

# SOLUCIONES HOJA 1

## MOMENTO ANGULAR

① Nos dan dos vectores unitarios  $\vec{u}$  y  $\vec{v}$ , y las proyecciones de  $\vec{L}$  sobre ellos:  $L_u = \vec{u} \cdot \vec{L}$ ,  $L_v = \vec{v} \cdot \vec{L}$ .

②  $c = [L_u, L_v]$

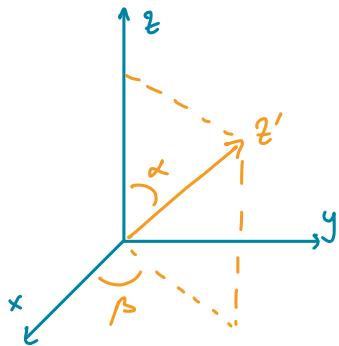
Usamos la linealidad de  $[ , ]$  y  $[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k$ :

$$c = \sum_{i,j} u_i v_j [L_i, L_j] = i\hbar \sum_{i,j,k} \epsilon_{ijk} u_i v_j L_k = i\hbar (\vec{u} \times \vec{v}) \cdot \vec{L}$$

③  $c = 0 \nabla \vec{L} \Rightarrow u$  y  $v$  son  $\parallel$  [no existen dos ejes cuyo  $L_i$  commute]

$$c = i\hbar L_z \Rightarrow \vec{u} \times \vec{v} = \hat{k} \Rightarrow \begin{cases} \vec{u} = \vec{i} \\ \vec{v} = \vec{j} \end{cases} \quad [\text{máximo del commutador}]$$

②



Demostrar que para un autoestádo de  $L_z$   
 $L_z \psi = m\hbar \psi$

tenemos

$$\langle L_z' \rangle = \langle \psi | L_z' | \psi \rangle = m\hbar \cos\alpha$$

Como  $\psi$  es autoestádo de  $L_z$ , sabemos que  $L_{\pm}\psi$  será un autoestádo de  $L_z$  con  $m \pm 1$ , o sea orthogonal a  $\psi$ . Por tanto:

$$\langle L_z \rangle = m\hbar$$

$$\langle L_{\pm} \rangle = \langle \psi | L_{\pm} | \psi \rangle = 0 \Rightarrow \langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$$

Y el nuevo operador en función de los que ya conocemos

$$L_z' = \sin\alpha \cos\beta L_x + \sin\alpha \sin\beta L_y + \cos\alpha L_z$$

Por tanto

$$\langle L_z' \rangle = \sin\alpha \cos\beta \langle L_x \rangle + \sin\alpha \sin\beta \langle L_y \rangle + \cos\alpha \langle L_z \rangle = m\hbar \cos\alpha$$

↳ Igual que la predicción clásica, que es la proyección, pero recordemos que cada medida individual nos seguirá dando algo discreto.

③ Demostrar que para  $|j,m\rangle$  la mayor precisión para  $J_{x,y}$  se obtiene para  $|m|=j$ .

Como  $J_{x,y}$  no comutan con  $J_z$ , sabemos que si tenemos un autovector de  $J_z$  ( $J_z|j,m\rangle = m|j,m\rangle$ ), en general no será autovector de  $J_{x,y}$ . Por tanto, nos esperamos que su medida venga con una incertidumbre/precisión, que la calculamos a partir de la desviación estándar:

$$(\Delta J_x)^2 = \langle (J_x - \langle J_x \rangle)^2 \rangle = \langle J_x^2 \rangle - \langle \langle J_x \rangle \rangle^2 \quad (x \leftrightarrow y)$$

Usamos otra vez  $J_{\pm}$ :

$$J_x = \frac{1}{2} (J_+ + J_-) ; \quad J_y = \frac{1}{2i} (J_+ - J_-)$$

$$J_x^2 = \frac{1}{4} (J_+^2 + J_-^2 + J_+J_- + J_-J_+)$$

$$J_y^2 = \frac{-1}{4} (J_+^2 + J_-^2 - J_+J_- - J_-J_+)$$

Como  $J_{\pm}|j,m\rangle$  es ortogonal a  $|j,m\rangle$ ,  $\langle J_{\pm} \rangle = \langle J_{\pm}^2 \rangle = 0$ .

Para calcular el valor esperado de  $J_{\pm}J_{\mp}$ , usamos:

$$J_+J_- + J_-J_+ = 2(J^2 - J_z^2)$$

Esto lo hemos usado en teoría, pero no cuesta mucho volver a demostrarlo:

$$J \pm J_{\mp} = (J_x \pm iJ_y)(J_x \mp iJ_y) = J_x^2 + J_y^2 \mp i[J_x, J_y] = J^2 - J_z^2 \pm \hbar J_z$$

$$\Rightarrow J_+ J_- + J_- J_+ = 2(J^2 - J_z^2)$$

Entonces,

$$\langle J_+ J_- + J_- J_+ \rangle = \langle j, m | 2(J^2 - J_z^2) | j, m \rangle = 2\hbar^2 [j(j+1) - m^2]$$

Y juntando todas las piezas:

$$\langle J_x \rangle = \langle J_y \rangle = 0$$

$$\langle J_x^2 \rangle = \langle J_y^2 \rangle = \frac{1}{2}\hbar^2 [j(j+1) - m^2]$$

$$\Rightarrow \Delta J_x = \Delta J_y = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} [j(j+1) - m^2]} \quad \text{mínimo para } |m|=j$$

"Interpretación" Clásica:

Si consideramos un momento angular clásico  $\vec{L}$  girando sobre el eje  $z$ , de forma que forme tiene un ángulo  $\theta$  constante pero un  $\phi$  uniformemente distribuido entre  $[0, 2\pi]$ .

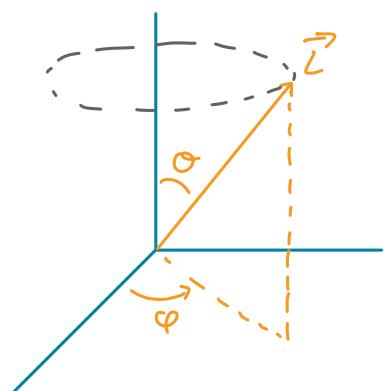
Sus valores medios serán:

$$\langle L_x \rangle = \langle L_y \rangle = 0$$

$$\langle L_z \rangle = |\vec{L}| \cos \theta = m \hbar \quad [\text{por comparar con el resultado cuántico}]$$

Y por lo mismo:

$$|\vec{L}|^2 = e(e+1)\hbar^2$$



Y sus incertidumbres:

$$\langle L_x^2 \rangle = (|L|^2 - |L_z|^2) \cos^2 \varphi = \hbar^2 [l(l+1) - m^2] \cos^2 \varphi$$

$$\Rightarrow \langle L_x^2 \rangle = \hbar^2 [l(l+1) - m^2] \int_0^{2\pi} \cos^2 \varphi d\varphi = \frac{1}{2} \hbar^2 [l(l+1) - m^2] \quad (\text{same } x \rightarrow y)$$

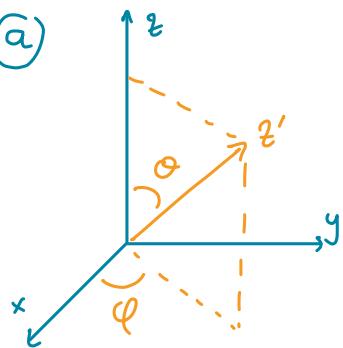
$$\Rightarrow \Delta L_x = \Delta L_y = \hbar \sqrt{\frac{1}{2} [l(l+1) - m^2]}$$

Recuperamos el resultado cuántico con esta imagen clásica de un  $\vec{L}$  con  $L_z$  bien definido y  $L_{x,y}$  distribuidos homogéneamente debido a la precesión de  $\vec{L}$ .

**⚠ WARNING:** esta visión clásica coincide y nos ayuda a creernos una intuición sólo para los valores medios e incertidumbres. La gran diferencia en MC son con las medidas individuales, que estarán cuantizadas, y eso no hay ejemplo clásico que se lo trague.

