



PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE CHILE  
FACULTAD DE FÍSICA - INSTITUTO DE FÍSICA  
FIZ0412 - FÍSICA CUÁNTICA II  
PROFESOR: RAFAEL BENGURIA (rbenguri@fis.puc.cl)  
AYUDANTES: FELIPE PINTO (frpinto@uc.cl)  
FERNANDA CORREA (fpazcorrea@uc.cl)

# Resumen Física Cuántica II

## 2021 -1

---

### ■ Teoría de perturbaciones

Los problemas para los que podemos resolver exactamente la ecuación de Schrödinger son pocos. Una de las principales estrategias que utilizamos para atacar problemas no exactamente solubles es la Teoría de Perturbaciones, que consiste en un procedimiento sistemático para obtener soluciones aproximadas para el problema perturbado, construyendo sobre las soluciones exactas conocidas del caso no perturbado.

Lo que hacemos es considerar que sabemos resolver la ecuación de Schrödinger para algún potencial:

$$H^0 \psi_n^0 = E_n^0 \psi_n^0$$

Y nos gustaría encontrar las funciones y valores propios de un potencial perturbado:

$$H \psi_n = E_n \psi_n$$

Para esto, escribimos el nuevo (verdadero) hamiltoniano como:

$$H = H^0 + \lambda H'$$

Donde  $H'$  es la perturbación y  $\lambda$  es la constante de acoplamiento (un número pequeño)

Además, escribimos  $\psi_n$  y  $E_n$  como una serie de potencias de  $\lambda$ :

$$\begin{aligned}\psi_n &= \psi_n^0 + \lambda \psi_n^1 + \lambda^2 \psi_n^2 \dots \\ E_n &= E_n^0 + \lambda E_n^1 + \lambda^2 E_n^2 \dots\end{aligned}$$

## ■ Ecuaciones Importantes

Luego de reemplazar las expresiones en la ecuación de Schrödinger y resolver, encontramos las siguientes ecuaciones para las correcciones a la energía<sup>1</sup>:

$$E_n^1 = \langle \psi_n^0 | H' | \psi_n^0 \rangle = V_{nn} \quad (1)$$

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} = \sum_{m \neq n} \frac{|V_{nm}|^2}{\Delta_{nm}} \quad (2)$$

$$E_n^3 = \sum_{l, m \neq n} \frac{V_{nl} V_{lm} V_{mn}}{\Delta_{nl} \Delta_{nm}} - V_{nn} \sum_{m \neq n} \frac{|V_{nm}|^2}{\Delta_{nm}^2} \quad (3)$$

Aunque con la Teoría de perturbaciones podemos obtener energías sorprendentemente precisas, no tenemos la misma suerte con las funciones de onda. De todas formas, la corrección a primer orden para la función de onda está dada por:

$$\psi_n^1 = \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_m^0 | H' | \psi_n^0 \rangle}{(E_n^0 - E_m^0)} \psi_m^0 \quad (4)$$

## ■ Recordatorio átomo de hidrógeno

En el curso de Física Cuántica I vimos que el Hamiltoniano para el átomo de Hidrógeno era:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} \quad (5)$$

Luego de aplicar el método de separación de variables para resolver la ecuación de Schrödinger tridimensional y tras un arduo análisis matemático llegamos a la función de onda que describe el átomo de Hidrógeno:

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (6)$$

Donde las energías permitidas vienen dadas por:

$$E_n = -\frac{m}{2\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2} = \frac{E_1}{n^2} \quad E_1 = -13,6eV \quad (7)$$

## ■ Corrección Relativista

En las expresiones anteriores, para construir el Hamiltoniano considerábamos la energía cinética **clásica**; sin embargo, si consideramos la energía cinética **relativista** en términos del momentum relativista tenemos:

$$T = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4} - mc^2 \quad (8)$$

---

<sup>1</sup>Una afirmación importante de recordar es: “La corrección a primer orden de la energía es el valor de expectación de la perturbación en el estado no perturbado”

En el límite no relativista<sup>2</sup>, podemos expandir en serie la expresión anterior, de modo que nos queda:

$$T = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_H - \underbrace{\frac{p^4}{8m^3c^2}}_{H'_r} + \dots \quad (9)$$

