}{2\pi\epsilon_0\hbar^2\kappa} \tag{6.11}$$

reescribiendo a ecuación:

$$\frac{d^2u}{d\rho^2}=\left(1-\frac{\rho_0}{\rho}+\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right)u \tag{6.12}$$

donde podemos ver los comportamientos asintomáticos de las soluciones con $r\to\infty$ entonces $\rho\to\infty$ entonces tendremos:

$$\frac{d^2u}{d\rho^2}=u \tag{6.13}$$

con solución:

$$u(\rho)=Ae^{\rho}+Be^{-\rho} \tag{6.14}$$

donde si $\rho \to \infty$ diverge, entonces tomaremos $A = 0$, siendo:

$$u(\rho) \approx Be^{-\rho} \tag{6.15}$$

y sea cuando $\rho \to 0$ donde el reciproco del cuadrado predomina entonces tenemos la ecuación:

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = \left(\frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}\right)u \tag{6.16}$$

con solución:

$$u(\rho) = A'\rho^{\ell+1} + B'\rho^{-\ell} \tag{6.17}$$

donde si $\rho \to 0$ diverge, entonces tomaremos $B' = 0$, siendo:

$$u(\rho) \approx A'\rho^{\ell+1} \tag{6.18}$$

donde viendo el comportamiento asintotico podemos pensar en la siguiente sustitución: +

$$u(\rho) = \rho^{\ell+1}e^{-\rho}v(\rho) \tag{6.19}$$

donde sus derivadas son:

$$\frac{du}{d\rho} = \rho^{\ell}e^{-\rho}\left((\ell+1-\rho)v + \rho\frac{dv}{d\rho}\right) \tag{6.20}$$

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = \rho^{\ell}e^{-\rho}\left(\left(-2\ell-2+\rho+\frac{\ell(\ell+1)}{\rho}\right)v + 2(\ell+1-\rho)\frac{dv}{d\rho} + \rho\frac{d^2v}{d\rho^2}\right) \tag{6.21}$$

Sustituyendo en la ecuación 6.12 tendemos:

$$\rho\frac{d^2v}{d\rho^2} + 2(\ell+1-\rho)\frac{dv}{d\rho} + (\rho_0 - 2(\ell+1))v = 0 \tag{6.22}$$

donde al suponer una solución por series:

$$v(\rho) = \sum_{i=0}^{\infty} c_i\rho^i \tag{6.23}$$

donde:

$$\frac{dv}{d\rho} = \sum_{i=0}^{\infty}(i+1)c_{i+1}\rho^i \tag{6.24}$$

$$\frac{d^2v}{d\rho^2} = \sum_{i=0}^{\infty} i(i+1)c_{i+1}\rho^{i-1} \tag{6.25}$$

donde en la ecuación 6.22 tenemos que nos da:

$$\sum_{i=0}^{\infty} i(i+1)c_{i+1}\rho^i + 2(\ell+1)\sum_{i=0}^{\infty} i(i+1)c_{i+1}\rho^i - 2\sum_{i=0}^{\infty} ic_i\rho^i + (\rho_0 - 2(\ell+1))\sum_{i=0}^{\infty} c_i\rho^i = 0 \tag{6.26}$$

igualando los coeficientes de la misma potencia tenemos que:

$$i(i+1)c_{i+1} + 2(\ell+1)(i+1)c_{i+1} - 2ic_i + (\rho_0 - 2(\ell+1))c_i = 0 \tag{6.27}$$

dando la relación de recurrencia:

$$c_{i+1} = \left(\frac{2(i+\ell+1) - \rho_0}{(i+1)(i+2\ell+2)}\right)c_i \tag{6.28}$$

donde las series deben tener un fin:

$$c_N = 0 \tag{6.29}$$

entonces de la ecuacion 28 con $i + 1 = N$ tenemos que c_N es igual a:

$$2(N+\ell) - \rho_0 = 0 \tag{6.30}$$

y definiendo $n \equiv N + \ell$ tenemos que $\rho_0 = 2n$, entonces obteniendo las energías permitidas con las ecuaciones 9 y 11 tenemos que:

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = -\frac{m_e e^4}{8\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 \rho_0^2} \tag{6.31}$$

igual a:

$$E_n = -\left(\frac{m_e}{2\hbar^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2\right)\frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2} \tag{6.32}$$

y sea también:

$$\kappa = \frac{m_e e^2}{4\pi\epsilon\hbar^2}\frac{1}{n} = \frac{1}{an} \tag{6.33}$$

con $a \approx 0.529 \times 10^{-10} m$ seguido de que ahora:

$$\rho = \frac{r}{an} \tag{6.34}$$

con la solución radial de:

$$R_{n\ell} = \frac{1}{r}\rho^{\ell+1}e^{-\rho}v(\rho) \tag{6.35}$$

con la relación de recurrencia dada ahora con n:

$$c_{i+1} = \frac{2(i+\ell+1-n)}{(i+1)(i+2\ell+2)}c_i \tag{6.36}$$

siendo la serie bien definida para los polinomios asociados de Laguerre

$$v(\rho) = L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}(2\rho) \tag{6.37}$$

donde:

$$L^p_q(x) \equiv (-1)^p\left(\frac{d}{dx}\right)^p L_{p+q}(x) \tag{6.38}$$

a ρ

$$L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}(2\rho) \equiv (-1)^{2\ell+1}\left(\frac{d}{d(2\rho)}\right)^{2\ell+1} L_{2\ell+1+n-\ell-1}(2\rho) \tag{6.39}$$

siendo la solución radial:

$$R_{n\ell} = \frac{1}{r}\rho^{\ell+1}e^{-\rho}L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}(2\rho) \tag{6.40}$$

7 Derivación de la función de onda para n=5 l=4 y m=3

$$\psi_{n\ell m}(r,\vartheta,\varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3\frac{(n-\ell-1)!}{2n(n+\ell)!}}e^{-\rho/2}\rho^\ell L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}(\rho)Y^m_\ell(\vartheta,\varphi) \tag{7.1}$$

$$\rho = \frac{2r}{na} \tag{7.2}$$

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \tag{7.3}$$

con los polinomios asociados de Laguerre:

$$L^{2\ell+1}_{n-\ell-1}(\rho) = \frac{\rho^{-(2\ell+1)}e^x}{(n-\ell-1)!}\left(\frac{d}{d\rho}\right)^{(n-\ell-1)}\left(e^{-\rho}\rho^{(2\ell+1)+(n-\ell-1)}\right) \tag{7.4}$$

siendo para $n = 5, \quad l = 4 \ \ y \ \ m = 3$

$$\psi_{543}(r,\vartheta,\varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{5a}\right)^3\frac{(0)!}{10(9)!}}e^{-\rho/2}\rho^4 L^9_0(\rho)Y^3_4(\vartheta,\varphi) \tag{7.5}$$