#### ④ Estudio de $j=1$ .

(a)



Buscamos el operador que proyecte  $\vec{J}$  sobre un nuevo eje. Igual que antes, es una rotación:

$$J_{z'} = \sin\theta \cos\varphi J_x + \sin\theta \sin\varphi J_y + \cos\theta J_z$$

(b) Buscamos el autovalor de  $J_z$  tal que  $J_z |\psi\rangle = m\hbar |\psi\rangle$ . Como los estados  $|j, m\rangle$  forman una base, que para  $j=1$  tiene 3 componentes,  $\{|+\rangle = |1, \pm 1\rangle, |0\rangle = |1, 0\rangle\}$ :

$$|\psi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |0\rangle + \gamma |-\rangle$$

De nuevo, nos interesarán usar  $J_{\pm}$ , que para  $j=1$ :

$$J_{\pm} |j, m\rangle = \pm \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle$$

$$J_+ |+\rangle = 0 \quad ; \quad J_+ |0\rangle = \sqrt{2}\hbar |+\rangle \quad ; \quad J_+ |-\rangle = \sqrt{2}\hbar |0\rangle$$

$$J_- |+\rangle = \sqrt{2}\hbar |0\rangle \quad ; \quad J_- |0\rangle = \sqrt{2}\hbar |-\rangle \quad ; \quad J_- |-\rangle = 0$$

Así que:

$$J_+ |\psi\rangle = \sqrt{2}\hbar (\beta |+\rangle + \gamma |0\rangle)$$

$$J_- |\psi\rangle = \sqrt{2}\hbar (\alpha |0\rangle + \beta |-\rangle)$$

$$J_z |\psi\rangle = \hbar (\alpha |+\rangle - \gamma |-\rangle)$$

Y a tenemos todo para calcular  $J_z' |\psi\rangle$

$$J_z' = \sin\theta \cos\varphi J_x + \sin\theta \sin\varphi J_y + \cos\theta J_z$$

$$= \frac{1}{2} \sin\theta \cos\varphi (J_+ + J_-) - \frac{i}{2} \sin\theta \sin\varphi (J_+ - J_-) + \cos\theta J_z$$

$$= \frac{1}{2} \sin\theta (e^{-i\varphi} J_+ + e^{i\varphi} J_-) + \cos\theta J_z$$

$$\Rightarrow J_z' |\psi\rangle = \left[ \frac{1}{2} \sin\theta (e^{-i\varphi} J_+ + e^{i\varphi} J_-) + \cos\theta J_z \right] |\psi\rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar \sin\theta e^{-i\varphi} (\beta |+\rangle + \gamma |-\rangle)$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{2}} \hbar \sin\theta e^{i\varphi} (\alpha |0\rangle + \beta |1\rangle)$$

$$+ \hbar \cos\theta (\alpha |+\rangle - \gamma |-\rangle) \equiv \hbar (\alpha |+\rangle + \beta |0\rangle + \gamma |-\rangle)$$

*autovectores  $m=+1$*

$$\Rightarrow \begin{cases} \alpha \cos\theta + \beta/\sqrt{2} \sin\theta e^{-i\varphi} = \alpha \\ \alpha \sqrt{2} \sin\theta e^{i\varphi} + \gamma/\sqrt{2} \sin\theta e^{-i\varphi} = \beta \\ -\gamma \cos\theta + \beta/\sqrt{2} \sin\theta e^{i\varphi} = \gamma \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \alpha = \frac{\sin\theta}{1-\cos\theta} \frac{e^{-i\varphi}}{\sqrt{2}} \beta \\ \gamma = \frac{\sin\theta}{1+\cos\theta} \frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{2}} \beta \end{cases}$$

$$\Rightarrow |\psi\rangle = \beta \left\{ \frac{\sin\theta}{1-\cos\theta} \frac{e^{-i\varphi}}{\sqrt{2}} |+\rangle + |0\rangle + \frac{\sin\theta}{1+\cos\theta} \frac{e^{i\varphi}}{\sqrt{2}} |-\rangle \right\}$$

Por último, normalizamos:

$$\begin{aligned} \langle \Psi | \Psi \rangle &= |\beta|^2 \left[ \frac{\sin^2 \theta}{2(L-\cos\theta)^2} + 1 + \frac{\sin^2 \theta}{2(L+\cos\theta)^2} \right] = |\beta|^2 \left[ \frac{2(L+\cos^2 \theta)}{2(L-\cos^2 \theta)^2} \sin^2 \theta + 1 \right] \\ &= |\beta|^2 \left[ \frac{L+\cos^2 \theta}{\sin^2 \theta} + 1 \right] = |\beta|^2 \frac{2}{\sin^2 \theta} \Rightarrow |\beta| = \frac{\sin \theta}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

③ Las probabilidades sobre el eje  $z$  (el viejo) serán simplemente el cuadrado de los coef. normalizados:

$$P(L_z = +\hbar) = \frac{\sin^4 \theta}{4(1-\cos\theta)^2} \xrightarrow{(1-\cos\theta)^2 \rightarrow (1-\cos\theta)^2} = \frac{1}{4} (1-\cos\theta)^2 = \cos^4 \frac{\theta}{2}$$

$$P(L_z = 0) = \frac{\sin^2 \theta}{2}$$

Fácil de comprobar que suman 1

$$P(L_z = -\hbar) = \frac{\sin^4 \theta}{4(1+\cos\theta)^2} = \frac{1}{4} (1+\cos\theta)^2 = \sin^4 \frac{\theta}{2}$$

④ Medidas  $J_z^2$ .

Al medir  $J_z^2$  podemos obtener sus autovalores:  $\hbar^2$  o  $0$ .

Sus probabilidades vendrán dadas otra vez por los coef. de  $|\Psi\rangle$  en función de  $|L, m\rangle$ , aunque ahora sumamos las dos degeneradas:

$$P(J_z^2 = \hbar^2) = P(J_z = \hbar) + P(J_z = -\hbar) = \cos^4 \frac{\theta}{2} + \sin^4 \frac{\theta}{2} = L - \frac{1}{2} \sin^2 \theta$$

$$P(J_z^2 = 0) = P(J_z = 0) = \frac{1}{2} \sin^2 \theta$$

y el promedio:  $\langle J_z^2 \rangle = (L - \frac{1}{2} \sin^2 \theta) \hbar^2$

$$⑤ |\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|0\rangle + \gamma|-\rangle \text{ con } \ell=1.$$

$$⑥ \langle L_x \rangle, \langle L_y \rangle, \langle L_z \rangle$$

Usaremos, para  $|m\rangle \in \{|+\rangle, |0\rangle, |-\rangle\}$ ,:

$$\langle L_z | m \rangle = m \hbar | m \rangle$$

$$\langle L_{\pm} | m \rangle = \sqrt{2} \hbar | m \pm 1 \rangle$$

Por lo que

$$\langle L_+ | \psi \rangle = \sqrt{2} \hbar \{ \beta |+\rangle + \gamma |0\rangle \} \Rightarrow \langle L_+ \rangle = \sqrt{2} \hbar (\alpha^* \beta + \beta^* \gamma)$$

$$\langle L_- | \psi \rangle = \sqrt{2} \hbar \{ \alpha |0\rangle + \beta |-\rangle \} \Rightarrow \langle L_- \rangle = \sqrt{2} \hbar (\beta^* \alpha + \gamma^* \beta)$$

$$\langle L_x \rangle = \frac{1}{2} (\langle L_+ \rangle + \langle L_- \rangle) = \sqrt{2} \hbar \operatorname{Re} (\alpha^* \beta + \beta^* \gamma)$$

$$\Rightarrow \langle L_y \rangle = \frac{1}{2i} (\langle L_+ \rangle - \langle L_- \rangle) = \sqrt{2} \hbar \operatorname{Im} (\alpha^* \beta + \beta^* \gamma)$$

$$\langle L_z \rangle = \hbar (|\alpha|^2 - |\gamma|^2)$$

Nota:  $\langle L_x \rangle$  y  $\langle L_y \rangle$  son reales, como debe ser para operadores hermíticos (observables), aunque  $\langle L_{\pm} \rangle$  no lo sean.

$$\textcircled{b}) \quad \langle L_x^2 \rangle, \quad \langle L_y^2 \rangle, \quad \langle L_z^2 \rangle$$

Usaremos:

$$L_+ L_- + L_- L_+ = 2(L^2 - L_z^2) \quad [\text{lo hemos visto antes}]$$

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

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

Calculamos por partes.

$$L_+^2 |\psi\rangle = 2\hbar^2 \gamma |+\rangle \Rightarrow \langle L_+^2 \rangle = 2\hbar^2 \alpha^* \gamma$$

$$L_-^2 |\psi\rangle = 2\hbar^2 \alpha |-\rangle \Rightarrow \langle L_-^2 \rangle = 2\hbar^2 \gamma^* \alpha$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle L_x^2 \rangle &= \frac{\hbar^2}{2} \left( 2\operatorname{Re}(\alpha^* \gamma) + 2|\alpha|^2 + 2|\beta|^2 + 2|\gamma|^2 - |\alpha|^2 - |\gamma|^2 \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2} (2|\beta|^2 + |\alpha + \gamma|^2) \end{aligned}$$

$$\langle L_y^2 \rangle = (\dots) = \frac{\hbar^2}{2} (2|\beta|^2 + |\alpha - \gamma|^2)$$

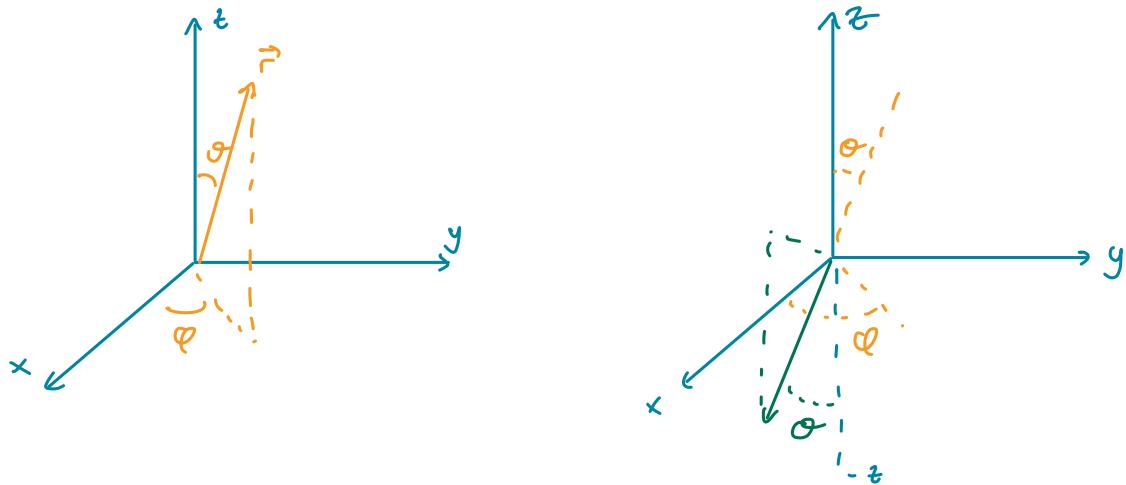
$$\langle L_z^2 \rangle = \hbar^2 (|\alpha|^2 + |\gamma|^2)$$