Usando teoría de perturbaciones a primer orden tomando  $H' = H'_r$  y desarrollando la expresión en función de variables conocidas tenemos que la corrección relativista a primer orden para la energía del átomo de hidrógeno viene dada por:

$$E_r^1 = -\frac{(E_n)^2}{2mc^2} \left[ \frac{4n}{l+1/2} - 3 \right] \quad (10)$$

Pese a que el átomo de hidrógeno es altamente degenerado, usamos teoría de perturbaciones para estados no degenerados debido a que las funciones  $\Psi_{nlm}$  son “buenos” estados para este problema (o bien,  $n$ ,  $l$  y  $m$  son los “buenos” números cuánticos)

## ■ Acoplamiento Spin-Órbita

La corrección por el acoplamiento spin-órbita nace debido a la interacción magnética entre el núcleo y el electrón que orbita alrededor. Desde el punto de vista del electrón, el protón gira a su alrededor y se genera un campo magnético ( $B$ ) que ejerce un torque sobre el giro del electrón, tendiendo a alinear su momento magnético ( $\mu$ ) en la dirección del campo. El hamiltoniano de esta interacción viene dado por:

$$H = -\mu B \quad (11)$$

Reemplazando las expresiones para  $B$  y  $\mu$ , nos queda que el hamiltoniano de la interacción spin-órbita es:

$$H'_{SO} = \left( \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{m^2c^2r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (12)$$

En este caso los buenos estados son los estados propios de  $L^2$ ,  $S^2$ ,  $J^2$  y  $J_z^2$

Reescribiendo el Hamiltoniano en función de estos estados y considerando  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2}(J^2 - L^2 - S^2)$  nos queda:

$$E_{SO}^1 = \langle H'_{SO} \rangle = \frac{(E_n)^2}{mc^2} \left\{ \frac{n[j(j+1) - n(l+1) - 3/4]}{l(l+1/2)(l+1)} \right\} \quad (13)$$

## ■ Estructura Fina

Finalmente, considerando ambas correcciones tenemos:

$$E_{fs}^1 = \frac{(E_n)^2}{2mc^2} \left( 3 - \frac{4n}{j+1/2} \right) \quad (14)$$

Considerando la constante de estructura fina  $\alpha$ :

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \quad (15)$$

---

<sup>2</sup>La energía cinética del electrón en el átomo de hidrógeno es minúscula comparada con la energía de reposo, por lo que el átomo de hidrógeno es básicamente no relativista y podemos quedarnos en una corrección a bajo orden.

Podemos escribir la fórmula para los niveles de energía del hidrógeno, incluyendo la estructura fina, como:

$$E_{nj} = -\frac{13,6 \text{ eV}}{n^2} \left[ 1 + \frac{\alpha^2}{n^2} \left( \frac{n}{j+1/2} - \frac{3}{4} \right) \right] \quad (16)$$

## ■ Efecto Zeeman

Cuando un átomo está inmerso en un campo magnético externo uniforme ( $B_{ext}$ ), sus niveles de energía degenerados se separan. El hamiltoniano de esta perturbación viene dado por

$$H'_Z = -(\mu_l + \mu_s) B_{ext} \quad (17)$$

Donde  $\mu_s$  es el momento magnético dipolar asociado con el spin del electrón y  $\mu_l$  es el momento dipolar asociado con el movimiento orbital

$$\mu_s = -\frac{e}{m}S \quad \mu_l = -\frac{e}{2m}L \quad (18)$$

De este modo tenemos

$$H'_Z = \frac{e}{2m}(L + 2S) B_{ext} \quad (19)$$

La naturaleza del *splitting* de Zeeman depende de la intensidad del campo externo en relación a la intensidad del campo interno, que es el que da origen al acoplamiento spin-órbita. Podemos distinguir dos casos extremos.

- **Zeeman Débil** ( $\mathbf{B}_{ext} \ll \mathbf{B}_{int}$ ) : La estructura fina domina y consideramos el efecto Zeeman como una perturbación.