$$\rho = \frac{2r}{5a} \tag{7.6}$$

$$L_0^9(\rho) = \frac{\rho^{-(9)}e^{\rho}}{(0)!}\left(\frac{d}{d\rho}\right)^{(0)}\left(e^{-\rho}\rho^{(9)+(0)}\right) \tag{7.7}$$

entonces:

$$L_0^9(\rho) = \rho^{-(9)}e^{\rho}\left(e^{-\rho}\rho^{9}\right) \tag{7.8}$$

$$L_0^9(\rho) = 1 \tag{7.9}$$

$$\psi_{543}(r,\vartheta,\varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{5a}\right)^3 \frac{1}{10(9)!}} e^{-\rho/2}\rho^4 Y_4^3(\vartheta,\varphi) \tag{7.10}$$

ahora con el armónico esférico:

$$Y_4^3(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{(9)}{4\pi}\frac{(1)!}{(7)!}}\, P_4^3(\cos\vartheta)\,\mathrm{e}^{i3\varphi} \tag{7.11}$$

entonces:

$$Y_4^3(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{9}{4\pi}\frac{1}{7!}}\, P_4^3(\cos\vartheta)\,\mathrm{e}^{i3\varphi} \tag{7.12}$$

con:

$$P_4^3(\cos\vartheta) = \frac{-1}{2^4 4!}(1-(\cos\vartheta)^2)^{\frac{3}{2}}\left(\frac{d}{d(\cos\vartheta)}\right)^7 (\cos^2\vartheta - 1)^4 \tag{7.13}$$

sea para la derivada $\cos\vartheta = x$ entonces: primera derivada:

$$= 8x\left(x^2-1\right)^3 \tag{7.14}$$

segunda

$$= 8\left(x^2-1\right)^3 + 48x^2\left(x^2-1\right)^2 = 8\left(x^2-1\right)^2\left(7x^2-1\right) \tag{7.15}$$

tercera:

$$= 112x\left(x^2-1\right)^2 + 32x\left(x^2-1\right)\left(7x^2-1\right) = 336x^5 - 480x^3 + 144x \tag{7.16}$$

cuarta:

$$= 1680x^4 - 1440x^2 + 144 \tag{7.17}$$

quinta:

$$= 6720x^3 - 2880x \tag{7.18}$$

sexta:

$$= 20160x^2 - 2880 \tag{7.19}$$

séptima:

$$= 40320x \tag{7.20}$$

siendo:

$$P_4^3(\cos\vartheta) = \frac{-1}{2^4 4!}(1-(\cos\vartheta)^2)^{\frac{3}{2}}\, 40320\cos\vartheta \tag{7.21}$$

y finalmente:

$$Y_4^3(\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{9}{4\pi}\frac{1}{7!}}\,\frac{-1}{2^4 4!}(1-(\cos\vartheta)^2)^{\frac{3}{2}}\, 40320\cos\vartheta\,\mathrm{e}^{i3\varphi} \tag{7.22}$$

$$\psi_{543}(r,\vartheta,\varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{5a}\right)^3 \frac{1}{10(9)!}} e^{-\rho/2}\rho^4 \sqrt{\frac{9}{4\pi}\frac{1}{7!}}\,\frac{-1}{2^4 4!}(1-(\cos\vartheta)^2)^{\frac{3}{2}}\, 40320\cos\vartheta\,\mathrm{e}^{i3\varphi} \tag{7.23}$$

Problema 1: Para el pozo cuadrado infinito tenemos el potencial dado como:

$$V(x,y,z) = \begin{cases} 0 \rightarrow x,y,z \; esta \; entre \; 0 \; y \; a \\ \infty \rightarrow x,y,z \; no \; esta \; entre \; 0 \; y \; a \end{cases} \tag{7.24}$$

donde la solución aplicando las condiciones de fronteras dada por el potencial y la normalización en una dimension x:

$$\Psi_n(x,t) = c_n\sqrt{\frac{2}{a}}\sin(\frac{n\pi}{a}x)\exp(\frac{-itn^2\pi^2\hbar}{2ma^2}) \tag{7.25}$$

y sea para la parte espacial x, y, z:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \tag{7.26}$$

$$\psi_m(y) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{m\pi}{a}y\right) \tag{7.27}$$

$$\psi_j(z) = \sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{j\pi}{a}z\right) \tag{7.28}$$

siendo para la caja un producto de ellas $\psi(x,y,z)T(t) = \psi_n(x)\psi_m(y)\psi_j(z)T(t)$
notese que para las eigenfunciones para una dirección correspondientes a E_n son:

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n \tag{7.29}$$

donde:

$$E_n = \frac{\hbar^2\pi^2n^2}{2ma^2} \tag{7.30}$$

donde para la caja al tener los 3 ejes:

$$E = E_n + E_m + E_j = \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(n^2+m^2+j^2) \tag{7.31}$$

Problema 7: Sea que podemos escribir a la función de onda en el estado base para Z=1 del tritio:

$$\psi_{100} = \frac{2}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \tag{7.32}$$

haciendo el producto interior con Z=2 obtendremos el coeficiente y al elevarlo al cuadrado tendremos la probabilidad que se encuentre en el estado:

$$\int \frac{2}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \frac{2}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{2}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{2r}{a_0}} d\mathbf{r} \tag{7.33}$$

$$= \frac{4\sqrt{2}}{a_0^3} \int_0^\infty r^2 e^{-\frac{3r}{a_0}} dr \tag{7.34}$$

con $u = \frac{3r}{a_0}$ $du = \frac{3}{a_0} dr$ y $r^2 = \left(\frac{a_0 u}{3}\right)^2$ quedando la integral:

$$\int_0^\infty r^2 e^{-\frac{3r}{a_0}} dr = \left(\frac{a_0}{3}\right)^2 \int_0^\infty u^2 e^{-u} \frac{a_0}{3} du \tag{7.35}$$

quedando la función gama para 2! entonces el coeficiente sera:

$$\frac{8\sqrt{2}}{27} \tag{7.36}$$

y la probabilidad:

$$\left(\frac{8\sqrt{2}}{27}\right)^2 \tag{7.37}$$

Problema 10:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{6}\left(4\psi_{100}(\mathbf{r}) + 3\psi_{211}(\mathbf{r}) - \psi_{210}(\mathbf{r}) + \sqrt{10}\psi_{21-1}(\mathbf{r})\right) \tag{7.38}$$