Podemos comprobar que:

$$\langle L^2 \rangle = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \langle L_z^2 \rangle = 2\hbar^2 (|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2) \quad \checkmark (\ell=L)$$

## ⑥ Paridad y Armónicos Esféricos

②



De la imagen se ve que:

$$\vec{r} \rightarrow -\vec{r} \Rightarrow \begin{cases} r \rightarrow r \\ \theta \rightarrow \pi - \theta \\ \varphi \rightarrow \pi + \varphi \end{cases}$$

## ⑤ Demostrar que $[P, L_i] = 0$

Usamos la definición del momento angular orbital

$$L_i = (\vec{r} \times \vec{p})_i = \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} x_j p_k = -i\hbar \sum_{j,k} \epsilon_{ijk} x_j \frac{\partial}{\partial x_k}$$

Bajo paridad,  $x_j \rightarrow -x_j$ , pero como  $L_i$  tiene 2 x-s, quedará invariante:

$$[P, L_i] = 0$$

$\vec{L}$  transforma como vector ante rotaciones (i.e.  $[L_i, L_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k$ ), pero no transf. bajo paridad: se dice que es un PSEUDOVECTOR o VECTOR AXIAL

○ La solución completa de  $Y_e^m$  que vimos en clase:

$$Y_e^m(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^{\ell+m}}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} e^{im\varphi} (\sin\theta)^m \frac{d^{\ell+m}}{d(\cos\theta)^{\ell+m}} (\sin\theta)^{2\ell}$$

Bajo paridad,  $\theta \rightarrow \pi - \theta$ ,  $\varphi \rightarrow \pi + \varphi$ , así que:

$$e^{im\varphi} \rightarrow e^{im\pi} e^{im\varphi} = (-1)^m e^{im\varphi}$$

$$\sin\theta \rightarrow \sin(\pi - \theta) = \sin\theta$$

$$\cos\theta \rightarrow \cos(\pi - \theta) = -\cos\theta \Rightarrow \frac{d^{\ell+m}}{d(\cos\theta)^{\ell+m}} \rightarrow (-1)^{\ell+m} \frac{d^{\ell+m}}{d(\cos\theta)^{\ell+m}}$$

Juntando todos los factores,  $(-1)^{m+\ell+m+2\ell} = (-1)^\ell$

$$Y_e^m(\theta, \varphi) \rightarrow Y_e^m(\pi - \theta, \pi + \varphi) = (-1)^\ell Y_e^m(\theta, \varphi)$$

Por lo tanto, los  $Y_e^m$  son autovectores de paridad, con autovalores  $(-1)^\ell$ .

## ⑦ Soluciones para $Y_e^m$ de forma alternativa.

En clase hemos presentado las soluciones de la dependencia  $\theta$  de los  $Y_e^m$  como los polinomios (asociados) de Legendre, buscando la forma explícite a capón.

Una forma más visual de ver de donde salen estas soluciones es usar que

$$L_+ Y_e^\ell(\theta, \varphi) = 0$$

Usando  $L_+ = \tan \theta (\partial_\theta + \frac{i}{\tan \theta} \partial_\varphi)$  y  $Y_e^\ell(\theta, \varphi) = F_e(\theta) e^{i\ell\varphi}$ ,

$$\left[ \partial_\theta - \frac{\ell}{\tan \theta} \right] F_e(\theta) = 0 \Rightarrow F_e(\theta) = C_e (\sin \theta)^\ell$$

Por tanto,

$$Y_e^\ell(\theta, \varphi) = C_e (\sin \theta)^\ell e^{i\ell\varphi}$$

Normalizando sacamos  $C_e$ : [Cohen App. Avi]

$$\int d\Omega |Y_e^\ell|^2 = 1 \Rightarrow C_e = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)!}{4\pi}}$$

y aplicando  $L_-$  podemos sacar el resto  $Y_e^m$ .

Esto está hecho en el Cohen. App Avi - 1.b. Las cuentas no son super reveladoras, así que yo simplemente lo mencionaré de pasada y que si les interesa lo miren en el libro.

[Lo mismo para  $L_- Y_e^\ell = 0$ , no se si merece hacer las cuentas again]

$$⑧ Y_2^1(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\varphi}, \text{ sacar el resto de } l=2.$$

Como tenemos el m más alto, aplicamos  $L_- = L_x - iL_y$ :

$$L_- |l, m\rangle = \hbar \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} |l, m-1\rangle \quad [\text{Normalización del Cohom. como en clave}]$$

$$\Rightarrow |2, m-1\rangle = \frac{1}{\hbar \sqrt{6-m(m-1)}} L_- |l, m\rangle$$

También hemos visto la forma de  $L_-$  en polares:

$$L_- = \hbar e^{-i\varphi} (-\partial_\theta + i \cot\theta \partial_\varphi)$$

Así que:

$$\begin{aligned} Y_2^1(\theta, \varphi) &= \frac{1}{2\hbar} \hbar e^{-i\varphi} (-\partial_\theta + i \cot\theta \partial_\varphi) \left[ \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\varphi} \right] \\ &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{-i\varphi} \left[ -2 \sin \theta \cos \theta e^{2i\varphi} - 2 \sin \theta \cos \theta e^{2i\varphi} \right] \\ &= -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Y_2^0(\theta, \varphi) &= -\frac{1}{\sqrt{6}} e^{-i\varphi} (-\partial_\theta + i \cot\theta \partial_\varphi) \left[ \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\varphi} \right] \\ &= \sqrt{\frac{15}{48\pi}} \left[ \cos^2 \theta - \sin^2 \theta + \cos^2 \theta \right] \\ &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \left[ 3 \cos^2 \theta - 1 \right] \end{aligned}$$

$$Y_2^{-1}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{16}} e^{-i\varphi} \left[ -\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\varphi \right] \left[ \sqrt{\frac{5}{16\pi}} [3\cos^2 \theta - 1] \right]$$

$$= \frac{1}{\sqrt{16}} \sqrt{\frac{5}{16\pi}} [6 \sin \theta \cos \theta] e^{-i\varphi} = \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\varphi}$$

$$Y_2^{-2}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2} e^{-i\varphi} \left[ -\partial_\theta + i \cot \theta \partial_\varphi \right] \left[ \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{-i\varphi} \right]$$

$$= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{8\pi}} [-\cos^2 \theta + \sin^2 \theta + \cos^2 \theta] e^{-2i\varphi}$$

$$= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{-2i\varphi}$$

Notas: - Hemos obtenido que  $Y_e^m \propto e^{-im\varphi}$ , como ya sabíamos

- También vemos que se cumple  $Y_e^{-m} = (-1)^m Y_e^m$ <sup>\*</sup>, que de hecho podemos haber visto para sacar  $Y_2^{-1}$  y  $Y_2^{-2}$  una vez sabidos  $Y_2^{+1}$  y  $Y_2^{+2}$ .

$$\textcircled{9} \quad \mathcal{N}(\vec{r}) = \frac{1}{2\sqrt{14\pi}} (1-r) e^{-r/2} \Rightarrow \text{Medir } l=0, 1?$$

Como no tiene dependencia angular, sólo puede tener  $L^2=0$ , así que

$$P_{l=0} = 1 ; \quad P_{l=1} = 0$$

$$\textcircled{10} \quad \phi(\vec{r}) = A e^{-r^2} (z + 2iy) \Rightarrow \text{medidas } L^2 \text{ y } L_z?$$

Queremos proyectar en los  $Y_e^m$ , así que mejor pasarlo primero a polares:

$$z = r \cos \theta$$

$$y = r \sin \theta \sin \varphi = \frac{r}{2i} \sin \theta (e^{i\varphi} - e^{-i\varphi})$$

$$\Rightarrow \phi(\vec{r}) = A r e^{-r^2} (\cos \theta + \sin \theta e^{i\varphi} - \sin \theta e^{-i\varphi})$$

Reconocemos 3  $Y_e^m$ :

$$Y_0^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \quad ; \quad Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}$$

$$\Rightarrow \phi(\vec{r}) = A \sqrt{\frac{3}{8\pi}} r e^{-r^2} (Y_0^0 + \sqrt{2} Y_1^+ + \sqrt{2} Y_1^-)$$

Mediremos siempre  $l=1$ , con sus 3 proyecciones con probabilidad:

$$P_{m=\pm 1} = 2 P_{m=0} = 1/5$$

## SOLUCIONES HOJA 2

POT. CENTRAL. ATOMO H

① Autoestados pozo esférico infinito:

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

Nota: Este ejercicio es más teórico que problemas, pero creo que es mejor sacarlo de la teoría porque realmente no lo usamos luego y así ahorraremos tiempo para otras cosas.

