

Tarea 5: Física Atómica y Materia Condensada

Tomás Ricardo Basile Álvarez
316617194

March 25, 2022

Problema 1

Cálculo del efecto Stark lineal para los estados $n = 2$ del hidrógeno. Para este cálculo primero construiremos funciones de onda para los estados casi degenerados (separados por el corrimiento de Lamb Δ) $2s_{1/2}$ y $2p_{1/2}$

Inciso a)

Escribir las eigenfunciones de momento angular con $j = 1/2$ y proyección $m_j = 1/2$ de manera simbólica como

$$\begin{aligned}\psi_{2s_{1/2},1/2} &= u_{2s,0}\alpha \\ \psi_{2p_{1/2},1/2} &= c_1 u_{2p,1}\beta + c_2 u_{2p,0}\alpha\end{aligned}$$

Para obtener los coeficientes c_1, c_2 aplicamos el operador $j_+ = l_+ + s_+$ a la segunda función. El resultado de operar en el miembro izquierdo debe de ser cero (¿Por qué?). Demostrar que si se aplica el operador al miembro derecho se obtiene

$$0 = (l_+ + s_+)(c_1 u_{2p,1}\beta + c_2 u_{2p,0}\alpha) = (c_1 + \sqrt{2}c_2)u_{2p,1}\alpha$$

De esta relación y la condición de normalización $c_1^2 + c_2^2 = 1$ obtener c_1, c_2 .

Como dice el enunciado, aplicamos j_+ a ambos lados de la segunda ecuación:

$$j_+(\psi_{2p_{1/2},1/2}) = j_+(c_1 u_{2p,1}\beta) + j_+(c_2 u_{2p,0}\alpha) \quad (1)$$

El lado izquierdo es igual a 0, ya que el operador j_+ en general aumenta en 1 el valor de m_j . Sin embargo $\psi_{2p_{1/2},1/2}$ ya tiene $m_j = 1/2$ y como $j = 1/2$, este es el valor máximo que puede tomar la proyección, por lo que aplicar j_+ no puede aumentar esta proyección en 1. Luego, al igual que en el caso para l_+ visto en clase, aplicar j_+ a una función que ya tiene su proyección al máximo da como resultado 0.

Por otro parte, el lado derecho da igual a:

$$\begin{aligned}j_+(c_1 u_{2p,1}\beta) + j_+(c_2 u_{2p,0}\alpha) &= (l_+ + s_+)(c_1 u_{2p,1}\beta) + (l_+ + s_+)(c_2 u_{2p,0}\alpha) \\ &= c_1 l_+(u_{2p,1}\beta) + c_1 s_+(u_{2p,1}\beta) + c_2 l_+(u_{2p,0}\alpha) + c_2 s_+(u_{2p,0}\alpha)\end{aligned}$$

Podemos calcular cada una de estas operaciones de manera sencilla. Recordamos que l_+ aumenta la proyección m_l en 1 y multiplica por $\sqrt{l(l+1) - m(m+1)}$, es decir, $l_+(u_{l,m}) = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)}u_{l,m+1}$. Entonces tenemos que $l_+(u_{2p,1}\beta) = 0$ (porque $l = m_l = 1$) y $l_+(u_{2p,0}\alpha) = \sqrt{2}u_{2p,1}\alpha$.

Por otro lado, s_+ aplicado a β da como resultado α y s_+ aplicado a α da como resultado 0, por lo que $s_+(u_{2p,1}\beta) = u_{2p,1}\alpha$ y $s_+(u_{2p,0}\alpha) = 0$. Entonces, el resultado que teníamos antes nos da igual a:

$$= c_1 u_{2p,1}\alpha + c_2 \sqrt{2}u_{2p,1}\alpha = (c_1 + \sqrt{2}c_2)u_{2p,1}\alpha$$

Como el lado izquierdo de (1) vale 0 y vimos que el lado derecho vale $(c_1 + \sqrt{2}c_2)u_{2p,1}\alpha$, tenemos entonces que:

$$c_1 + \sqrt{2}c_2 = 0 \Rightarrow c_2 = -1/\sqrt{2} c_1$$

Pero además sabemos que debe de estar normalizado, por lo que $c_1^2 + c_2^2 = 1 \Rightarrow c_1^2 + (-1/\sqrt{2} c_1)^2 = 1 \Rightarrow c_1^2 + \frac{1}{2}c_1^2 = 1 \Rightarrow c_1^2 = \frac{2}{3} \Rightarrow c_1 = \sqrt{\frac{2}{3}}$. Y por lo tanto $c_2 = -1/\sqrt{2} c_1 = -1/\sqrt{2} \sqrt{\frac{2}{3}} = -\sqrt{\frac{1}{3}}$.

Con estos valores podemos reemplazarlos en la expresión de $\psi_{2p_{1/2},1/2}$, tenemos entonces que:

$$\psi_{2p_{1/2},1/2} = \sqrt{\frac{2}{3}}u_{2p,1}\beta - \sqrt{\frac{1}{3}}u_{2p,0}\alpha$$

Inciso b)

Escribir las funciones de onda espaciales u_{2s}, u_{2p} en términos de las funciones radiales R_{nl} y de los armónicos esféricos $Y_{lm_l}(\theta, \phi)$. Calcular los elementos de matriz del término adicional de Stark en la base del inciso (a). Sumar a la diagonal las energías E_{2s} y E_{2p} que se obtienen a campo cero (corrimiento de Lamb Δ_L). Se debe de obtener la matriz de las notas.