En este caso tenemos que los “buenos” números cuánticos son  $n$ ,  $l$ ,  $j$  y  $m_j$ . Con esto tenemos:

$$E_Z^1 = \langle n \ l \ j \ m_j | H'_Z | n \ l \ j \ m_j \rangle = \frac{e}{2m} B_{ext} \langle L + 2S \rangle \quad (20)$$

Considerando

$$\langle L + 2S \rangle = \underbrace{\left[ 1 + \frac{j(j+1) - l(l+1) + 3/4}{2j(j+1)} \right]}_{\text{Factor de Landé } (g_j)} \langle J \rangle$$

Si elegimos fijar el campo externo en la dirección del eje  $z$  obtenemos

$$E_Z^1 = \mu_B g_J B_{ext} m_j \quad (21)$$

con  $\mu_B$  el magnetón de Bohr ( $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ ).

- **Zeeman Fuerte** ( $\mathbf{B}_{ext} \gg \mathbf{B}_{int}$ ) : El efecto Zeeman domina y consideramos la estructura fina como una perturbación.

En el caso de efecto Zeeman Fuerte los “buenos” números cuánticos son  $n$ ,  $l$ ,  $m_j$  y  $m_s$ .

Si fijamos  $B_{ext}$  en la dirección del eje  $z$  tenemos:

$$H'_Z = \frac{e}{2m} B_{ext} (L_z + 2S_z) \quad (22)$$

Si ignoramos la contribución de la estructura fina resulta

$$E_{n,m_l,m_s} = -\frac{13,6eV}{n^2} + \mu_B B_{ext}(m_l + 2m_s) \quad (23)$$

Sin embargo, considerando la estructura fina como una perturbación y recordando que  $\langle S \cdot L \rangle = \hbar^2 m_l m_s$  tenemos:

$$E_{fs}^1 = \frac{13,6eV}{n^3} \alpha^2 \left\{ \frac{3}{4n} - \left[ \frac{l(l+1) - m_l m_s}{l(l+1/2)(l+1)} \right] \right\} \quad (24)$$

## ■ Estructura hiperfina

El protón en sí mismo constituye un dipolo magnético y debido a esto, el momento magnético dipolar del núcleo genera un campo magnético que resulta en un efecto Zeeman permanente. Tenemos

$$\mu_p = \frac{g_p e}{2m_p} S_{pe} = -\frac{e}{2m} S_e! \quad (25)$$

Donde  $g_p = 5,59$ . Si consideramos los estados con  $l = 0$ , tenemos que la corrección a primer orden de la energía debido a este efecto es

$$E_{hf}^1 = \frac{\mu_0 g_p e^2}{3\pi m_p m_e a^3} \langle S_p \cdot S_e \rangle \quad (26)$$

Donde  $S_p \cdot S_e = \frac{1}{2}(S^2 - S_e^2 - S_p^2)$ . Para el *Ground-State* del hidrógeno la estructura hiperfina genera una transición desde el triplete al singlete, cuyo gap de energía es

$$\Delta E_H = \frac{4g_p \hbar^4}{3m_p m_e^2 c^2 a^4} \quad (27)$$

Cuya longitud de onda asociada luego de evaluar numéricamente es  $\lambda_H = 21cm$

## ★Astrotema: La línea de 21cm ★

En el gas de hidrógeno neutro el estado  $J=1$  no puede ser excitado por radiación ordinaria debido a una regla de selección que suprime fuertemente las transiciones en las que no hay cambio en el momentum angular orbital. Sin embargo, este estado puede excitarse por colisiones y podemos detectar cuando retorna al estado  $J=0$ . La línea espectral que se genera es ópticamente delgada, lo que permite observar a través de toda la galaxia, tal que en la misma línea de visión podemos ver distintas nubes de hidrógeno neutro ubicadas a distintas distancias. Esto por ejemplo nos permite conocer la estructura de nuestra galaxia, al considerar que la velocidad relativa entre las nubes de gas y nosotros produce efecto Doppler, con lo que podemos distinguir los distintos brazos espirales en función de dicha velocidad. Conociendo también la curva de rotación de la galaxia podemos reconstruir un “mapa” de nuestra galaxia.