Aún así, me parece importante que vean un poco sobre ondas esféricas y cómo usarlas.

En clase sólo hemos mencionado muy de pasada que existen, que describen la f.d.o. de una partícula libre en esféricas y que vienen dadas por

$$\Psi(\vec{r}) = C_e j_e(kr) Y_e^m(\theta, \phi), \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$\hookrightarrow$  Funciones esféricas de Bessel.

También hemos dicho que veremos más en un problema, refiriéndonos a ésto.

## Parte Teórica: partícula libre en coord. esféricas

Cuando tenemos simetría esférica, como en este potencial central, es mejor trabajar en coord. esféricas. Hemos visto también que en estos casos la parte angular de la f.d.o. viene dada por los armónicos esféricos:

$$\Psi(\vec{r}) = R_{ke}(r) Y_e^m(\theta, \varphi)$$

Y que lo único que tenemos que resolver es la ecuación radial, que este sí dependerá del problema a través de  $V(r)$ :

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} + V(r) \right] R_{ke}(r) = E_{ke} R_{ke}(r)$$

Para  $V(r)=0$ , tenemos una partícula libre, que es lo que nos interesa estudiar ahora. Fijaos que aún así tenemos  $V_{eff} \neq 0$ , porque la barrera centrífuga sigue ahí. Eso sí,  $V_{eff}$  dependerá sólo de  $\ell$  y, como una partícula libre tiene cualquier energía  $E > 0$ , eliminamos la necesidad del número cuántico  $K$ .

La ecuación que nos queda (partícula libre  $\mu=m$ ):

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

$$\left[ \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + K^2 \right] R_e(r) = 0 , \quad K^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Definiendo  $\rho = kr$ :

$$\left[ \frac{1}{\rho} \frac{d^2}{d\rho^2} \rho + \left( 1 - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2} \right) \right] R_\ell(\rho) = 0$$

$\hookrightarrow$  Ecuación Diferencial de Bessel (realmente una ec. para cada  $\ell$ )

Tiene dos soluciones linealmente indep:

Funciones de Bessel:  $j_\ell(\rho) = (-\rho)^\ell \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \frac{\sin \rho}{\rho}$

Ejs:  $j_0(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho}$ ,  $j_1(\rho) = \frac{\sin \rho}{\rho^2} - \frac{\cos \rho}{\rho}$ , ...

$\mapsto$  (o Bessel de segunda especie)

Funciones de Neumann:  $n_\ell(\rho) = -(-\rho)^\ell \left( \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \right)^\ell \frac{\cos \rho}{\rho}$

Ejs:  $n_0(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho}$ ,  $n_1(\rho) = -\frac{\cos \rho}{\rho^2} - \frac{\sin \rho}{\rho}$ , ...

La solución genérica será una combinación lineal de ambas,

$$R_\ell(\rho) \sim A_\ell j_\ell(\rho) + B_\ell n_\ell(\rho)$$

Pero las funciones de Neumann divergen en  $\rho \rightarrow 0$ , así que las descartamos y nos quedamos sólo con las de Bessel, que se comportan bien.

Por tanto, la función de onda completa será:

$$\Psi(\vec{r}) = C_\ell j_\ell(kr) Y_\ell^m(\theta, \phi), \quad \text{con } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

## Notas:

- Tenemos la f.d.o. de una partícula libre en coord. esféricas, cuya energía es
$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$
igual que para las ondas planas (i.e. partícula libre en coord. cartesianas).
- Las soluciones son periódicas, y se comportan bien tanto en el origen, como en infinito (suprimidas para  $p \rightarrow \infty$ ).
- Forman una base útil para problemas con simetría esférica, igual que las ondas planas.

## Parte Práctica, el problema real de la hoja.

Queremos encontrar los niveles de energía de un pozo de potencial esférico. En MC1, resolverían los pozos de potencial escribiendo la f.d.o. como combinación de ondas planas y sacando las condiciones que tenía que cumplir  $k$  para ser un autoestado. Hacemos exactamente lo mismo pero usando ondas esféricas:

$$\Psi_{nlm}(\vec{r}) = C j_l(kr) Y_l^m(\theta, \phi)$$

E imponemos que muere en  $r=a$ , es decir:

$$\psi_{nem}(r=a) = 0 \Rightarrow j_\ell(k_a) = 0 \quad [\text{para cada } \ell]$$

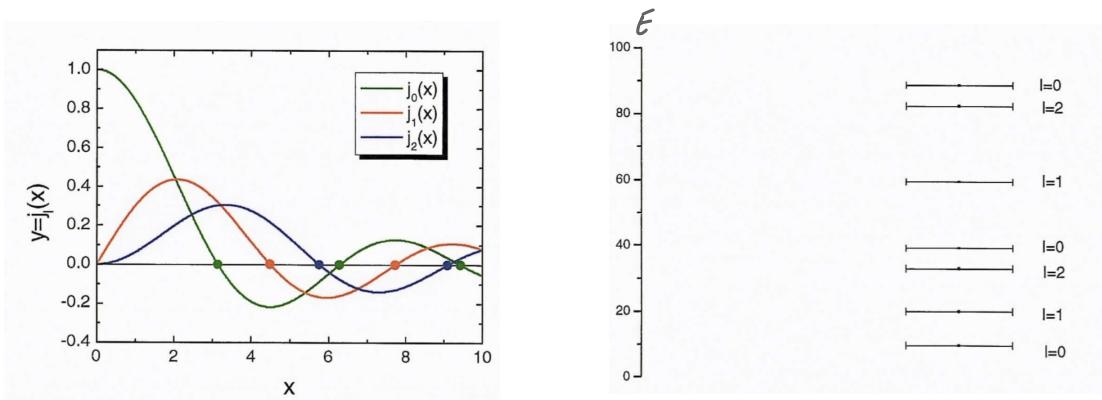
Como las funciones de Bessel son periódicas, tendrán un número infinito de ceros, lo que nos dará un espectro infinito (pero discreto) de niveles de energía para cada  $\ell$ .

Por ejemplo, para  $\ell=0$ ,  $j_0(kr) \sim \frac{\sin(kr)}{r}$

$$\Rightarrow \sin(k_a) = 0 \Rightarrow k = \frac{n\pi}{a} \Rightarrow E_{n0} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} n^2, \quad n=1, 2, \dots$$

$\hookrightarrow \ell=0$

Donde hemos introducido el número cuántico  $n$  para identificar el nodo al que corresponde. Y lo mismo para  $\ell > 0$ , aunque las fórmulas son más feas y no merece. Visualmente:



Y la f.d.o. de los autoestados será como hemos dicho antes,

$$\psi_{nem}(\vec{r}) = c_{nl} j_\ell(k_n r) Y_\ell^m(\theta, \phi)$$

pero teniendo en cuenta que  $k \rightarrow k_n$  está cuantizado.

$$② \quad \Psi(\vec{r}) = \phi(r) (\alpha Y_l^0(\theta, \phi) + \beta Y_l^{-1}(\theta, \phi))$$

$$\text{con } \int_0^\infty r^2 |\phi(r)|^2 = 1, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

③ Normalización:

$$1 \equiv \int d^3r |\Psi|^2 = \int r^2 dr |\phi|^2 \int d\Omega |\alpha Y_l^0 + \beta Y_l^{-1}|^2 = |\alpha|^2 + |\beta|^2 \equiv 1$$

donde hemos usado que  $\phi(r)$  está normalizado y que los  $Y_e^m$  son estados ortonormales:

$$\int d\Omega Y_e^{m*} Y_{e'}^{m'} = \delta_{ee'} \delta_{mm'}$$

④ Posición definida?

Tener una posición bien definida sería ser  $\Psi(\vec{r}) \sim \delta(\vec{r})$ , que no lo es.

Más en genérico, tendría que ser un autovector del observable  $\vec{r}$ , que no commute con  $L^2$  ni  $L_z$ . Así que tener  $L^2$  bien definido, como  $\Psi$ , no es compatible con tener una posición definida.

Not. En clase no hemos demostrado que  $[L^2, x_i] \neq 0$ , pero sí hemos dicho que  $[L_i, x_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} x_k$  como cualquier operador vectorial.

## ④ Medidas $L^2$ y $L_z$

Esto lo sacamos de los  $Y_e^m$ , ya que sabemos que son los autovectores de  $L^2$  y  $L_z$ .