Calculamos cada uno de los elementos de la matriz del término de Stark en la base del inciso a). El término de Stark es $-e\vec{\varepsilon}_0 \cdot \vec{r}$ y si el campo eléctrico apunta en la dirección z , esto es igual a $-e\varepsilon_0 z = -e\varepsilon_0 r \cos \theta$. Calculamos cada uno de los elementos de la base $\{\psi_{2s_{1/2},1/2}, \psi_{2p_{1/2},1/2}\}$:

- $\langle \psi_{2s_{1/2},1/2} | -e\varepsilon_0 r \cos \theta | \psi_{2s_{1/2},1/2} \rangle$: Calculamos este elemento directamente usando la definición de ψ y del producto interno:

$$\langle \psi_{2s_{1/2},1/2} | -e\varepsilon_0 r \cos \theta | \psi_{2s_{1/2},1/2} \rangle = \langle u_{2s,0}\alpha | -e\varepsilon_0 r \cos \theta | u_{2s,0}\alpha \rangle$$

Como el operador de Stark no actúa sobre el espín, la parte del espín da directamente $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$

$$\begin{aligned} &= \langle u_{2s,0} | -e\varepsilon_0 r \cos \theta | u_{2s,0} \rangle \\ &= \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi u_{2s,0}^* (-e\varepsilon_0 r \cos \theta) u_{2s,0} r^2 \sin \theta d\theta d\phi dr \end{aligned}$$

Escribimos $u_{2s,0}$ como $R_{20}Y_{00}$.

$$\begin{aligned} &= \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi R_{20}^* Y_{00}^* (-e\varepsilon_0 r \cos \theta) R_{20} Y_{00} r^2 \sin \theta d\theta d\phi dr \\ &= -e\varepsilon_0 \int_0^\infty R_{20}^* R_{20} r^3 dr \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \cos \theta \sin \theta |Y_{00}|^2 d\theta d\phi \end{aligned}$$

Sustituimos la expresión de Y_{00} , que es $1/\sqrt{4\pi}$

$$= -e\varepsilon_0 \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty R_{20}^* R_{20} r^3 dr \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \cos \theta \sin \theta d\theta d\phi$$

En este punto notamos que la integral $\int_0^\pi \cos \theta \sin \theta d\theta$ es igual a $\sin^2 \theta \Big|_0^\pi = \sin^2 \pi - \sin^2 0 = 0$. Como esta integral está multiplicando al resto de la expresión, concluimos que el resultado es 0:

$$\langle \psi_{2s_{1/2},1/2} | -e\varepsilon_0 r \cos \theta | \psi_{2s_{1/2},1/2} \rangle = 0$$

- $\langle \psi_{2p_{1/2},1/2} | -e\varepsilon_0 r \cos \theta \psi_{2p_{1/2},1/2} \rangle$: Calculamos este elemento directamente usando la definición de ψ .

$$\begin{aligned} \langle \psi_{2p_{1/2},1/2} | -e\varepsilon_0 r \cos \theta \psi_{2p_{1/2},1/2} \rangle &= \langle c_1 u_{2p,1} \beta + c_2 u_{2p,0} \alpha | (-e\varepsilon_0 r \cos \theta) (c_1 u_{2p,1} \beta + c_2 u_{2p,0} \alpha) \rangle \\ &= \langle c_1 u_{2p,1} | (-e\varepsilon_0 r \cos \theta) c_1 u_{2p,1} \rangle \langle \beta | \beta \rangle + \langle c_1 u_{2p,1} | (-e\varepsilon_0 r \cos \theta) c_2 u_{2p,0} \rangle \langle \beta | \alpha \rangle \\ &\quad + \langle c_2 u_{2p,0} | (-e\varepsilon_0 r \cos \theta) c_1 u_{2p,1} \rangle \langle \alpha | \beta \rangle + \langle c_2 u_{2p,0} | (-e\varepsilon_0 r \cos \theta) c_2 u_{2p,0} \rangle \langle \alpha | \alpha \rangle \end{aligned}$$

Usamos ahora la ortonormalidad de las funciones de espín

$$= \langle c_1 u_{2p,1} | (-e\varepsilon_0 r \cos \theta) c_1 u_{2p,1} \rangle + \langle c_2 u_{2p,0} | (-e\varepsilon_0 r \cos \theta) c_2 u_{2p,0} \rangle$$