Sea para la energía esperada (demostrado en tareas anteriores) la suma de las energías (eigenvalor) correspondientes al estado n por el cuadrado del coeficiente, entonces con:

$$E_n = \frac{E_1}{n^2} \tag{7.39}$$

$$\langle E\rangle = \frac{16}{36}E_1 + \frac{9}{36}E_2 + \frac{1}{36}E_2 + \frac{10}{36}E_2 \tag{7.40}$$

$$\langle E\rangle = \frac{16}{36}E_1 + \frac{9}{36}\frac{E_1}{4} + \frac{1}{36}\frac{E_1}{4} + \frac{10}{36}\frac{E_1}{4} \tag{7.41}$$

$$\langle E\rangle = \left(\frac{16}{36} + \frac{9}{36}\frac{1}{4} + \frac{1}{36}\frac{1}{4} + \frac{10}{36}\frac{1}{4}\right)E_1 \tag{7.42}$$

$$\langle E\rangle = \left(\frac{16}{36} + \frac{9}{36}\frac{1}{4} + \frac{1}{36}\frac{1}{4} + \frac{10}{36}\frac{1}{4}\right)E_1 \tag{7.43}$$

de igual manera con L^2 depende de ℓ con $\hbar^2\ell(\ell+1)$, $\ell = 0$ con $\hbar^2 * 0 = 0$ y $\ell = 1$ con $\hbar^2(2)$ entonces

$$\langle L^2\rangle = \hbar^2\frac{16*0}{36} + \hbar^2\frac{2}{36} + \hbar^2\frac{9*2}{36} + \hbar^2\frac{10*2}{36} \tag{7.44}$$

$$\langle L^2\rangle = \hbar^2\frac{40}{36} \tag{7.45}$$

y de igual manera con L_z depende de m con $\hbar m$, $m = 0$ con $\hbar 0$, $m = 1$ con $\hbar$, $m = -1$ con $-\hbar$:

$$\langle L_z\rangle = \hbar\frac{16*0}{36} + \hbar\frac{1*0}{36} + \hbar\frac{9}{36} + \hbar\frac{-10}{36} \tag{7.46}$$

$$\langle L_z\rangle = -\hbar\frac{1}{36} \tag{7.47}$$

Problema 11.

$$\psi(\mathbf{r}) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{-\alpha^2 r^2}{2}} \tag{7.48}$$

Haciendo el producto interior con Z en el estado base obtendremos el coeficiente y al elevarlo al cuadrado tendremos la probabilidad que se encuentre en el estado:

$$\int \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{-\alpha^2 r^2}{2}} \frac{2}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}} d\mathbf{r} \tag{7.49}$$

$$= \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \int e^{\frac{-\alpha^2 r^2}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}} d\mathbf{r} \tag{7.50}$$

Distancia al centro de una particula en un pozo esferico en el estado base ahora siendo nuestra ecuacion para la parte radial:

$$u'' - \left(\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - k^2\right)u = 0 \tag{7.51}$$

con la condición que sea finito en r=0, encontramos que la solución esta dada por:

$$u_\ell(r) = Arj_\ell(\frac{\beta_{n\ell}r}{R}) \tag{7.52}$$

donde para el estado base $j_0 = \frac{\sin kr}{kr}$ con $k = \frac{n\pi}{R}$ y $Y_{00} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$ entonces:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi R}}\frac{\sin\frac{n\pi}{R}r}{r} \tag{7.53}$$

8 Teoría superposición

Tomando los 2 grados mas bajos en superposición sea $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{100} + \psi_{110})$ con:

$$\psi_{100} = A_{01}j_0\left(\frac{\beta_{01}r}{a}\right)Y_0^0(\theta,\phi) \tag{8.1}$$

$$\psi_{110} = A_{11}j_1\left(\frac{\beta_{11}r}{a}\right)Y_1^0(\theta,\phi) \tag{8.2}$$

raices $\beta_{00} = \pi$ $\beta_{11} = 4.493$ y con $r = 1$ $m = 1$ sustituyendo las funciones esféricas de Bessel, y los armónicos esféricos obtenemos que al normalizar obteniendo:

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}r}\sin(\pi r) \tag{8.3}$$

$$\psi_{110} = \left(\frac{3\pi}{2}\right)^{\frac{1}{2}}\cos\theta\left(\frac{\sin(4.493r)}{(4.493r)^2} - \frac{\cos(4.493r)}{(4.493r)}\right) \tag{8.4}$$

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}r}\sin(\pi r) + \left(\frac{3\pi}{2}\right)^{\frac{1}{2}}\cos\theta\left(\frac{\sin(4.493r)}{(4.493r)^2} - \frac{\cos(4.493r)}{(4.493r)}\right)\right) \tag{8.5}$$

siendo para nuestro modulo cuadrado al ser una superposición de estados propios y venir de una ecuación separable:

$$|\Psi(r,t)|^2 = \psi_{100}^2 + \psi_{110}^2 + 2\psi_{100}\psi_{110}\cos\left(\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}\right) \tag{8.6}$$

y para nuestro valor esperado de z:

$$\langle z\rangle = 2\pi\int\int\left(\psi_{100}^2 + \psi_{110}^2 + 2\psi_{100}\psi_{110}\cos\left(\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}\right)\right)r\cos\theta r^2\sin\theta drd\theta \tag{8.7}$$

$$\langle z\rangle = 2\pi\int\int\left(\psi_{100}^2 + \psi_{110}^2 + 2\psi_{100}\psi_{110}\cos\left(\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}\right)\right)\cos\theta r^3\sin\theta drd\theta \tag{8.8}$$

donde al a ver el termino de coseno con seno serán 0 algunas integrales e integrando la parte en θ, quedando:

$$\langle z\rangle = \frac{8\pi}{3}\int r^3\left(\frac{3\pi}{2}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\sin(4.493r)}{(4.493r)^2} - \frac{\cos(4.493r)}{(4.493r)}\right)\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}r}\sin(\pi r)\right)dr \tag{8.9}$$

$$\langle z\rangle = \frac{4\pi}{\sqrt{3}}\cos\left(\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar}\right)\int r^2\left(\frac{\sin(4.493r)}{(4.493r)^2} - \frac{\cos(4.493r)}{(4.493r)}\right)(\sin(\pi r))dr \tag{8.10}$$

con E_1 y E_2

$$E_1 = \frac{\pi^2\hbar^2}{2} \tag{8.11}$$

$$E_2 = \frac{4.493^2\hbar^2}{2} \tag{8.12}$$

9 Operadores de momento angular a matrices

Sea nuestro operador de momento angular aplicado a un ket, podemos aplicar un bra, de tal manera que $l = 1$ y tal manera que nos queda lo siguiente:

$$L_z|l, m\rangle = \hbar m|l, m\rangle \tag{9.1}$$

aplicando el bra con $l = 1$ y m'

$$\langle l, m'|L_z|l, m\rangle = \langle l, m'|\hbar m|l, m\rangle \tag{9.2}$$

$$\langle l, m'|L_z|l, m\rangle = \hbar m\delta_{m\ m'} \tag{9.3}$$

donde viendo el kronecker delta como la entradas de una matriz con orden $m = 1, 0, -1$:

$$L_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{9.4}$$

y sea $L_x = \frac{1}{2}(L_+ + L_-)$ y $L_y = \frac{i}{2}(L_- + L_+)$, haciendo el procesamiento análogo con $l = 1$:

$$L_\pm|l, m\rangle = \hbar\sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)}|l, m \pm 1\rangle \tag{9.5}$$

$$\langle l, m'|L_\pm|l, m\rangle = \hbar\sqrt{(l \mp m')(l \pm m' + 1)}\delta_{m,\ m'+1} \tag{9.6}$$

con:

$$L_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{9.7}$$

$$L_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \tag{9.8}$$

siendo

$$L_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{9.9}$$

$$L_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}i} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \tag{9.10}$$