$L^2$ : Tenemos sólo  $Y_e^m$ -s, así que tenemos un autovector de  $L^2$  y siempre mediremos  $\ell=2$  (o sea  $6\hbar^2$ )

$L_z$ : Aquí tenemos dos opciones:  $m = 2$  y  $-1$  (o sea  $2\hbar$  y  $-\hbar$ ) las probabilidades, asumiendo la normalización  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ :

$$\mathcal{P}(L_z = 2\hbar) = |\alpha|^2, \quad \mathcal{P}(L_z = -\hbar) = |\beta|^2$$

$$\textcircled{d} \quad \langle L_z \rangle_{\psi} = 0$$

Como ya tenemos  $\psi$  expresada en función de autovectores de  $L_z$ , el cálculo es muy fácil. Lo hacemos explícitamente usando la notación de kets

$$Y_e^m = |\ell m\rangle$$

$$\psi \sim \alpha |2 2\rangle + \beta |2 -1\rangle$$

$$\begin{aligned} \langle L_z \rangle_{\psi} &= [\alpha^* \langle 2 2 | + \beta^* \langle 2 -1 |] L_z [\alpha |2 2\rangle + \beta |2 -1\rangle] \\ &= 2\hbar |\alpha|^2 - \hbar |\beta|^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad |\beta|^2 = 2 |\alpha|^2 \end{aligned}$$

Usando  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \Rightarrow |\beta|^2 = 2/3, |\alpha|^2 = 1/3$

Entonces, la probabilidad de medir  $-h$  para la tercera componente será

$$\mathcal{P}(L_z = -h) = |\beta|^2 = 2/3$$

e)  $\langle L_x \rangle, \langle L_y \rangle$

Usamos los  $L_{\pm} = L_x \pm iL_y$ , pero como tenemos dos  $Y_e^m$ -s con  $\Delta L_z = 3$ , no podemos salvarla con solo un  $L_{\pm}$ . Así que

$$\langle L_{\pm} \rangle_{\psi} = 0$$

y por tanto  $\langle L_x \rangle_{\psi} = \langle L_y \rangle_{\psi} = 0$ .

### ③ Electrón con $r > r_{\max}$

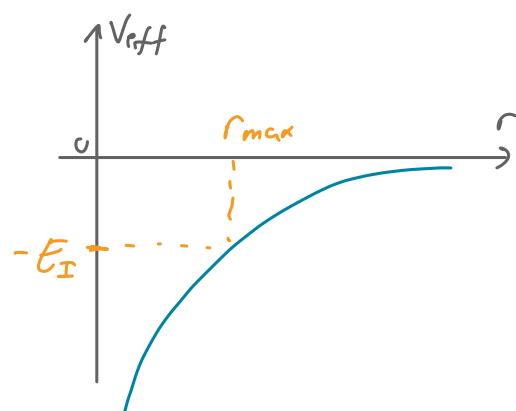
Tenemos un  $e^-$  en el estado fundamental del átomo H.

Schemos:

$$n=1 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} E = -E_I = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \sim -13.6 \text{ eV} \\ \Psi_{1s}(\vec{r}) = R_{1s}(r) Y_0^0(\theta, \phi); R_{1s}(r) = \frac{2}{r_B^{3/2}} e^{-r/r_B} \end{array} \right.$$

con el radio de Bohr  $r_B = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \sim 0.5 \text{ \AA}$

**Caso clásico:** como el estado fundamental tiene  $\ell=0$ , no tenemos barrera centrífuga, solo el potencial de Coulomb



$$V_{\text{eff}}(r) = -\frac{e^2}{r}$$

Esto quiere decir que clásicamente, y dada una energía negativa, el electrón solo podrá moverse

$$0 \leq r \leq r_{\max}$$

Donde  $r_{\max}$  cumple:

$$E_I = \frac{e^2}{r_{\max}} \Rightarrow r_{\max} = \frac{e^2}{E_I} = \frac{2\hbar^2}{\mu e^2} = 2r_B$$

**Caso Cuántico:** Sabemos que ahí no tenemos un  $e^-$  localizado y lo único que controlamos es su densidad de probabilidad radial:

$$P_r(r) = r^2 |R_{1s}(r)|^2 = 4 \frac{r^2}{r_B^3} e^{-2r/r_B}$$

Como la probabilidad integrada en todo  $r$  tiene que ser 1, tenemos:

$$1 = \int_0^\infty dr P_r(r) = \int_0^{r_{max}} dr P_r(r) + \int_{r_{max}}^\infty dr P_r(r)$$

y hemos separado la probabilidad de estar en la región clásica y la de estar fuera. Calculamos la primera usando:

$$\int dx x^2 e^{-ax} dx = \frac{e^{-ax}}{a^3} (a^2 x^2 - 2ax + 2)$$

$$P_{r < r_{max}} = \int_0^{r_{max}} dr 4 \frac{r^2}{r_B^3} e^{-2r/r_B} = -\frac{4}{r_B^3} \frac{r_B^3}{8} e^{-2r/r_B} \left( 4 \frac{r^2}{r_B^2} + 4 \frac{r}{r_B} + 2 \right) \Big|_0^{r_{max}}$$

$$= 1 - 13 e^{-4} \simeq 76\%$$

$$\Rightarrow P_{r > r_{max}} = 13 e^{-4} \simeq 24\%$$

Se viola el máximo clásico casi un cuarto de las veces.

$$④ \Psi(\vec{r}) = \frac{1}{81} \sqrt{\frac{2}{\pi}} r_B^{-3/2} \left(\frac{r}{r_B}\right)^2 e^{-\frac{r}{3r_B}} \sin\theta \cos\theta \cos\phi$$

(a) Es autoestado de  $H, L^2$  y  $L_z$ ?

Para ello proyectamos sobre los autoestados que conocemos.  
La forma formal de hacerlo sería

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_{nem} C_{nem} \Psi_{nem}(\vec{r}) \xrightarrow{\text{autoestados en } l \text{ ms del atomo H}}$$

$$\text{con } C_{nem} = \int d^3r \Psi_{nem}^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r})$$

Pero en este caso simple podemos verlo a ojo:

$$\sin\theta \cos\theta \cos\phi = \sin\theta \cos\theta \frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2} = \sqrt{\frac{8\pi}{15}} (Y_2^{-1} - Y_2^{+1})$$

↳ tenemos  $\ell=2$  y  $m=\pm 2$ .

$e^{-r/3r_B} \Rightarrow$  miramos autoestados con  $n=3$

$r^2 e^{-r/3r_B} \Rightarrow$  cuadra con  $n=3$  y  $\ell=2$

↳ En clase hemos visto la fórmula genérica

$$R_{ne}(r) = A_{ne} e^{-\frac{r}{hr_B}} \left(\frac{r}{r_B}\right)^\ell L_{n-\ell-1}^{2\ell+1} \left(\frac{2r}{nr_B}\right)$$

normalización

↳ polinomios asociados de Laguerre.

Mirando la solución explícita:

$$R_{32}(r) = \frac{1}{27\sqrt{5}} \left(\frac{2}{3r_B}\right)^{3/2} \left(\frac{r}{r_B}\right)^2 e^{-r/3r_B}$$

Juntando todo, y como nos dicen que está normalizada:

$$\Psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} R_{32}(r) (Y_2^{-1} - Y_2^{+1}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|3, 2, -1\rangle - |3, 2, +1\rangle)$$

Así que  $\Psi(\vec{r})$  es autoestado de  $H$  ( $n=3$ ) y  $L^2$  ( $\ell=2$ ), pero no de  $L_z$ .

④ Tenemos  $|1\rangle$  tal que:

i)  $L_z|1\rangle = \hbar|1\rangle$

ii) Energías menores  $-1\text{eV}$

iii)  $\langle E \rangle = -2.455\text{eV}$

iv) Prob. de encontrarlo en  $|\Psi\rangle$  es  $1/4$ .

ij) Al ser autoestado de  $L_z$ ,  $|1\rangle \sim Y_e^2$ , con  $\ell$  sin determinar (aunque obviamente  $\ell \geq 1$ ).

ii) El espectro de energías va como  $E_n = -\frac{E_I}{n^2} = -\frac{13.6}{n^2}\text{eV}$ , que será mayor que  $-1\text{eV}$  para  $n \geq 4$ .

Por otro lado, como  $\ell_{\max} = n-1$ , la condición i) nos descarta el  $n=1$ . Nos quedan  $n=2$  y  $n=3$ .

Como no sabemos  $\ell$ , solo que  $1 \leq \ell \leq n-1$ , tenemos todavía 3 opciones:

$$|\phi\rangle = \alpha|2\ell\ell\rangle + \beta|311\rangle + \gamma|321\rangle$$

iii) La proyección sobre  $|\psi\rangle$  será  $|\langle\psi|\phi\rangle|^2$

$$|\phi\rangle = \alpha|211\rangle + \beta|312\rangle + \gamma|321\rangle \quad \left. \begin{array}{l} |\langle\psi|\phi\rangle|^2 = \frac{\gamma^2}{2} = \frac{1}{4} \Rightarrow |\gamma|^2 = \frac{1}{2} \end{array} \right.$$

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|32-1\rangle + |321\rangle)$$

$$\Rightarrow |\phi\rangle = \alpha|211\rangle + \beta|311\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\delta}|321\rangle$$

iv) La energía media será:

$$\langle E \rangle_\phi = |\alpha|^2 E_2 + (|\beta|^2 + |\gamma|^2) E_3 = -E_I \left( \frac{|\alpha|^2}{4} + \frac{|\beta|^2 + |\gamma|^2}{9} \right)$$

$$\Rightarrow \frac{1}{4}|\alpha|^2 + \frac{1}{9}(|\beta|^2 + \frac{1}{2}) = \frac{2'455}{13'6} \sim 0.18$$

Y como queremos que  $|\phi\rangle$  esté normalizada.