Ahora escribimos $u_{2p,1}$ como $R_{21}Y_{11}$ y $u_{2p,0}$ como $R_{21}Y_{10}$ y nos queda:

$$\begin{aligned} &= \langle c_1 R_{21}Y_{11} | (-e\varepsilon_0 r \cos \theta) c_1 R_{21}Y_{11} \rangle + \langle c_2 R_{21}Y_{10} | (-e\varepsilon_0 r \cos \theta) c_2 R_{21}Y_{10} \rangle \\ &= -e\varepsilon_0 |c_1|^2 \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi R_{21}^* Y_{11}^* r \cos \theta R_{21} Y_{11} r^2 \sin \theta d\theta d\phi dr \\ &\quad - e\varepsilon_0 |c_2|^2 \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi R_{21}^* Y_{10}^* r \cos \theta R_{21} Y_{10} r^2 \sin \theta d\theta d\phi dr \\ &= -e\varepsilon_0 |c_1|^2 \int_0^\infty |R_{21}|^2 r^3 dr \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_{11}|^2 \cos \theta \sin \theta d\theta d\phi \\ &\quad - e\varepsilon_0 |c_2|^2 \int_0^\infty |R_{21}|^2 r^3 dr \int_0^{2\pi} \int_0^\pi |Y_{10}|^2 \cos \theta \sin \theta d\theta d\phi \end{aligned}$$

$$\text{Sustituimos } Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{-i\phi} \text{ y } Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta.$$

$$\begin{aligned} &= -e\varepsilon_0 |c_1|^2 \int_0^\infty |R_{21}|^2 r^3 dr \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{3}{2\pi} \sin^2 \theta \cos \theta \sin \theta d\theta d\phi \\ &\quad - e\varepsilon_0 |c_2|^2 \int_0^\infty |R_{21}|^2 r^3 dr \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \frac{3}{4\pi} \cos^2 \theta \cos \theta \sin \theta d\theta d\phi \end{aligned}$$

$$\text{Notamos que } \int_0^\pi \sin^2 \theta \cos \theta \sin \theta d\theta = \int \sin^3 \theta \cos \theta = \left. \frac{\sin^4 \theta}{4} \right|_0^\pi = 0 - 0 = 0$$

$$\text{y que } \int_0^\pi \cos^2 \theta \cos \theta \sin \theta d\theta = \int_0^\pi \cos^3 \theta \sin \theta d\theta = -\left. \frac{1}{4} \cos^4(\theta) \right|_0^\pi = -\frac{1}{4} + \frac{1}{4} = 0$$

Por lo tanto, las integrales respecto a θ del resultado que teníamos son ambas 0 y entonces el resultado total es 0:

$$\langle \psi_{2p_{1/2},1/2} | -e\varepsilon_0 r \cos \theta \psi_{2p_{1/2},1/2} \rangle = 0$$

- $\langle \psi_{2s_{1/2},1/2} | -e\varepsilon_0 r \cos \theta \psi_{2p_{1/2},1/2} \rangle$: Calculamos este término directamente sustituyendo ψ :

$$\begin{aligned} \langle \psi_{2s_{1/2},1/2} | -e\varepsilon_0 r \cos \theta \psi_{2p_{1/2},1/2} \rangle &= \langle u_{2s,0} \alpha | (-e\varepsilon_0 r \cos \theta) (c_1 u_{2p,1} \beta + c_2 u_{2p,0} \alpha) \rangle \\ &= \langle u_{2s,0} | (-e\varepsilon_0 r \cos \theta) c_1 u_{2p,1} \rangle \langle \alpha | \beta \rangle + \langle u_{2s,0} | (-e\varepsilon_0 r \cos \theta) c_2 u_{2p,0} \rangle \langle \alpha | \alpha \rangle \end{aligned}$$

Usamos la ortonormalidad de las funciones de espín

$$= \langle u_{2s,0} | (-e\varepsilon_0 r \cos \theta) c_2 u_{2p,0} \rangle$$

Sustituimos ahora $u_{2s,0} = R_{20}Y_{00}$ y $u_{2p} = R_{21}Y_{10}$, con lo que obtenemos:

$$\begin{aligned} &= \langle R_{20}Y_{00} | (-e\varepsilon_0 r \cos \theta) c_2 R_{21}Y_{10} \rangle \\ &= \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi R_{20}^* Y_{00}^* (-e\varepsilon_0 r \cos \theta) c_2 R_{21} Y_{10} r^2 \sin \theta d\theta d\phi dr \\ &= -e\varepsilon_0 c_2 \int_0^\infty R_{20}^* r^3 R_{21} dr \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{00}^* Y_{10} \cos \theta \sin \theta d\theta d\phi \end{aligned}$$

La integral radial es simplemente la definición de $z_{2s,2p}$ definida en clase, por lo que nos queda:

$$\begin{aligned}
&= -e\varepsilon_0 c_2 z_{2s,2p} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{00}^* Y_{10} \cos \theta \sin \theta d\theta d\phi \\
&\text{Sustituimos las expresiones de } Y_{00} \text{ y } Y_{10} \\
&= -e\varepsilon_0 c_2 z_{2s,2p} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \cos \theta \sin \theta d\theta d\phi
\end{aligned}$$