## ■ Método de aproximación WKB

La aproximación WKB es un método para obtener soluciones aproximadas a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en una dimensión. Es particularmente útil para calcular las energías de estados ligados y tasas de *tunneling* a través de barreras de potencial. El método se basa en la idea de asumir un potencial que varía lentamente en comparación a  $\lambda$ , de manera que en una región que incluya varias longitudes de onda, el potencial es esencialmente constante. Esta idea falla en la vecindad de los puntos de retorno, donde  $E \approx V$ , debido a que en estos puntos  $\lambda$  (o  $1/\kappa$ ) tienden a infinito y no se puede decir que el potencial varíe lentamente en comparación.

Para utilizar este método, distinguimos 3 zonas:

- **Zona permitida clásicamente**

En esta zona  $E > V(x)$  y definimos

$$p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]} \quad \psi(x) = A(x)e^{i\phi(x)} \quad (28)$$

Con un poco de álgebra llegamos a

$$\phi(x) = \pm \frac{1}{\hbar} \int p(x) dx \quad \Rightarrow \quad \Psi(x) \approx \frac{C}{\sqrt{p(x)}} e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int p(x) dx} \quad (29)$$

- **Zona prohibida clásicamente (Tunneling)**

En esta zona  $E < V(x)$  y por lo tanto  $p(x)$  es imaginario, de manera que

$$\Psi(x) \approx \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\pm \frac{1}{\hbar} \int |p(x)| dx} \quad (30)$$

- **Región intermedia**

Cerca de los puntos de retorno debemos analizar con mayor profundidad el problema. Luego de este análisis llegamos a las fórmulas de conexión

$$\psi(x) \approx \begin{cases} \frac{2D}{\sqrt{p(x)}} \sin \left[ \frac{1}{\hbar} \int_x^{x_2} p(x') dx' + \frac{\pi}{4} \right] & \text{si } x < x_2 \\ \frac{D}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left[ -\frac{1}{\hbar} \int_{x_2}^x |p(x')| dx' \right] & \text{si } x > x_2 \end{cases} \quad (31)$$

## ■ Solución de la ecuación de Schrödinger para un potencial central

Utilizando el método de separación de variables llegamos a

$$\Psi(r, \theta, \psi) = \underbrace{R_l(r)}_{\frac{u(r)}{r}} \underbrace{Y_l^m(\theta, \psi)}_{\text{Esféricos Armónicos}} \quad (32)$$

Donde la parte radial satisface

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u}{dr^2} + \underbrace{\left[ V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right]}_{V_{eff}} u = Eu \quad (33)$$

## ■ Scattering Cuántico - *Descomposición en ondas parciales*

La primera aproximación que hacemos al problema de scattering cuántico consiste en la descomposición en ondas parciales. Para esto determinamos 3 zonas:

- **Zona de Scattering (ZS)**

- **Zona de radiación (ZR):**

Esta zona satisface  $kr \gg 1$  y  $r \gg \lambda$ . En esta zona podemos decir que el potencial efectivo es cero y por lo tanto la ecuación radial nos queda como

$$-u'' = k^2 u \quad (34)$$

Considerando la física del problema, consideramos que la solución a la ecuación radial consiste en una onda esférica *outgoing* de la forma

$$R(r) \sim \frac{e^{ikr}}{r} \quad (35)$$

- **Zona Intermedia (ZI):**

En esta zona consideramos que  $V(r)$  es muy pequeño en comparación con  $\frac{l(l+1)}{r^2}$ , de modo que nos queda que la ecuación radial corresponde a la ecuación de Bessel esférica

$$-u_l'' + \frac{l(l+1)}{r^2} u_l = k^2 u \quad (36)$$

Esto nos deja con una solución de la forma

$$R_l(r) = \frac{u_l(r)}{r} = A j_l(kr) + B \eta_l(kr) \quad (37)$$

Donde  $j_l$  son las funciones esféricas de Bessel de orden  $l$  (Bessel de primera clase) y  $\eta_l$  son las funciones de Neumann de orden  $l$  (o Bessel de segunda clase)