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 = 1 \Rightarrow |\beta|^2 + \frac{1}{2} = 1 - |\alpha|^2$$

$$\Rightarrow \frac{1}{4}|\alpha|^2 + \frac{1}{9}(1 - |\alpha|^2) = \frac{4 - 5|\alpha|^2}{36} = \frac{2'455}{13'6} \Rightarrow |\alpha|^2 \sim \frac{1}{2} \Rightarrow |\beta|^2 \sim 0$$

$$\Rightarrow |\phi\rangle \simeq \frac{1}{\sqrt{2}}(|211\rangle + e^{i\delta}|321\rangle)$$

→ tomando  $\alpha$  real

④ La dependencia temporal vendrá del  $H$ :

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht} |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}} |2LL\rangle + e^{i\delta - i\frac{E_3 t}{\hbar}} |32L\rangle \right)$$

$$\text{con } E_2 = -\frac{E_I}{4}, \quad E_3 = -\frac{E_I}{9}, \quad E_I \sim 13.6 \text{ eV.}$$

Sacando  $e^{-i\frac{E_2 t}{\hbar}}$  como fase global:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\frac{E_2 t}{\hbar}} \left( |2LL\rangle + e^{-i(\frac{5E_I t}{36\hbar} - \delta)} |32L\rangle \right)$$

La densidad de prob en función del tiempo la sacamos del módulo cuadrado de  $\psi(t)$ .

$$|\psi(t)|^2 = \frac{1}{2} \left| \phi_{211} + e^{-i(\frac{5E_I t}{36\hbar} - \delta)} \phi_{321} \right|^2$$

Tenemos algo que depende del tiempo, a través de la exp, que lo hará oscilar entre  $|\phi_{211} + \phi_{321}|^2$  y  $|\phi_{211} - \phi_{321}|^2$  con freq:

$$\omega = \frac{5E_I}{36\hbar}$$

**Nota:** Esto hará que las medidas y valores esperados cambien con el tiempo (en concreto de la energía). Eso sí, el estado siempre se mantiene normalizado, de modo que al integrar la densidad de prob. siempre obtenemos 1. Esto es fácil de ver usando la ortogonalidad de los  $l_m$ s (al integrar a todo el espacio).

$$\int d^3r |\psi(t)|^2 = \frac{1}{2} \int d^3r \left( |\phi_{211}|^2 + |\phi_{321}|^2 + \cancel{\text{int}} \right) = 1$$

ortogonales

$$\textcircled{5} \quad \Psi(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{322}(\vec{r}) + \Psi_{32-1}(\vec{r}))$$

$$\textcircled{6} \quad \langle L^2 \rangle \text{ y } \langle L_z^2 \rangle$$

Como  $\Psi$  es una combinación lineal de dos autoestados con  $\ell=2$ ,  $\Psi$  también lo será, así que:

$$\langle L^2 \rangle = 6\hbar^2$$

Para  $L_z^2$ , tenemos mezcla de dos valores, así que  $\Psi$  no será autoestado de  $L_z^2$ . Para calcular el valor medio, lo hacemos de dos maneras. Primero por fuerza bruta:

$$\begin{aligned} \langle L_z^2 \rangle &= \frac{1}{2} (\langle 322 | + \langle 32-1 |) L_z^2 (| 322 \rangle + | 32-1 \rangle) \\ &= \frac{1}{2} (4\hbar^2 + \hbar^2) = \frac{5}{2}\hbar^2 \end{aligned}$$

La otra forma, es sabiendo el coef. de  $\Psi$  sobre cada uno de los autoestados ( $|n\ell m\rangle$ ), que en este caso son ambos  $\frac{1}{\sqrt{2}}$ , y usarlos para calcular una media ponderada:

$$\langle L_z^2 \rangle = \sum_i |C_i|^2 \langle L_z^2 \rangle_i = \frac{1}{2} 4\hbar^2 + \frac{1}{2} \hbar^2 = \frac{5}{2}\hbar^2$$

$$\textcircled{5} \quad \text{Prob. medir } L_z = \hbar \text{ y } 0.$$

$\Psi$  es comb. lineal de autoestados con  $L_z = 2\hbar$  y  $-\hbar$ , así que no podremos medir ni  $\hbar$  ni  $0$ .

## ② Prob. radial máxima

$\psi$  es comb. lineal de dos estados con  $n=3$  y  $l=2$ , así que también será autoestado con  $n=3$  y  $l=2$ , que es lo que determina la densidad de probabilidad radial.

Idea feliz: las funciones radiales con  $l=l_{\max}=n-1$  tienen su densidad de prob. radial máxima en el radio de Bohr correspondiente, es decir

$$r_{\max} = n^2 r_B = 9 r_B //$$

Método normal: usamos la solución radial para  $n=3$ ,  $l=2$

$$R_{32}(r) = A e^{-\frac{r}{3r_B}} \left(\frac{r}{r_B}\right)^2 = \tilde{A} r^2 e^{-\frac{r}{3r_B}}$$

$\hookrightarrow$  La forma que hemos visto en clase → redefinimos el cte

Y maximizamos la densidad de prob. radial:

$$\mathcal{P}_r(r) = r^2 |R_{32}(r)|^2 = |\tilde{A}|^2 r^6 e^{-2r/3r_B}$$

$$\mathcal{P}'_r(r) = \left( \frac{6}{r} - \frac{2}{3r_B} \right) \mathcal{P}_r(r) = 0 \Rightarrow r = 9r_B //$$

d) Valor esperado  $r$ :

$$\langle r \rangle = \int_0^\infty r^2 dr r |R_{32}(r)|^2 = |\tilde{A}|^2 \int_0^\infty dr r^2 e^{-2r/r_B} r_B^2$$

Cambio variable para simplificar la exp:  $\rho \equiv \frac{2r}{3r_B}$

$$\langle r \rangle = |\tilde{A}|^2 \left(\frac{3r_B}{2}\right)^8 \int_0^\infty d\rho \rho^7 e^{-\rho} = 7! |\tilde{A}|^2 \left(\frac{3r_B}{2}\right)^8$$

usando  $\int_0^\infty dx x^{n-1} e^{-x} = \Gamma(n) = (n-1)!$

Por último, la constante de normalización

$$A_{ne} = \frac{2^{e+1}}{n^{e+2} (r_B)^{3/2}} \sqrt{\frac{(n-e-1)!}{(n+e)!}} \Rightarrow \hat{A} = r_B^{-2} A_{32} = \frac{2^3}{3^4 \sqrt{5!}} \frac{1}{r_B^{7/2}}$$

↳ visto en clase

$$\Rightarrow \langle r \rangle = 7! \frac{2^6}{3^8 \cdot 5! \cdot r_B^7} \left(\frac{3r_B}{2}\right)^8 = \frac{7 \cdot 6}{4} r_B = \frac{21}{2} r_B //$$

**Nota:** Por si preguntan, obviamente no tienen que saberse las fórmulas de  $R_{32}$ ,  $A_{ne}$ ... si les hacen falta se las daremos.

# SOLUCIONES HOJA 3

## ESPIN

① Representación  $s=1/2$ .

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

② Álgebra  $[S_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k$

Multiplicar las matrices para hacerlo explícitamente o usar  $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$  y el comutador de las mat. Pauli

$$[\sigma_i, \sigma_j] = i \epsilon_{ijk} \sigma_k$$

Los autovalores de  $S_x, S_y$  también es fácil de ver.

⑤  $S^2$  y  $S_{\pm}$ .

Opción 1: calcular los elementos de matriz

Opción 2: meter las mat.  $S_i$  en  $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ ,  $S_{\pm} = S_x \pm i S_y$

$$\left. \begin{aligned} \langle \pm | S^2 | \pm \rangle &= \frac{3}{4} \hbar^2 \\ \langle \pm | S^2 | \mp \rangle &= 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow S^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\langle + | S_+ | - \rangle = \langle - | S_- | + \rangle = \hbar \quad (\text{el resto } 0) \Rightarrow$$

$$\left. \begin{aligned} S_+ &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ S_- &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \right\}$$

## ② Representación matricial $S=1$ .

Por variar, calculamos elementos de matriz de  $S^2, S_z, S_{\pm}$ , y combinamos  $S_{\pm}$  para sacar  $S_x, S_y$ .

Usamos la base estándar  $|S, m\rangle \rightarrow m=-1, 0, 1 \rightarrow$  matrices  $3 \times 3$ .

Notación:  $|L+L\rangle \equiv |+\rangle, |L, 0\rangle \equiv |0\rangle, |L, -L\rangle \equiv |-\rangle$

-  $S^2$  será prop. a la identidad:

$$\langle m' | S^2 | m \rangle = 2\hbar^2 \delta_{mm'} \Rightarrow S^2 = 2\hbar^2 I$$

-  $S_z$  también diagonal:

$$\langle m' | S^2 | m \rangle = m\hbar \delta_{mm'} \Rightarrow S_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 0 & \\ & & -1 \end{pmatrix}$$

-  $S_{\pm}$  será nulo salvo la diag superior/inferior:

$$S_+ |-\rangle = \sqrt{2}\hbar |0\rangle; S_+ |0\rangle = \sqrt{2}\hbar |+\rangle; S_+ |+\rangle = 0$$

$$S_- |-\rangle = 0; S_- |0\rangle = \sqrt{2}\hbar |-\rangle; S_- |+\rangle = \sqrt{2}\hbar |0\rangle$$

$$\Rightarrow S_+ = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; S_- = \sqrt{2}\hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

- De aquí sacamos

$$S_x = \frac{S_+ + S_-}{2} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$S_y = \frac{S_+ - S_-}{2i} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

Igual que en el caso de  $s=1/2$ , se podría ver que estas matrices son realmente una representación de  $s=1$  (o sea, podríamos repetir el problema anterior).