10 Mas problemas de Gasiorowicz

Problema 6
Sea la función de onda donde el valor esperado esta dado por $\langle H\rangle = \psi^\dagger H\psi$, recordemos que nuestras entradas de la matriz para el Hamiltoniano tenemos que operar el bra con la ecuación de valores propios para despúes obtener las entradas donde en este caso para el oscilador armónico nuestras entradas diagonales quedan de la forma $E_{ii} = \hbar\omega(i + \frac{1}{2})$ con $i = 0, 1, 2, 3, 4, \cdots$ entonces nuestro valor esperado:

$$\langle H\rangle = \frac{1}{6}\hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{3}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{7}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{10.1}$$

$$\langle H\rangle = \frac{3}{2}\hbar\omega \tag{10.2}$$

Recordemos de nuestros operadores escalera por los cuales solucionamos el oscilador armónico podemos escribir a $\hat{x}$ y $\hat{p}$ en función de estos:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}_+ + \hat{a}_-) \tag{10.3}$$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\hat{a}_+ - \hat{a}_-) \tag{10.4}$$

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}_+^2 + \hat{a}_+\hat{a}_- + \hat{a}_-\hat{a}_+ + \hat{a}_-^2) \tag{10.5}$$

$$\hat{p}^2 = -\frac{\hbar m\omega}{2}(\hat{a}_+^2 - \hat{a}_+\hat{a}_- - \hat{a}_-\hat{a}_+ + \hat{a}_-^2) \tag{10.6}$$

tenemos sus ecuaciones de valores propios para los operadores escalera:

$$\hat{a}_+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1} \tag{10.7}$$

$$\hat{a}_-\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1} \tag{10.8}$$

$$\hat{a}_+^2\psi_n = \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\psi_{n+2} \tag{10.9}$$

$$\hat{a}_-^2\psi_n = \sqrt{n}\sqrt{n-1}\psi_{n-2} \tag{10.10}$$

$$\hat{a}_+\hat{a}_-\psi_n = n\psi_n \tag{10.11}$$

$$\hat{a}_-\hat{a}_+\psi_n = (n+1)\psi_n \tag{10.12}$$

escrito en notación de Dirac:

$$\hat{a}_+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \tag{10.13}$$

$$\hat{a}_-|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \tag{10.14}$$

$$\hat{a}_+^2|n\rangle = \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}|n+2\rangle \tag{10.15}$$

$$\hat{a}_-^2|n\rangle = \sqrt{n}\sqrt{n-1}|n-2\rangle \tag{10.16}$$

$$\hat{a}_+\hat{a}_-|n\rangle = n|n\rangle \tag{10.17}$$

$$\hat{a}_-\hat{a}_+|n\rangle = (n+1)|n\rangle \tag{10.18}$$

operando con un bra n' para hacer productos internos:

$$\langle n'|\hat{a}_+|n\rangle = \sqrt{n+1}\langle n'|n+1\rangle = \sqrt{n+1}\delta_{n',n+1} \tag{10.19}$$

$$\langle n'|\hat{a}_-|n\rangle = \sqrt{n}\langle n'|n-1\rangle = \sqrt{n}\delta_{n',n-1} \tag{10.20}$$

$$\langle n'|\hat{a}_+^2|n\rangle = \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\langle n'|n+2\rangle = \sqrt{n+1}\sqrt{n+2}\delta_{n',n+2} \tag{10.21}$$

$$\langle n'|\hat{a}_-^2|n\rangle = \sqrt{n}\sqrt{n-1}\langle n'|n-2\rangle = \sqrt{n}\sqrt{n-1}\delta_{n',n-2} \tag{10.22}$$

$$\langle n'|\hat{a}_+\hat{a}_-|n\rangle = n\langle n'|n\rangle = n\delta_{n',n} \tag{10.23}$$

$$\langle n'|\hat{a}_-\hat{a}_+|n\rangle = (n+1)\langle n'|n\rangle = (n+1)\delta_{n',n} \tag{10.24}$$

Entonces sean las matrices:

$$a_+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix} \tag{10.25}$$

$$a_- = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{10.26}$$

$$a_+^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{10.27}$$

$$a_-^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{6} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{10.28}$$

$$a_+a_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \tag{10.29}$$

$$a_-a_+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} \tag{10.30}$$

y sean ahora las matrices:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}) \tag{10.31}$$

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix} \tag{10.32}$$

$$p = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}(\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}) \tag{10.33}$$

$$x = i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 \end{pmatrix} \tag{10.34}$$

$$\hat{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}(\hat{a}_+^2 + \hat{a}_+\hat{a}_- + \hat{a}_-\hat{a}_+ + \hat{a}_-^2) \tag{10.35}$$

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{6} \\ \sqrt{2} & 0 & 5 & 0 \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & 7 \end{pmatrix} \tag{10.36}$$

$$p^2 = -\frac{\hbar m\omega}{2}(\hat{a}_+^2 - \hat{a}_+\hat{a}_- - \hat{a}_-\hat{a}_+ + \hat{a}_-^2) \tag{10.37}$$

$$p^2 = \frac{\hbar m\omega}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 3 & 0 & -\sqrt{6} \\ -\sqrt{2} & 0 & 5 & 0 \\ 0 & -\sqrt{6} & 0 & 7 \end{pmatrix} \tag{10.38}$$

ahora siendo los valores esperados:

$$\langle x \rangle = \psi^{\dagger} x \psi = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{2}{3}(1 + \sqrt{2}) \tag{10.39}$$

$$\langle p \rangle = \psi^{\dagger} p \psi = 0 \tag{10.40}$$

$$\langle x^2 \rangle = \psi^{\dagger} x^2 \psi = \frac{\hbar}{2m\omega}(3 + \frac{\sqrt{2}}{3}) \tag{10.41}$$

$$\langle p^2 \rangle = \psi^{\dagger} p^2 \psi = \frac{m\omega\hbar}{2}(3 - \frac{\sqrt{2}}{3}) \tag{10.42}$$

ahora sea:

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 \tag{10.43}$$

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 \tag{10.44}$$

$$(\Delta x)^2 = \frac{5\hbar}{6m\omega}(1 - \frac{\sqrt{2}}{3}) \tag{10.45}$$

$$(\Delta p)^2 = \frac{\hbar m\omega}{2}(3 - \frac{\sqrt{2}}{3}) \tag{10.46}$$

Problema 10
encuentre que en una matriz hermitiana A y demuestre que es solo la suma de los eigenvalores de A:

$$TrA = \sum_{i=0}^{N} A_{ii} \tag{10.47}$$

sea la matriz diagonal donde U es ortonormal:

$$A_d = UAU^{\dagger} \tag{10.48}$$

entonces por la ecuación donde $TrABC = TrBCA = TrCAB$ entonces:

$$TrUAU^{\dagger} = TrU^{\dagger}UA = TrA = TrA_d \tag{10.49}$$

siendo la suma de los eigenvalores.