Estas funciones son de la forma

$$\begin{aligned} j_l(x) &= (-x)^l \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \left( \frac{\sin x}{x} \right) \\ \eta_l(x) &= -(-x)^l \left( \frac{1}{x} \frac{d}{dx} \right)^l \left( \frac{\cos x}{x} \right) \end{aligned} \quad (38)$$

Nos interesarán particularmente las funciones con  $l = 0$

$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x} \quad \eta_0(x) = -\frac{\cos x}{x} \quad (39)$$

## ■ Conexión ZR con ZI - Amplitud de ondas parciales

Para conectar ambas zonas debemos introducir las funciones esféricas de Hankel de primera y segunda clase

$$\begin{aligned} h_l^{(1)} &= j_l(x) + i\eta_l(x) \\ h_l^{(2)} &= j_l(x) - i\eta_l(x) \end{aligned} \quad (40)$$

El comportamiento de estas funciones para valores de  $x$  grandes es:

$$\begin{aligned} h_l^{(1)} &\approx \frac{\cos x}{x} + i \frac{\sin x}{x} = \frac{e^{ix}}{x} (-i)^{l+1} \\ h_l^{(2)} &\approx \frac{e^{-ix}}{x} (-i)^{l+1} \end{aligned} \quad (41)$$

Tenemos entonces que para que el comportamiento de la solución radial sea coherente con el que encontramos en la zona de radiación, la solución radial es de la forma

$$R_l(r) = F h_l^{(1)}(kr) \quad (42)$$

Con esto luego de un análisis de la simetría del problema respecto al ángulo  $\psi$ , tenemos que la solución a la ecuación de Schrödinger es de la forma

$$\Psi(r, \theta) = A \left\{ e^{ikz} + k \sum_{l=0}^{\infty} i^{l+1} (2l+1) a_l h_l^{(1)}(kr) P_l(\cos \theta) \right\} \quad (43)$$

Donde los  $a_l$  son las amplitudes de onda parciales. Considerando el comportamiento asintótico de la solución podemos encontrar expresiones para los parámetros de scattering

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) a_l P_l(\cos \theta) \\ \sigma &= 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) |a_l|^2 \end{aligned} \quad (44)$$

Para ser consistentes con la notación (i.e. usar las mismas coordenadas), reescribimos la solución general completamente en términos de  $r$  y  $\theta$

$$\Psi(r, \theta) = A \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \left[ j_l(kr) + ik a_l h_l^{(1)}(kr) \right] P_l(\cos \theta) \quad (45)$$

### ■ Forma Integral de la ecuación de Schrödinger

$$\Psi(r) = \Psi_0(r) - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int \frac{e^{ik|r-r_0|}}{|r-r_0|} V(r_0) \Psi(r_0) d^3r_0 \quad (46)$$

### ■ Primera Aproximación de Born

Suponemos que la onda incidente no es sustancialmente alterada por el potencial y llegamos a que la amplitud de scattering en la aproximación de Born está dada por:

$$f(\theta, \phi) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}_0} V(\mathbf{r}_0) d^3\mathbf{r}_0 \quad (47)$$



Donde  $\mathbf{k} = k\hat{r}$  y  $\mathbf{k}' = k\hat{z}$ . Para scattering de baja energía podemos desechar la exponencial pues no tiene mucha influencia en la región de scattering, luego:

$$f(\theta, \phi) \cong -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int V(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \quad (48)$$

Para potenciales esféricamente simétricos,  $V(\mathbf{r}) = V(r)$ , pero no necesariamente a bajas energías, la aproximación de Born reduce el problema a una forma más simple. Definimos

$$\vec{\kappa} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} \quad (49)$$

Y fijamos que el eje polar de la integral en  $\mathbf{r}_0$  coincida con  $\vec{\kappa}$ , de manera que

$$(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}_0 = \kappa r_0 \cos\theta_0 \quad (50)$$

Con esto llegamos a

$$f(\theta) \cong -\frac{2m}{\hbar^2\kappa} \int_0^\infty r V(r) \sin(\kappa r) dr \quad (51)$$

La dependencia angular de  $f(\theta)$  la acarrea  $\kappa$ :

$$\kappa = 2k \sin(\theta/2) \quad (52)$$