Resolvemos la integral $\int_0^\pi \cos \theta \cos \theta \sin \theta d\theta = \int_0^\pi \cos^2 \theta \sin \theta d\theta = \left. -\frac{\cos^3 \theta}{3} \right|_0^\pi = \frac{1}{3} + \frac{1}{3} = \frac{2}{3}$, mientras que la integral respecto a ϕ es trivialmente igual a 2π

$$\begin{aligned}
&= -e\varepsilon_0 c_2 z_{2s,2p} \sqrt{\frac{1}{4\pi}} \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{2}{3} 2\pi \\
&= -\frac{1}{\sqrt{3}} e c_2 \varepsilon_0 z_{2s,2p}
\end{aligned}$$

sustituimos $c_2 = -\frac{1}{\sqrt{3}}$ como fue encontrado en el inciso a) y entonces nos queda:

$$\langle \psi_{2s_{1/2},1/2} | -e\varepsilon_0 r \cos \theta | \psi_{2p_{1/2},1/2} \rangle = \frac{1}{3} e\varepsilon_0 z_{2s,2p}$$

- $\langle \psi_{2p_{1/2},1/2} | -e\varepsilon_0 r \cos \theta | \psi_{2s_{1/2},1/2} \rangle$: Podemos ver que este término es igual al conjugado del anterior, ya que:

$$\begin{aligned}
\langle \psi_{2p_{1/2},1/2} | -e\varepsilon_0 r \cos \theta | \psi_{2s_{1/2},1/2} \rangle &= \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \psi_{2p_{1/2},1/2}^* (-e\varepsilon_0 r \cos \theta) \psi_{2s_{1/2},1/2} r^2 \sin \theta dr d\phi d\theta \\
&= \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \psi_{2p_{1/2},1/2}^* (-e\varepsilon_0 r \cos \theta)^* \psi_{2s_{1/2},1/2} r^2 \sin \theta dr d\phi d\theta \quad , \text{ porque } -e\varepsilon_0 r \cos \theta \text{ es real} \\
&= \langle -e\varepsilon_0 r \cos \theta | \psi_{2p_{1/2},1/2} | \psi_{2s_{1/2},1/2} \rangle \\
&= (\langle \psi_{2s_{1/2},1/2} | -e\varepsilon_0 r \cos \theta | \psi_{2p_{1/2},1/2} \rangle)^*
\end{aligned}$$

Que es el conjugado del resultado anterior, por lo tanto:

$$\langle \psi_{2p_{1/2},1/2} | -e\varepsilon_0 r \cos \theta | \psi_{2s_{1/2},1/2} \rangle = \left(\frac{1}{3} e\varepsilon_0 z_{2s,2p} \right)^* = \frac{1}{3} e\varepsilon_0 z_{2s,2p}$$

El último paso es válido ya que $z_{2s,2p}^* = z_{2s,2p}$ debido a que se define como $z_{2s,2p} = \int_0^\infty R_{20}^* r^3 R_{21} dr$ pero las funciones R_{20} y R_{21} son reales, por lo que conjugar esta expresión no cambia el resultado.

Ya habiendo encontrado estos cuatro términos, podemos escribir la matriz del término de Stark $H_S = -e\varepsilon_0 r \cos \theta$ en la base del inciso a):

$$H_S = \begin{pmatrix} \langle \psi_{2p_{1/2},1/2} | H_S | \psi_{2p_{1/2},1/2} \rangle & \langle \psi_{2p_{1/2},1/2} | H_S | \psi_{2s_{1/2},1/2} \rangle \\ \langle \psi_{2s_{1/2},1/2} | H_S | \psi_{2p_{1/2},1/2} \rangle & \langle \psi_{2s_{1/2},1/2} | H_S | \psi_{2s_{1/2},1/2} \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{3} e\varepsilon_0 z_{2s,2p} \\ \frac{1}{3} e\varepsilon_0 z_{2s,2p} & 0 \end{pmatrix}$$

Ahora sumamos las energías de E_{2s} y E_{2p} a la diagonal para obtener la matriz hamiltoniana entre los estados $2s_{1/2}$ y $2p_{1/2}$. Como no importa el punto en que definamos la energía 0, digamos que el estado $2s_{1/2}$ tiene energía 0 y luego por el corrimiento Lamb, el estado $2p_{1/2}$ tiene energía $-\Delta_L$. Sumamos estos términos a

la diagonal para tener ahora la matriz del hamiltoniano, sumando $-\Delta_L$ a la entrada correspondiente a la energía de $2p_{1/2}$ y no sumando nada a la correspondiente a $2s_{1/2}$:

$$H = \begin{pmatrix} -\Delta_L & \frac{1}{3}e\varepsilon_0 z_{2s,2p} \\ \frac{1}{3}e\varepsilon_0 z_{2s,2p} & 0 \end{pmatrix}$$

Inciso d)

Diagonalizar la matriz que se obtuvo en (b). Obtener sus eigenvalores y eigenfunciones. Hacer un diagrama de los niveles de energía en función del campo eléctrico externo.