Problema 13

Sea la matrices A, B donde conmutan puede verse que $AB = BA$ donde una matrix ortonormal diagonaliza a A:

$$UAU^{\dagger} = A_d = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 \end{pmatrix} \tag{10.50}$$

donde cada λ_i es diferente, entonces con el conmutador tenemos que:

$$[A, B] = 0 \tag{10.51}$$

diagonalizando:

$$U[A, B]U^{\dagger} = 0 \tag{10.52}$$

entonces:

$$UAU^{\dagger}UBU^{\dagger} = UBU^{\dagger}UAU^{\dagger} \tag{10.53}$$

y sea una matriz arbitraria para $UBU^{\dagger}$ tenemos que:

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} & \sigma_{14} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} & \sigma_{24} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} & \sigma_{34} \\ \sigma_{41} & \sigma_{42} & \sigma_{43} & \sigma_{44} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} & \sigma_{14} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} & \sigma_{24} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} & \sigma_{34} \\ \sigma_{41} & \sigma_{42} & \sigma_{43} & \sigma_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_4 \end{pmatrix} \tag{10.54}$$

donde los elementos fuera de la diagonal $\lambda_i \sigma_{ij} = \lambda_m \sigma_{ij}$ donde hay 2 opciones, que $\lambda_i = \lambda_m$, pero al no ser posible debido a que son eigenvalores diferentes, la otra opción es que $\sigma_{ij} = 0$ fuera de la diagonal, diagonalizando igualmente a B! WOW!

11 Matriz Hamiltoniano contribución del spin

Nos será util saber que:

$$\sigma_x|+\rangle = |-\rangle \tag{11.1}$$

$$\sigma_x|-\rangle = |+\rangle \tag{11.2}$$

$$\sigma_y|+\rangle = i|-\rangle \tag{11.3}$$

$$\sigma_y|-\rangle = -i|+\rangle \tag{11.4}$$

$$\sigma_z|+\rangle = |+\rangle \tag{11.5}$$

$$\sigma_z|-\rangle = -|-\rangle \tag{11.6}$$

y al ser ortogonales $+$ y $-$:

$$\langle -|-\rangle = 1 \tag{11.7}$$

$$\langle +|+\rangle = 1 \tag{11.8}$$

$$\langle -|+\rangle = 0 \tag{11.9}$$

$$\langle +|-\rangle = 0 \tag{11.10}$$

Donde las entradas de las matriz H son:

$$H_{11} = a\langle + + |S_1 \cdot S_2| + +\rangle \tag{11.11}$$

$$H_{11} = a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\langle +|\sigma_x|+\rangle\langle +|\sigma_x|+\rangle + \langle +|\sigma_y|+\rangle\langle +|\sigma_y|+\rangle + \langle +|\sigma_z|+\rangle\langle +|\sigma_z|+\rangle) = a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \tag{11.12}$$

$$H_{12} = a\langle + + |S_1 \cdot S_2| + -\rangle \tag{11.13}$$

$$H_{12} = a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\langle +|\sigma_x|+\rangle\langle +|\sigma_x|-\rangle + \langle +|\sigma_y|+\rangle\langle +|\sigma_y|-\rangle + \langle +|\sigma_z|+\rangle\langle +|\sigma_z|-\rangle) = 0 \tag{11.14}$$

$$H_{13} = a\langle + + |S_1 \cdot S_2| - +\rangle \tag{11.15}$$

$$H_{13} = a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\langle +|\sigma_x|-\rangle\langle +|\sigma_x|+\rangle + \langle +|\sigma_y|-\rangle\langle +|\sigma_y|+\rangle + \langle +|\sigma_z|-\rangle\langle +|\sigma_z|+\rangle) = 0 \tag{11.16}$$

$$H_{14} = a\langle + + |S_1 \cdot S_2| - -\rangle \tag{11.17}$$

$$H_{14} = a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\langle +|\sigma_x|-\rangle\langle +|\sigma_x|-\rangle + \langle +|\sigma_y|-\rangle\langle +|\sigma_y|-\rangle + \langle +|\sigma_z|-\rangle\langle +|\sigma_z|-\rangle) = 0 \tag{11.18}$$

$$H_{21} = a\langle + - |S_1 \cdot S_2| + +\rangle \tag{11.19}$$

$$H_{21} = a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\langle +|\sigma_x|+\rangle\langle -|\sigma_x|+\rangle + \langle +|\sigma_y|+\rangle\langle -|\sigma_y|+\rangle + \langle +|\sigma_z|+\rangle\langle -|\sigma_z|+\rangle) = 0 \tag{11.20}$$

$$H_{22} = a\langle + - |S_1 \cdot S_2| + -\rangle \tag{11.21}$$

$$H_{22} = a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\langle +|\sigma_x|+\rangle\langle -|\sigma_x|-\rangle + \langle +|\sigma_y|+\rangle\langle -|\sigma_y|-\rangle + \langle +|\sigma_z|+\rangle\langle -|\sigma_z|-\rangle) = -a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \tag{11.22}$$

$$H_{23} = a\langle + - |S_1 \cdot S_2| - +\rangle \tag{11.23}$$

$$H_{23} = a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\langle +|\sigma_x|-\rangle\langle -|\sigma_x|+\rangle + \langle +|\sigma_y|-\rangle\langle -|\sigma_y|+\rangle + \langle +|\sigma_z|-\rangle\langle -|\sigma_z|+\rangle) = 2a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \tag{11.24}$$

$$H_{24} = a\langle + - |S_1 \cdot S_2| - -\rangle \tag{11.25}$$

$$H_{24} = a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\langle +|\sigma_x|-\rangle\langle -|\sigma_x|-\rangle + \langle +|\sigma_y|-\rangle\langle -|\sigma_y|-\rangle + \langle +|\sigma_z|-\rangle\langle -|\sigma_z|-\rangle) = 0 \tag{11.26}$$

$$H_{31} = a\langle - + |S_1 \cdot S_2| + +\rangle \tag{11.27}$$

$$H_{31} = a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\langle -|\sigma_x|+\rangle\langle +|\sigma_x|+\rangle + \langle -|\sigma_y|+\rangle\langle +|\sigma_y|+\rangle + \langle -|\sigma_z|+\rangle\langle +|\sigma_z|+\rangle) = 2a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \tag{11.28}$$

$$H_{32} = a\langle - + |S_1 \cdot S_2| + -\rangle \tag{11.29}$$

$$H_{32} = a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\langle -|\sigma_x|+\rangle\langle +|\sigma_x|-\rangle + \langle -|\sigma_y|+\rangle\langle +|\sigma_y|-\rangle + \langle -|\sigma_z|+\rangle\langle +|\sigma_z|-\rangle) = 0 \tag{11.30}$$