### ③ Representación matricial en base alternativa:

$$S_z = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1+i \\ 1-i & 0 \end{pmatrix}$$

Para poder representar  $S_z$ , lo primero será que sea hermítico (observable) y tengas los autovalores correctos:

$$S_z^+ = S_z \quad \checkmark$$

$$|S_z - \lambda I| = \lambda^2 - \frac{(1-i)(1+i)}{8}\hbar^2 = \lambda^2 - \frac{\hbar^2}{4} = 0 \Rightarrow \lambda = \pm \frac{\hbar}{2} \quad \checkmark$$

Para las opciones que nos dan para  $S_y$ , primero descartamos las que no son hermíticas (o sea 1, 2 y 3). Luego pedimos tener autovalores correctos, que nos descarta la última. Nos quedamos con:

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Tenemos un base en la que  $S_y$  es diagonal, parece que estamos trabajando en la base  $\{|-\rangle_y, |+\rangle_y\}$ .

Por último, para que estas  $S_y$  y  $S_z$  sean representaciones del spin, necesitamos una  $S_x$  que complete el álgebra:

$$[S_y, S_z] = i\hbar S_x$$

$$\Rightarrow S_x = \frac{-i\hbar}{4\sqrt{2}} \left[ \begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1+i \\ 1-i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1+i \\ 1-i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & \\ & 1 \end{pmatrix} \right]$$

$$= \frac{-i\hbar}{4\sqrt{2}} \left[ \begin{pmatrix} 0 & -(1+i) \\ 1-i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & 1+i \\ -(1-i) & 0 \end{pmatrix} \right]$$

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

Se puede repetir el problema para demostrar que, estos 3 matrices son realmente una representación de  $s=1/2$ .

$$\textcircled{4} \quad \text{Helicidad} \quad h = \vec{s} \cdot \hat{\vec{p}}$$

(a) Observable  $\Rightarrow h^+ = h$ ? como  $S$  y  $P$  son observables,  $h$  también.

Escalar. En el tema 2 vimos que ser escalar es ser invariante bajo rotaciones, que equivale a commutar con el momento angular (i.e. con los generadores de las rotaciones). Eso sí, lo importante era commutar con el momento angular total, que en este caso será:

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{s}$$

De hecho, si tomamos sólo  $\vec{L}$ , vemos que no commuta:

$$[L_i, \vec{s} \cdot \vec{P}] = S_j [L_i, P_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_j P_k$$

y tampoco lo haré con  $\vec{s}$ :

$$[S_i, \vec{s} \cdot \vec{P}] = [S_i, S_j] P_j = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k P_j = -i\hbar \epsilon_{ijk} S_j P_k$$

pero sí que lo hace con  $\vec{J}$ :

$$[\vec{J}, \vec{s} \cdot \vec{P}] = [\vec{L}, \vec{s} \cdot \vec{P}] + [\vec{s}, \vec{s} \cdot \vec{P}] = 0 \Rightarrow \text{escalar} //$$

**Nota:** aquí tenemos una motivación para sumar momentos angulares, que es lo que haremos en el siguiente tema.

## ⑥ Magnitud conservada.

Para esto tendré que commutar con el  $H$  de una partícula libre:

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m}$$

usando que  $\vec{S}$  commute con todos los operadores definidos en el espacio de Hilbert de posición  $E$  y que  $[\vec{p}_i, p_j] = 0$ , obtenemos directamente:

$$[H, \vec{S} \cdot \vec{p}] = 0 \Rightarrow \text{la helicidad se conserva.}$$

## ⑦ Representación matricial.

Usamos  $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$  y  $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$ :

$$\begin{aligned} \vec{S} \cdot \vec{p} &= \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{p} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} P_z & P_x - iP_y \\ P_x + iP_y & -P_z \end{pmatrix} \\ &= -\frac{i\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} \partial_z & \partial_x - i\partial_y \\ \partial_x + i\partial_y & -\partial_z \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Y esto se podría diagonalizar y ver que sus autovalores serán  $\pm \hbar/2$  (una vez metido el  $1/|\vec{p}|$  que he olvidado en todas las cuentas).

$$(5) \quad |\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle \xrightarrow{\alpha, \beta?} \langle S_x \rangle = -\langle S_y \rangle = \frac{\sqrt{2}\hbar}{4}$$

Usamos mejor  $S_{\pm}$ : [+/- podríamos usar las matrices]

$$S_x|\psi\rangle = \frac{S_+ + S_-}{2}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{2}(\alpha|-\rangle + \beta|+\rangle)$$

$$S_y|\psi\rangle = \frac{S_+ - S_-}{2i}|\psi\rangle = \frac{\hbar}{2i}(\alpha|-\rangle - \beta|+\rangle)$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2}(\alpha\beta^* + \alpha^*\beta) = \hbar \operatorname{Re}(\alpha\beta^*) = \frac{\sqrt{2}\hbar}{4} \\ \langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2i}(\alpha\beta^* - \alpha^*\beta) = \hbar \operatorname{Im}(\alpha\beta^*) = -\frac{\sqrt{2}\hbar}{4} \end{cases}$$

$$\Rightarrow \alpha\beta^* = \frac{1-i}{2\sqrt{2}}$$

Normalizando:

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = |\alpha|^2 + \frac{1}{4|\alpha|^2} = 1 \Rightarrow 4|\alpha|^4 - 4|\alpha|^2 + 1 = (2|\alpha|^2 - 1)^2 = 0$$

$$\Rightarrow |\alpha|^2 = 1/2 \xrightarrow{\text{asumimos } \alpha \text{ real}} \alpha = 1/\sqrt{2}$$

$$\Rightarrow \beta = \frac{1+i}{2} \Rightarrow |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1+i}{2}|-\rangle$$

$$⑥ |\psi\rangle \quad s=1/2. \quad \langle S_z \rangle = \frac{\sqrt{3}}{4} \hbar.$$

$$⑦ \text{ Prob. medir } S_z = \pm \hbar/2.$$

Como  $|+\rangle$  forman una base:  $|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$ ,  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$ .

$$\Rightarrow \langle S_z \rangle = \langle \psi | S_z | \psi \rangle = \frac{\hbar}{2} |\alpha|^2 - \frac{\hbar}{2} |\beta|^2 = \frac{\hbar}{2} (|\alpha|^2 - |\beta|^2) = \frac{\sqrt{3}}{4} \hbar$$

$$\begin{cases} |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \\ |\alpha|^2 - |\beta|^2 = \frac{\sqrt{3}}{2} \end{cases} \Rightarrow |\alpha|^2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\sqrt{3}}{2} \right) = \frac{2 + \sqrt{3}}{4} \Rightarrow |\beta|^2 = \frac{2 - \sqrt{3}}{4}$$

$$\Rightarrow P_{S_z = +\hbar/2} = |\alpha|^2 = \frac{2 + \sqrt{3}}{4}, \quad P_{S_z = -\hbar/2} = |\beta|^2 = \frac{2 - \sqrt{3}}{4}$$

$$⑧ \langle S_x \rangle = g\hbar, \quad y \quad \alpha > 0 \Rightarrow \text{límites } g?$$

Varias opciones de calcular  $\langle S_x \rangle$ . Podríamos usar que los autoestados de  $S_x$  se relacionan con los de  $S_z$  como  $| \pm \rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+ \rangle \pm |- \rangle)$  y proyectar  $|\psi\rangle$  sobre ellos. Otra opción es calcular directamente el valor medio sandwicheando  $S_x$ , usando tanto la rep. matricial como  $S_{\pm}$ .

$$S_x = \frac{S_+ + S_-}{2}$$

Vamos a hacer esto último:

$$S_x |\psi\rangle = \frac{S_+ + S_-}{2} (\alpha|+ \rangle + \beta|- \rangle) = \frac{\hbar}{2} (\alpha|-\rangle + \beta|+\rangle)$$

$$\Rightarrow \langle S_x \rangle = \langle \psi | S_x | \psi \rangle = \frac{\hbar}{2} (\alpha^* \langle + | + \beta^* \langle - |) (\alpha | - \rangle + \beta | + \rangle) = \frac{\hbar}{2} \alpha \operatorname{Re} \beta$$

Comparando con el enunciado:  $g = \alpha \operatorname{Re} \beta$ .

Para sacar su rango, venmos los tamaños posibles de  $\operatorname{Re} \beta$ :

$$|\alpha|^2 = \frac{2+\sqrt{3}}{4} \Rightarrow \alpha = \frac{1}{2} \sqrt{2+\sqrt{3}}$$

$$|\beta|^2 = \frac{2-\sqrt{3}}{4} \Rightarrow |\operatorname{Re} \beta| \leq |\beta| = \frac{1}{2} \sqrt{2-\sqrt{3}}$$

$$\Rightarrow |g| = \alpha |\operatorname{Re} \beta| = \frac{1}{4} \sqrt{4-3} = \frac{1}{4} \Rightarrow -\frac{1}{4} \leq g \leq \frac{1}{4}$$

④)  $g = 0 \quad o \quad g = \frac{3}{8}$ .

El caso  $g = \frac{3}{8}$  es imposible según el apartado anterior.