Primero obtenemos los eigenvalores de esta matriz, para lo cual calculamos el polinomio característico:

$$\left| \begin{pmatrix} -\Delta_L - \lambda & \frac{1}{3}e\varepsilon_0 z_{2s,2p} \\ \frac{1}{3}e\varepsilon_0 z_{2s,2p} & -\lambda \end{pmatrix} \right| = \lambda(\Delta_L + \lambda) - \frac{1}{9}e^2\varepsilon_0^2 z_{2s,2p}^2 = \lambda^2 + \Delta_L \lambda - \frac{1}{9}e^2\varepsilon_0^2 z_{2s,2p}^2$$

Los eigenvalores son las raíces de este polinomio, que se pueden obtener usando la fórmula cuadrática:

$$\lambda_{1,2} = \frac{-\Delta_L \pm \sqrt{\Delta_L^2 + \frac{4}{9}e^2\varepsilon_0^2 z_{2s,2p}^2}}{2}$$

Estos eigenvalores son entonces las energías de los eigenestados de H (energía medidas respecto a la estado $2s_{1/2}$ sin campo externo, que fue tomada como el 0 de energía). Estas energías son entonces:

$$E_1 = \frac{-\Delta_L - \sqrt{\Delta_L^2 + \frac{4}{9}e^2\varepsilon_0^2 z_{2s,2p}^2}}{2} = \frac{-\Delta_L - \Delta_L \sqrt{1 + \frac{4}{9\Delta_L^2}e^2\varepsilon_0^2 z_{2s,2p}^2}}{2}$$

$$E_2 = \frac{-\Delta_L + \sqrt{\Delta_L^2 + \frac{4}{9}e^2\varepsilon_0^2 z_{2s,2p}^2}}{2} = \frac{-\Delta_L + \Delta_L \sqrt{1 + \frac{4}{9\Delta_L^2}e^2\varepsilon_0^2 z_{2s,2p}^2}}{2}$$

Además, se pueden calcular los eigenvectores normalizados correspondientes, los cuales obtuve en Mathematica usando la función "Eigenvectors". Representaremos como ϕ_1 al eigenvector con eigenvalor E_1 y como ϕ_2 al correspondiente a E_2 :

$$\phi_1 = \left(-\frac{3\Delta_L + \sqrt{9\Delta_L^2 + 4e^2\varepsilon_0^2 z_{2s,2p}^2}}{2e\varepsilon_0 z_{2s,2p} \#}, \frac{1}{\#} \right)^T$$

$$\phi_2 = \left(-\frac{3\Delta_L - \sqrt{9\Delta_L^2 + 4e^2\varepsilon_0^2 z_{2s,2p}^2}}{2e\varepsilon_0 z_{2s,2p} \square}, \frac{1}{\square} \right)^T$$

Donde $\#$ es necesario para normalizar los estados y se define como $\# := \sqrt{1 + \frac{1}{4}Abs \left[\frac{3\Delta_L + \sqrt{9\Delta_L^2 + 4e^2\varepsilon_0^2 z_{2s,2p}^2}}{e\varepsilon_0 z_{2s,2p}} \right]^2}$

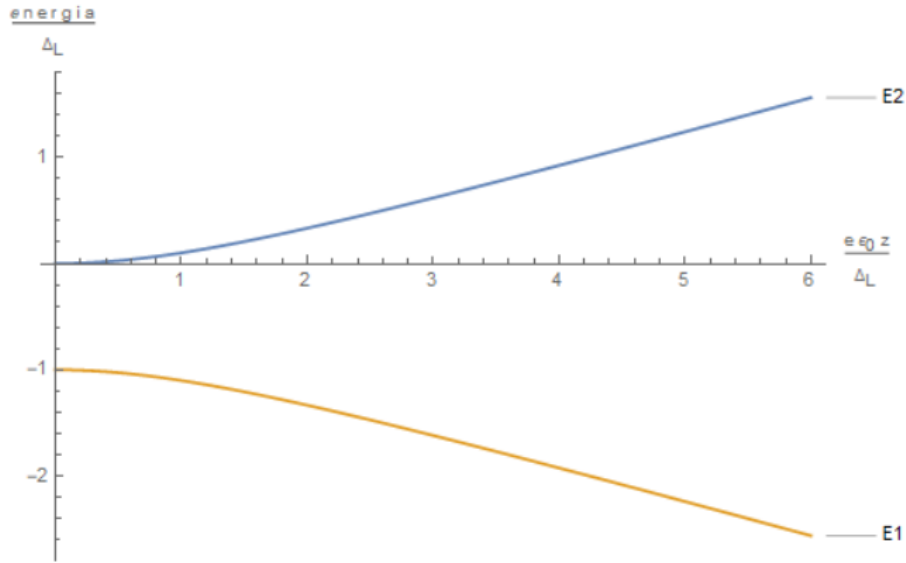
y similarmente se define \square como $\square := \sqrt{1 + \frac{1}{4}Abs \left[\frac{3\Delta_L - \sqrt{9\Delta_L^2 + 4e^2\varepsilon_0^2 z_{2s,2p}^2}}{e\varepsilon_0 z_{2s,2p}} \right]^2}$.