$$H_{33} = a\langle - + |S_1 \cdot S_2| - +\rangle \tag{11.31}$$

$$H_{33} = a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\langle -|\sigma_x|-\rangle\langle +|\sigma_x|+\rangle + \langle -|\sigma_y|-\rangle\langle +|\sigma_y|+\rangle + \langle -|\sigma_z|-\rangle\langle +|\sigma_z|+\rangle) = -a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \tag{11.32}$$

$$H_{34} = a\langle - + |S_1 \cdot S_2| - -\rangle \tag{11.33}$$

$$H_{34} = a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\langle -|\sigma_x|-\rangle\langle +|\sigma_x|-\rangle + \langle -|\sigma_y|-\rangle\langle +|\sigma_y|-\rangle + \langle -|\sigma_z|-\rangle\langle +|\sigma_z|-\rangle) = 0 \tag{11.34}$$

$$H_{41} = a\langle - - |S_1 \cdot S_2| + +\rangle \tag{11.35}$$

$$H_{41} = a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\langle -|\sigma_x|+\rangle\langle -|\sigma_x|+\rangle + \langle -|\sigma_y|+\rangle\langle -|\sigma_y|+\rangle + \langle -|\sigma_z|+\rangle\langle -|\sigma_z|+\rangle) = 0 \tag{11.36}$$

$$H_{42} = a\langle - - |S_1 \cdot S_2| + -\rangle \tag{11.37}$$

$$H_{42} = a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\langle -|\sigma_x|+\rangle\langle -|\sigma_x|-\rangle + \langle -|\sigma_y|+\rangle\langle -|\sigma_y|-\rangle + \langle -|\sigma_z|+\rangle\langle -|\sigma_z|-\rangle) = 0 \tag{11.38}$$

$$H_{43} = a\langle - - |S_1 \cdot S_2| - +\rangle \tag{11.39}$$

$$H_{43} = a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\langle -|\sigma_x|-\rangle\langle -|\sigma_x|+\rangle + \langle -|\sigma_y|-\rangle\langle -|\sigma_y|+\rangle + \langle -|\sigma_z|-\rangle\langle -|\sigma_z|+\rangle) = 0 \tag{11.40}$$

$$H_{44} = a\langle - - |S_1 \cdot S_2| - -\rangle \tag{11.41}$$

$$H_{44} = a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 (\langle -|\sigma_x|-\rangle\langle -|\sigma_x|-\rangle + \langle -|\sigma_y|-\rangle\langle -|\sigma_y|-\rangle + \langle -|\sigma_z|-\rangle\langle -|\sigma_z|-\rangle) = a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \tag{11.42}$$

donde H es la matriz:

$$H = a\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{11.43}$$

y solamente $S_1 \cdot S_2$

$$\left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{11.44}$$

12 Densidad de estados ejemplo básico

Para una particula libre en 3 dimensiones, periodica en L con:

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \tag{12.1}$$

con las condiciones de perioricidad:

$$k_x = \frac{2\pi n_x}{L} \tag{12.2}$$

$$k_y = \frac{2\pi n_y}{L} \tag{12.3}$$

$$k_z = \frac{2\pi n_z}{L} \tag{12.4}$$

con

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{4\pi^2}{L^2}(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \tag{12.5}$$

Para calcular la densidad de estados, imaginamos una capa esférica en k espacio con radio $|k| = \frac{2\pi|n|}{L}$ y espesor $d|k| = \frac{2\pi d|n|}{L}$. Todos los estados dentro de este la cáscara tiene energía $E = \frac{dN}{dE}$. El número de estados dN dentro de este caparazón es $4\pi^2 n^2 d|n|$. Por lo tanto:

$$\frac{dN}{dE} = \frac{4\pi^2 n^2 d|n|}{\hbar^2 |k| d|k|/m} = \frac{4\pi}{\hbar^2} m \frac{L^2}{4\pi^2} |k| \frac{L}{2\pi} \tag{12.6}$$

13 Funciones hidrogenoides separadas por una distancia R

Calcular y normalizar 2 funciones hidrogenoides separadas por una distancia R, simetrica y antisimetricamente:

$$\Psi = A_\pm \left(\psi_{100}^1 \pm \psi_{100}^2\right) \tag{13.1}$$

para 1:

$$\psi_{100}^1 = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{|r+\frac{R}{2}|}{a_0}} \tag{13.2}$$

2:

$$\psi_{100}^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{|r-\frac{R}{2}|}{a_0}} \tag{13.3}$$

entonces con $r' = r + R$

$$\frac{1}{|A_\pm|^2} = \left(\langle\psi^1_{100}|\psi^1_{100}\rangle + \langle\psi^2_{100}|\psi^2_{100}\rangle + 2\langle\psi^1_{100}|\psi^2_{100}\rangle\right) \tag{13.4}$$

al ser ortonomales:

$$\frac{1}{|A_\pm|^2} = \left(2 \pm 2\langle\psi^1_{100}|\psi^2_{100}\rangle\right) \tag{13.5}$$

entonces con 13.2 y 13.3:

$$\frac{1}{|A_\pm|^2} = \left(2 \pm 2\frac{1}{\pi a_0^3}\int d^3re^{\frac{-(r+r')}{a_0}}\right) \tag{13.6}$$

usando ley de cosenos para relacionar r y r':

$$r' = \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR\cos\theta} \tag{13.7}$$

tomando la integral:

$$\frac{1}{\pi a_0^3}\int d^3re^{\frac{-(r+r')}{a_0}} = M \tag{13.8}$$

$$M = \frac{1}{\pi a_0^3}\int e^{-\frac{r}{a_0}}e^{-\frac{\sqrt{r^2+R^2-2rR\cos\theta}}{a_0}}r^2\sin\theta drd\theta d\phi \tag{13.9}$$

$$M = \frac{2}{a_0^3}\int e^{-\frac{r}{a_0}}e^{-\frac{\sqrt{r^2+R^2-2rR\cos\theta}}{a_0}}r^2\sin\theta drd\theta \tag{13.10}$$

tomando $y \equiv \sqrt{r^2 + R^2 - 2rR\cos\theta}$ con $dy^2 = 2ydy$ y $dy = \frac{1}{y}rR\sin\theta d\theta$ entonces $dy^2 = 2rR\sin\theta d\theta$

$$\int_0^\pi e^{-\frac{\sqrt{r^2+R^2-2rR\cos\theta}}{a_0}}\sin\theta d\theta = \frac{1}{rR}\int_{r-R}^{r-R} e^{-y/a_0}ydy \tag{13.11}$$

integrando por partes $u = y$ $du = dy$ $dv = e^{-y/a_0}$ $v = -a_0e^{-y/a_0}$ y evaluando:

$$= \frac{a_0}{rR}\left(e^{-(r+R)/a_0}(r + R + a_0) - e^{-|r-R|/a_0}(|r - R| + a_0)\right) \tag{13.12}$$

siendo:

$$M = \frac{2}{a_0^3}\int e^{-\frac{r}{a_0}}\frac{a_0}{rR}\left(e^{-(r+R)/a_0}(r + R + a_0) - e^{-|r-R|/a_0}(|r - R| + a_0)\right)r^2dr \tag{13.13}$$

$$M = \frac{2}{a_0^2R}\left(-e^{-R/a_0}\int_0^\infty(r + R + a_0)e^{2r/a_0}rdr + e^{-R/a_0}\int_0^R(R - r + a_0)rdr + e^{R/a_0}\int_R^\infty(r - R + a_0)e^{2r/a_0}rdr\right) \tag{13.14}$$

finalmente evaluando llegamos a:

$$M = e^{-R/a_0}\left(1 + \left(\frac{R}{a_0}\right) + \frac{1}{3}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2\right) \tag{13.15}$$

finalmente:

$$\frac{1}{|A_\pm|^2} = \left(2 \pm 2e^{-R/a_0}\left(1 + \left(\frac{R}{a_0}\right) + \frac{1}{3}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2\right)\right) \tag{13.16}$$

despejando:

$$|A_\pm| = \sqrt{\frac{1}{2\left(1 \pm e^{-R/a_0}\left(1 + \left(\frac{R}{a_0}\right) + \frac{1}{3}\left(\frac{R}{a_0}\right)^2\right)\right)}} \tag{13.17}$$

14 Formula de Rabi

Planteamiento: Suponga que a tiempo $t = 0$ el estado de un sistema se puedde escribir de la siguiente manera:

$$\psi(0) = \sum_m c_m\,\psi_m, \tag{14.1}$$

donde c_p pueden ser números complejos. Por tanto, el estado inicial es una superposición lineal de los estados propios de energía no perturbados. En ausencia de la perturbación dependiente del tiempo, la evolución temporal del sistema es simplemente Considere un sistema en el que el hamiltoniano independiente del tiempo posee dos estados propios, denotados por:

$$\psi(t) = \sum_m c_m\,\exp\left(-\mathrm{i}\,E_m\,t/\hbar\right)\psi_m. \tag{14.2}$$

Y sea la probabilidad con el estado n al tiempo t:

$$P_n(t) = |\langle\psi_n|\psi\rangle|^2 = |c_n\,\exp\left(-\mathrm{i}\,E_n\,t/\hbar\right)|^2 = |c_n|^2 \tag{14.3}$$

donde para la parte del Hamiltoniano sin perturbacion tenemos que los estados son ortonormales:

$$\langle n|m\rangle = \delta_{nm}. \tag{14.4}$$

Ahora donde la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$\mathrm{i}\,\hbar\,\frac{\partial\psi(t)}{\partial t} = H(t)\,\psi(t) = [H_0 + H_1(t)]\,\psi(t). \tag{14.5}$$

llegando a:

$$(H_0 + H_1)\,\psi = \sum_m c_m\,\exp\left(-\mathrm{i}\,E_m\,t/\hbar\right)(E_m + H_1)\,\psi_m. \tag{14.6}$$

de igual manera:

$$\mathrm{i}\,\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial t} = \sum_m\left(\mathrm{i}\,\hbar\,\frac{dc_m}{dt} + c_m\,E_m\right)\exp\left(-\mathrm{i}\,E_m\,t/\hbar\right)\psi_m, \tag{14.7}$$

Igualando el lado derecho de las 2 ecuaciones anteriores:

$$\sum_m \mathrm{i}\,\hbar\,\frac{dc_m}{dt}\,\exp\left(-\mathrm{i}\,E_m\,t/\hbar\right)\psi_m = \sum_m c_m\,exp\left(-\mathrm{i}\,E_m\,t/\hbar\right)H_1\,\psi_m. \tag{14.8}$$

igualando los coeficientes:

$$\mathrm{i}\,\hbar\,\frac{dc_n(t)}{dt} = \sum_m H_{nm}(t)\,\exp\left(\,\mathrm{i}\,\omega_{nm}\,t\right)c_m(t), \tag{14.9}$$

donde:

$$H_{nm}(t) = \langle n|H_1(t)|m\rangle, \tag{14.10}$$

y:

$$\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar}. \tag{14.11}$$

Ahora retomando para 2 niveles:

$$H = H_0 + H_1(t) \tag{14.12}$$

Considere un sistema en el que el hamiltoniano independiente del tiempo posee dos estados propios:

$$H_0\psi_1 = E_1\psi_1 \tag{14.13}$$

$$H_0\psi_2 = E_2\psi_2 \tag{14.14}$$

Supongamos, que por simplicidad, que los elementos diagonales de la interacción hamiltoniana son 0:

$$\langle 1|H_1|1\rangle = \langle 2|H_1|2\rangle = 0 \tag{14.15}$$

Se supone que los elementos fuera de la diagonal oscilan sinusoidalmente a alguna frecuencia ω:

$$\langle 1|H_1|2\rangle = \langle 2|H_1|1\rangle^* = \gamma\hbar \exp(\mathrm{i}\omega t) \tag{14.16}$$

donde γ y ω son reales, y por la ecuacion 14.9

$$\mathrm{i}\,\frac{dc_1}{dt} = \gamma\,\exp\left[+\mathrm{i}\,(\omega-\omega_{21})\,t\right]\,c_2, \tag{14.17}$$

$$\mathrm{i}\,\frac{dc_2}{dt} = \gamma\,\exp\left[-\mathrm{i}\,(\omega-\omega_{21})\,t\right]\,c_1, \tag{14.18}$$

Donde $\omega_{21} = (E_2 - E_1)/\hbar$ y las dos ecuaciones anteriores se pueden combinar para dar una ecuación diferencial de segundo orden para la variación en el tiempo de la amplitud c_2

$$\frac{d^2 c_2}{dt^2} + \mathrm{i}\,(\omega-\omega_{21})\,\frac{dc_2}{dt} + \gamma^2\,c_2 = 0. \tag{14.19}$$

Encontrando la solucion y imponiendo las condiciones iniciales $c_1(0) = 1$ $c_2(0) = 0$ llegamos a:

$$c_2(t) = \left(\frac{-\mathrm{i}\,\gamma}{\Omega}\right)\exp\left[\frac{-\mathrm{i}\,(\omega-\omega_{21})\,t}{2}\right]\sin(\Omega\,t), \tag{14.20}$$

$$\begin{aligned} c_1(t) &= \exp\left[\frac{\mathrm{i}\,(\omega-\omega_{21})\,t}{2}\right]\cos(\Omega\,t) \\ &\quad - \left[\frac{\mathrm{i}\,(\omega-\omega_{21})}{2\,\Omega}\right]\exp\left[\frac{\mathrm{i}\,(\omega-\omega_{21})\,t}{2}\right]\sin(\Omega\,t), \end{aligned} \tag{14.21}$$

donde

$$\Omega = \sqrt{\gamma^2 + (\omega-\omega_{21})^2/4}. \tag{14.22}$$

siendo la probabilidad de encontrar a la particula en el estado 1 la de $P_1(t) = |c_1(t)|^2$ de igual manera para la particula 2 $P_2(t) = |c_2(t)|^2$, llegando a:

$$P_1(t) = 1 - P_2(t), \tag{14.23}$$

$$P_2(t) = \left[\frac{\gamma^2}{\gamma^2 + (\omega-\omega_{21})^2/4}\right]\sin^2(\Omega\,t). \tag{14.24}$$

siendo este resultado conocido como la formula de Rabi, donde el resonancia con $\omega \to \omega_{21}$:

$$P_1(t) = \cos^2(\gamma\,t), \tag{14.25}$$

$$P_2(t) = \sin^2(\gamma\,t). \tag{14.26}$$

15 Regla de oro de Fermi

La regla de oro de Fermi nos dice que aparte del factor que dice que la tasa de transición es el cuadrado del elemento de la matriz (esto encapsula todos los información sobre la dinámica del proceso) multiplicada por la densidad de estados (cuántos estados son accesibles, dada la energía suministrada por la perturbación. "cuantas más carreteras estén abiertas, más rápido fluirá el tráfico"

$$R = \frac{2\pi}{\hbar}|\frac{V_{if}}{2}|^2\rho(E_f) \tag{15.1}$$

Utilizaremos la regla de oro de Fermi para obtener la sección transversal de la dispersión diferencial para una partícula de masa m el vector de onda incidente k' que se dispersa a partir de un potencial V(r)

$$\phi_i = \frac{1}{\sqrt{l^3}} e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \tag{15.2}$$

$$\phi_f = \frac{1}{\sqrt{l^3}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tag{15.3}$$

Colocando toda la configuración dentro de un caja de la longitud l a un lado. Esto hace que los estados de partículas libres sean normalizables y contables. Formalmente, queremos el límite $l \to \infty$.
Usando condiciones de contorno periódicas, los valores permitidos de k son:

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{l}(n_x\hat{i} + n_y\hat{j} + n_z\hat{k}) \tag{15.4}$$

con n_x, n_y, n_z enteros y con nuestra pertubacion $H' = V(r)$

$$V_{fi} = \int \phi_f^*(r)V(\mathbf{r})\phi_i(r)d^3\mathbf{r} = \frac{1}{l^3}\int e^{(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}}V(\mathbf{r})d^3\mathbf{r} \tag{15.5}$$

Queremos contar el número de estados con energías entre E y E + dE, con vectores de onda k dentro $d\Omega$. En k espacio estos estados ocupan una sección de una cáscara esférica de radio k y espesor dk que subtiende un ángulo sólido$d\Omega$; tiene un volumen:

$$k^2 dk d\Omega \tag{15.6}$$

y la densidad de estados:

$$\rho(E)dE = \frac{k^2 dk d\Omega}{(2\pi/l)^3} = \left(\frac{l}{2\pi}\right)^3 k^2 \frac{dk}{dE} dE d\Omega \tag{15.7}$$

$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$\rho(E) = \left(\frac{l}{2\pi}\right)^3 \frac{\sqrt{2m^3 E}}{\hbar^3} d\Omega \tag{15.8}$$

De la regla de oro de Fermi, la velocidad a la que las partículas se dispersan en el ángulo sólido $d\Omega$:

$$R_{i\to d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar}\frac{1}{l^6}|\int e^{(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}}V(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}|^2 \left(\frac{l}{2\pi}\right)^3 \frac{\sqrt{2m^3 E}}{\hbar^3} d\Omega \tag{15.9}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{R_{i\to d\Omega}}{J_i d\Omega} \tag{15.10}$$

donde J_i es el flujo (o corriente de probabilidad) de partículas incidentes. Para una ola incidente de la forma de onda plana:

$$J_i = |A|^2\nu = \frac{1}{l^3}\frac{\hbar k'}{m} \tag{15.11}$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |-\frac{m}{2\pi\hbar^2}\int e^{(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}}V(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}|^2 \tag{15.12}$$

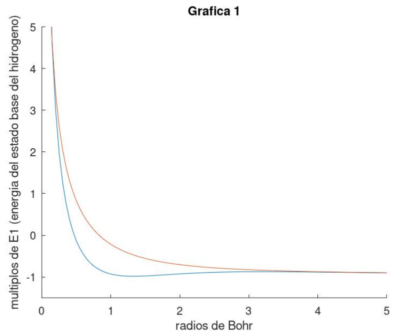
Obteniendo la misma expresión que la primera aproximación de Born

16 Simulación de molecula H2-Octave

En general para todos las gráficas tomaremos el Hamiltoniano igual a:

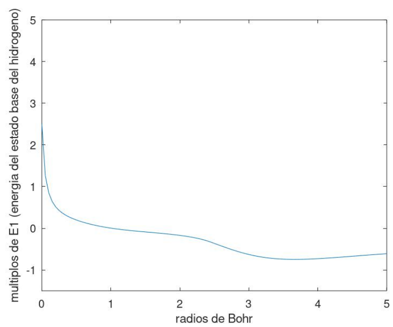
$$H = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \tag{16.1}$$

Figure 1: Gráfica 1



Aceptable

Figure 2: Gráfica 2



Se uso método variacional, posible error en integración

Gráfica 1
Sea la función de onda:

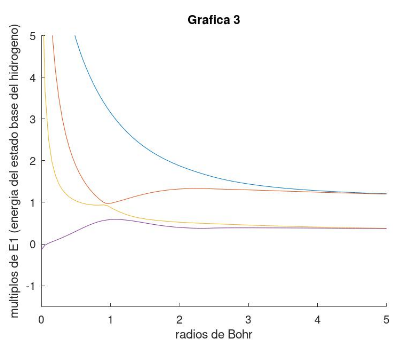
$$|\psi\rangle = A\left(|100\rangle_1 \pm |100\rangle_2\right) \tag{16.2}$$

entonces para graficar su potencial molecular:

Gráfica 2
De nuestra función de onda $|\psi\rangle = c\left(|100\rangle_1 + |100\rangle_2\right) + d\left(|210\rangle_1 + |210\rangle_2\right)$:

Gráfica 3
Separando nuestro Hamiltoniano H a $H_1+H_2+H_3$ donde H_1 y H_2 corresponden a los términos de interacción con los electrón-protón, y H_3 a la proton-proton. Obteniendo la matriz operando el operador H_i en el bra o ket correspondiente para después usar la ecuación característica e integrar si hay términos:
Muchas gracias por leer! se aceptan contribuciones y mejoras! Mucho éxito en tus estudios!

Figure 3: Gráfica 3



La parte morada no diverge! posible error