La base ordenada en la que habíamos representado H era $\{\psi_{2p_{1/2},1/2}, \psi_{2s_{1/2},1/2}\}$, por lo que los vectores ϕ_1 y ϕ_2 representan a las siguientes eigenfunciones:

$$\phi_1 = \left(-\frac{3\Delta_L + \sqrt{9\Delta_L^2 + 4e^2\varepsilon_0^2 z_{2s,2p}^2}}{2e\varepsilon_0 z_{2s,2p}\#}, \frac{1}{\#} \right)^T = -\frac{3\Delta_L + \sqrt{9\Delta_L^2 + 4e^2\varepsilon_0^2 z_{2s,2p}^2}}{2e\varepsilon_0 z_{2s,2p}\#} \psi_{2p_{1/2},1/2} + \frac{1}{\#} \psi_{2s_{1/2},1/2}$$

$$\phi_2 = \left(-\frac{3\Delta_L - \sqrt{9\Delta_L^2 + 4e^2\varepsilon_0^2 z_{2s,2p}^2}}{2e\varepsilon_0 z_{2s,2p}\square}, \frac{1}{\square} \right)^T = -\frac{3\Delta_L - \sqrt{9\Delta_L^2 + 4e^2\varepsilon_0^2 z_{2s,2p}^2}}{2e\varepsilon_0 z_{2s,2p}\square} \psi_{2p_{1/2},1/2} + \frac{1}{\square} \psi_{2s_{1/2},1/2}$$

Graficamos ahora las energías E_1, E_2 obtenidas antes para el hamiltoniano H como funciones del campo externo ε_0 para ver como cambia la energía respecto al campo. Para que la gráfica sea adimensional, en el eje horizontal pondremos $\frac{e\varepsilon_0 z_{2s,2p}}{\Delta_L}$ y en el eje vertical $\frac{E}{\Delta_L}$. Con ello, podremos graficar las energías E_1, E_2 de los eigenestados de H como funciones de ε_0 . Realicé la gráfica en Mathematica y el resultado se muestra a continuación:



Donde como se mencionó antes, la energía 0 se define como la energía del estado $\psi_{2s_{1/2},1/2}$.

Inciso e)

Comprobar que la solución obtenida tiene el comportamiento esperado en los límites $\varepsilon_0 \rightarrow 0$ y $\varepsilon_0 \rightarrow \infty$, donde ε_0 es el campo externo.

En la figura anterior ya se graficaron las energías como funciones del campo eléctrico y podemos revisar su comportamiento para $\varepsilon_0 \rightarrow 0$ y $\varepsilon_0 \rightarrow \infty$.

- $\varepsilon_0 \rightarrow 0$:

Por la gráfica anterior, podemos ver que cuando $\varepsilon_0 \rightarrow 0$ las energías son $E_2 = 0$ y $E_1 = -\Delta_L$. Esto tiene sentido, pues son las energías de los estados $\psi_{2s_{1/2},1/2}$ y $\psi_{2p_{1/2},1/2}$, que se encuentran separados por la separación de Lamb Δ_L , con el estado $\psi_{2p_{1/2},1/2}$ por debajo del $\psi_{2s_{1/2},1/2}$. Esto coincide con lo esperado, pues sabemos que son las energías que se tienen para campo eléctrico 0.

-
- $\varepsilon_0 \rightarrow \infty$:

En este caso, siguiendo la gráfica anterior, se puede ver que las energías tienden a $E_1 \rightarrow -\infty$ y $E_2 \rightarrow \infty$. Es decir, las energías se separan cada vez más, esto se debe a que uno de los estados tiene en general una polarización más alineada con el campo eléctrico que el otro estado, lo que le da más energía.

Problema 2

Calcular los factores g_J de Landé de los estados base de los siguientes átomos: níquel ($3d^8 4s^2$), molibdeno ($4d^5 5s$) y gadolinio ($4f^7 5d 6s^2$). Hacer un diagrama del comportamiento de los niveles de energía en función del campo magnético externo para campos pequeños.

En clase vimos que el factor de Landé se define como

$$g_J = \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1) + g_s[J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)]}{2J(J+1)} \quad (1)$$

donde J es el número cuántico de momento angular total, L el de momento angular orbital total y S el de espín total.

Entonces lo que hacemos es encontrar el estado base de cada uno de los átomos que nos preguntan usando las reglas de Hund y luego calcular su factor de Landé según esta ecuación.

- **Níquel** ($3d^8 4s^2$)

Primero buscamos el término de mínima energía para esta configuración. Tenemos 8 electrones en la capa $3d$ (que es una capa que tiene 10 lugares para electrones, con proyecciones $m_l = -2, -1, 0, 1, 2$ y $m_s = \pm 1/2$) y las otras capas están llenas.

Según la primera regla de Hund, el término de mínima energía maximiza la proyección de espín. Entonces los 8 electrones de la capa $3d$ deben de estar de tal forma que 5 de ellos tengan espín $+1/2$ y los otros 3 tengan espín $-1/2$, por lo que la proyección de espín total es $M_S = 5(1/2) - 3(1/2) = 1$.

Luego, según la segunda regla, de entre todos los microestados que maximicen M_S , el del estado base maximiza también M_L . Los 5 electrones con espín hacia arriba necesariamente están en los estados $(-2^+, -1^+, 0^+, 1^+, 2^+)$, pero los 3 con espín hacia abajo los podemos escoger de tal forma que maximicen M_L , lo cual se consigue si están en $(0^-, 1^-, 2^-)$. Por lo tanto, un microestado con mínima energía es $(-2^+, -1^+, 0^+, 1^+, 2^+, 0^-, 1^-, 2^-)$.

Este microestado tiene proyecciones $M_S = 1$ y $M_L = -2 - 1 + 0 + 1 + 2 + 0 + 1 + 2 = 3$. Como es el estado que maximiza M_S y luego M_L , sabemos que su término correspondiente tiene que ser $S = 1$, $L = 3$, que se representa como 3F .

Luego, los valores que puede tomar J van desde $|L - S| = |3 - 1| = 2$ hasta $L + S = 3 + 1 = 4$. Según la tercera regla de Hund, como la capa $3d$ está llena más de la mitad, el término que minimiza la energía es el de mayor J , por lo que concluimos que el término base es 3F_4 .

Calculamos ahora su factor de Landé sustituyendo L, S, J en la definición (1):

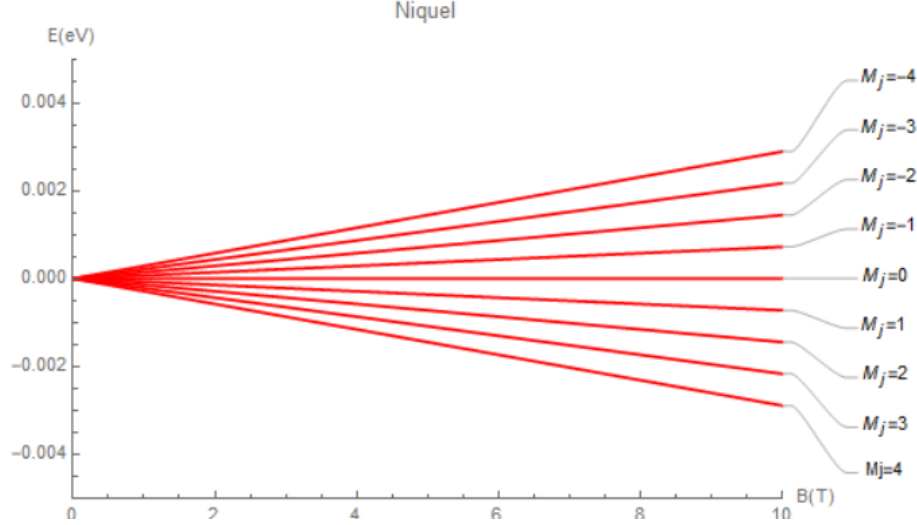
$$\begin{aligned} g_J &= \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1) + g_s[J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)]}{2J(J+1)} \\ &= \frac{4(4+1) + 3(3+1) - 1(1+1) + 2[4(4+1) - 3(3+1) + 1(1+1)]}{2(4)(4+1)} \\ &= \boxed{\frac{5}{4}} \end{aligned}$$

En clase vimos que los niveles de energía en presencia de un campo magnético externo dependen de la

proyección M_J y se calculan como:

$$\begin{aligned} E_Z(M_J) &= -g_J \mu_B M_J B \\ &= -\frac{5}{4} \mu_B M_J B \end{aligned}$$

En nuestro caso tenemos $J = 4$, por lo que las proyecciones pueden ser $M_J = -4, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, 4$ y se consigue así un desdoblamiento en 9 partes. Hacemos una gráfica de estas energías como función del campo magnético B para cada una de las 9 proyecciones M_J .



- **Molibdeno** ($4d^5 5s$)

Primero buscamos el término de mínima energía para esta configuración. Tenemos 5 electrones en la capa $4d$ (que es una capa que tiene 10 lugares para electrones, con proyecciones $m_l = -2, -1, 0, 1, 2$ y $m_s = \pm 1/2$) y un electrón en la capa $5s$ (que es una capa con dos lugares para electrones, con proyecciones $m_l = 0$ y $m_s = \pm 1/2$).

Según la primera regla de Hund, el término de mínima energía maximiza la proyección de espín. Entonces los 5 electrones de la capa $4d^5$ deben de estar todos con espín hacia arriba, es decir, ocupan el microestado $(-2^+, -1^+, 0^+, 1^+, 2^+)$ y el electrón de $5s$ también debe de tener espín hacia arriba, ocupando el estado 0^+ . Vemos que este microestado es el único posible para maximizar la proyección de espín, por lo que no hace falta tomar en cuenta la segunda regla de Hund.

Por lo tanto, la proyección de espín total del sistema es la suma de todas: $M_S = 1/2 + 1/2 + 1/2 + 1/2 + 1/2 + 1/2 = 3$ y la proyección de momento angular es $M_L = -2 - 1 + 0 + 1 + 2 + 0 = 0$. Como este microestado maximiza la proyección de espín, y después de momento angular orbital, podemos concluir que su término correspondiente es $S = 3, L = 0$, que se representa como $^{2S+1}S = ^7S$. Además, este término sólo tiene un valor de J posible, que es 3, pues la J se tiene que encontrar entre $|S - L| = |3 - 0| = 3$ y $S + L = 3 + 0 = 3$. Por lo que el término base es 7S_3 .

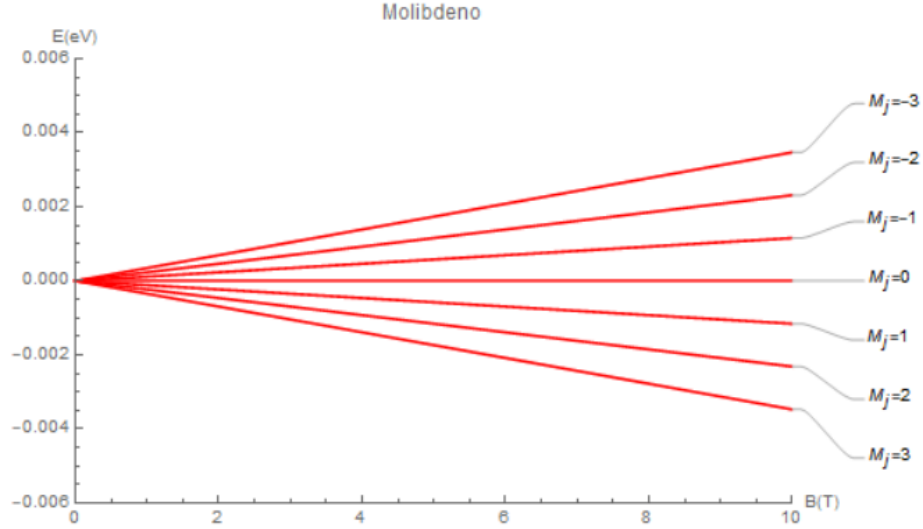
Calculamos ahora su factor de Landé sustituyendo L, S, J en la definición (1):

$$\begin{aligned} g_J &= \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1) + g_s[J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)]}{2J(J+1)} \\ &= \frac{3(3+1) + 0(0+1) - 3(3+1) + 2[3(3+1) - 0(0+1) + 3(3+1)]}{2(3)(3+1)} \\ &= \boxed{2} \end{aligned}$$

En clase vimos que los niveles de energía en presencia de un campo magnético externo dependen de la proyección M_J y se calculan como:

$$\begin{aligned} E_Z(M_J) &= -g_j \mu_B M_J B \\ &= -2 \mu_B M_J B \end{aligned}$$

En nuestro caso tenemos $J = 3$, por lo que las proyecciones pueden ser $M_J = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$ y se consigue así el desdoblamiento. Hacemos una gráfica de estas energías como función del campo magnético B para cada una de las 7 proyecciones M_J .



- **Gadolinio** ($4f^7 5d 6s^2$)

Primero buscamos el término de mínima energía para esta configuración. Tenemos 7 electrones en la capa $4f$ (que tiene 14 lugares para electrones, con proyecciones $m_l = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$ y $m_s = \pm 1/2$), 1 electrón en la capa $5d$ (que tiene 10 lugares con proyecciones $m_l = -2, -1, 0, 1, 2$ y $m_s = \pm 1/2$) y las demás capas llenas.

Según la primera regla de Hund, el término de mínima energía maximiza la proyección de espín. Entonces los 7 electrones de la capa $4f$ deben de estar en los estados con espín hacia arriba, por lo que están en el microestado $(-3^+, -2^+, -1^+, 0^+, 1^+, 2^+, 3^+)$ y el electrón de $5d$ también tiene espín hacia arriba. Además, por la segunda regla de Hund, se debe de maximizar L , por lo que el electrón $5d$ se tiene que encontrar en 2^+ .

Por lo tanto, el microestado completo de los 8 electrones es $(-3^+, -2^+, -1^+, 0^+, 1^+, 2^+, 3^+, 2^+)$.

Este microestado tiene proyecciones $M_S = 8(1/2) = 4$ y $M_L = -3 - 2 - 1 + 0 + 1 + 2 + 3 + 2 = 2$. Como es el estado que maximiza M_S y luego M_L , sabemos que su término correspondiente tiene que ser $S = 4$, $L = 2$, que se representa como 9D .

Luego, los valores que puede tomar J van desde $|L - S| = |2 - 4| = 2$ hasta $L + S = 2 + 4 = 6$. Según la tercera regla de Hund, como la capa $5d$ está llena hasta menos de la mitad, el término que minimiza la energía es el de menor J , por lo que concluimos que el término base es 9D_2 .

Calculamos ahora su factor de Landé sustituyendo L, S, J en la definición (1):

$$\begin{aligned}
 g_J &= \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1) + g_s[J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)]}{2J(J+1)} \\
 &= \frac{2(2+1) + 2(2+1) - 4(4+1) + 2[2(2+1) - 2(2+1) + 4(4+1)]}{2(2)(2+1)} \\
 &= \boxed{\frac{8}{3}}
 \end{aligned}$$

En clase vimos que los niveles de energía en presencia de un campo magnético externo dependen de la proyección M_J y se calculan como:

$$\begin{aligned}
 E_Z(M_J) &= -g_J \mu_B M_J B \\
 &= -\frac{8}{3} \mu_B M_J B
 \end{aligned}$$

En nuestro caso tenemos $J = 2$, por lo que las proyecciones pueden ser $M_J = -2, -1, 0, 1, 2$ y se consigue así el desdoblamiento. Hacemos una gráfica de estas energías como función de B para cada una de las 5 proyecciones M_J .