El caso  $g = 0$  implicaría:

$$g = \alpha \operatorname{Re} \beta = 0 \xrightarrow{\alpha \neq 0} \operatorname{Re} \beta = 0 \Rightarrow \beta \text{ puro imaginario, pero OK.}$$

⑤)  $\langle S_y \rangle$

$$S_y |\psi\rangle = \frac{S_+ - S_-}{2i} (\alpha |+\rangle + \beta |-\rangle) = \frac{\hbar}{2i} (-\alpha |-\rangle + \beta |+\rangle)$$

$$\Rightarrow \langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2i} (\alpha^* \beta - \alpha \beta^*) = \frac{\hbar}{2} \alpha \operatorname{Im} \beta.$$

Como el rango de variación de  $\operatorname{Im} \beta$  es igual que  $\operatorname{Re} \beta$ ,  $S_y$  tendrá el mismo rango que  $S_x$ :

$$-\frac{\hbar}{4} \leq S_y \leq \frac{\hbar}{4}$$

$$⑦ |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle)$$

ⓐ Medida  $S_z$ : igual que antes:

$$P_{S_z=+\frac{\hbar}{2}} = |\langle + | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{2}$$

Medida  $S_x$ : se vuelve trivial si nos damos cuenta que  $|\psi\rangle$  es autoestado de  $S_x$ :

$$|\psi\rangle = |+\rangle_x \Rightarrow P_{S_x=+\frac{\hbar}{2}} = 1.$$

ⓑ Chorro 50%  $|+\rangle$  y 50%  $|-\rangle$ .

La diferencia es que ahora NO tenemos un estado coherente, sino una suma incoherente de estados  $| \pm \rangle$ .

Al medir  $S_z$  no notaremos la diferencia, porque el 50% nos dará  $+\frac{\hbar}{2}$  y el 50%  $-\frac{\hbar}{2}$ , así que la probabilidad que buscamos seguirá siendo  $\frac{1}{2}$ :

$$P_{S_z=+\frac{\hbar}{2}} = 50\% \underbrace{P_{S_z=+\frac{\hbar}{2}}^{(+)}}_1 + 50\% \underbrace{P_{S_z=-\frac{\hbar}{2}}^{(-)}}_0 = \frac{1}{2}$$

Antes cada  $e^-$  tenía una prob del 50% de dar  $S_z=+\frac{\hbar}{2}$ , ahora cada  $e^-$  tiene un  $S_z$  definido, pero tenemos

un 50% de prob. de elegir un  $e^-$  con  $S_z = +\frac{\hbar}{2}$ .  
 El estado es distinto, pero la respuesta global  
 del chorro bajo  $S_z$  no cambia.

Donde sí cambiará será para  $S_x$ . Antes teníamos  
 todos los  $e^-$  en  $|+S_x\rangle$ , así que siempre mediábamos  
 $S_x = +\frac{\hbar}{2}$ .

Como ahora no tenemos una superposición, no tenemos  
 $|+S_x\rangle$ , y tenemos que sumar las probabilidades  
 incoherenteamente. Como cada estado  $| \pm \rangle$  tiene una  
 probabilidad de  $\frac{1}{2}$  de dar  $S_x = +\frac{\hbar}{2}$ :

$$P_{S_x=+\frac{\hbar}{2}} = 50\% P_{S_x=+\frac{\hbar}{2}}^{+>} + 50\% P_{S_x=+\frac{\hbar}{2}}^{->} = \frac{1}{2}$$

Así que podemos distinguir los chorros de estados  
 coherentes e incoherentes midiendo  $S_x$

$$\textcircled{8} \quad \Psi_+(\vec{r}) = f(r) \left[ Y_0^0 + \frac{1}{\sqrt{3}} Y_1^0 \right]$$

$$\Psi_-(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{3}} f(r) \left[ Y_1' - Y_1^0 \right]$$

$$\Psi(\vec{r}, s) = \begin{pmatrix} \Psi_+(\vec{r}) \\ \Psi_-(\vec{r}) \end{pmatrix}$$

c) Normalización  $f(r)$ :

Integramos en todo  $\vec{r}$ , sumamos en espín:

$$\sum_s \int d^3\vec{r} |\Psi(\vec{r}, s)|^2 = \int d^3r \left( |\Psi_+(\vec{r})|^2 + |\Psi_-(\vec{r})|^2 \right)$$

$$= \int r^2 dr |f(r)|^2 \int d\Omega \left( |Y_0^0|^2 + \frac{1}{3} |Y_1^0|^2 + \frac{1}{3} |Y_1'|^2 + \frac{1}{3} |Y_1''|^2 \right)$$

$$= 2 \int r^2 dr |f(r)|^2 \equiv 1 \Rightarrow \int r^2 dr |f(r)|^2 = 1/2$$

⑤ Medidas  $S_z$ : mediremos  $\pm \hbar/2$  con probabilidades:

$$P_{S_z=+\frac{\hbar}{2}} = \int d^3\vec{r} |\langle \vec{r}, + | \Psi \rangle|^2 = \int d^3r |\Psi_+(r)|^2$$

$$= \int r^2 dr |f(r)|^2 \int d\Omega \left( |Y_0^0|^2 + \frac{1}{3} |Y_1^0|^2 \right) = 2/3_{//}$$

$$P_{S_z=-\frac{\hbar}{2}} = \int d^3\vec{r} |\Psi_-(\vec{r})|^2 = \frac{1}{6} \int d\Omega (|Y_1'|^2 + |Y_1''|^2) = 1/3_{//}$$

Medidas  $S_x$ : también  $\pm \hbar/2$ ; las prob las sacamos proyectando sobre

$$| \pm s_x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (| + \rangle \pm | - \rangle)$$

→ sum coherente

$$\begin{aligned} P_{S_x=+\frac{\hbar}{2}} &= \int d^3r | \langle x | + | \psi_s \rangle |^2 = \int d^3r | \psi_+(\vec{r}) + \psi_-(\vec{r}) |^2 \\ &= \int r^2 dr | f(r) |^2 \int d\Omega | Y_i^0 + \frac{1}{\sqrt{3}} Y_i' |^2 = 1/3 // \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_{S_x=-\frac{\hbar}{2}} &= \int d^3r | \langle x | - | \psi_s \rangle |^2 = \int d^3r | \psi_+(\vec{r}) - \psi_-(\vec{r}) |^2 \\ &= \int r^2 dr | f(r) |^2 \int d\Omega | Y_i^0 + \frac{2}{\sqrt{3}} Y_i' - \frac{1}{\sqrt{3}} Y_i'' |^2 = 2/3 // \end{aligned}$$

② Medidas  $L_z$ : Tenemos  $Y_e^m$  con  $m=0, \pm 1$ . Las probabilidades las podemos sacar de las fórmulas generales igual que antes, o podemos convolucionar las probabilidades de medir  $S_z$  con la de medir  $L_z$  en cada  $\psi_{\pm}$ :

$$\begin{aligned} P_{L_z=0} &= P_{S_z=+\frac{\hbar}{2}} \cdot P_{L_z=0}^{\psi_+} + P_{S_z=-\frac{\hbar}{2}} \cdot P_{L_z=0}^{\psi_-} \\ &= \frac{2}{3} \cdot 1 + \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{2} = 5/6 // \end{aligned}$$

$$P_{L_z=\hbar} = \frac{2}{3} \cdot 0 + \frac{1}{3} \cdot \frac{1}{2} = 1/6 //$$

Medidas  $L^2$ : tenemos  $\ell=0, 1$ :

$$P_{L^2=0} = \frac{2}{3} \cdot \frac{3}{4} + \frac{1}{3} \cdot 0 = \frac{1}{2} //$$

$$P_{L^2=2\hbar^2} = \frac{2}{3} \cdot \frac{1}{4} + \frac{1}{3} \cdot 1 = \frac{1}{6} + \frac{1}{3} = \frac{1}{2} //$$

#### ④ Colapso f.d.o.

Si medimos  $L^2=0$ : la función de onda justo después de la medida será autovector de  $L^2$  con  $\ell=0$ :

$$\begin{aligned} \psi_+^{L^2=0} &\sim f(r) Y_0^\circ \\ \psi_-^{L^2=0} &\sim 0 \end{aligned} \Rightarrow \psi^{L^2=0} \propto \begin{pmatrix} f(r) Y_0^\circ \\ 0 \end{pmatrix}$$

Si medimos  $L^2=2\hbar^2$ :

$$\begin{aligned} \psi_+^{L^2=2\hbar^2} &\sim \frac{1}{\sqrt{3}} f(r) Y_1^\circ \\ \psi_-^{L^2=2\hbar^2} &\sim \psi_- \end{aligned} \Rightarrow \psi^{L^2=2\hbar^2} \propto \frac{1}{\sqrt{3}} f(r) \begin{pmatrix} Y_1^\circ \\ Y_1' - Y_1^\circ \end{pmatrix}$$

↳ Donde los  $\alpha$  habrá que quitarlos renormalizando las nuevas f.d.o.

# SOLUCIONES HOJA 4

## SUMA DE MOMENTOS ANGULARES

### ① Reproducir CG.

En principio no está pensado para resolverlo en clase, más bien para que viéndolo como ejercicio alguien se anime a practicar un poco. Además, en clase sacamos las tablas más simples  $\frac{1}{2} \times \frac{1}{2}$  y  $L = \frac{1}{2}$ .

Pero vamos, por si queréis repasar la forma esquemática de sacarlo para  $J = J_1 + J_2$ .

1. Empezar en un extremo, ya que podemos identificar el estado con  $J_{\max} = M_{\max} = j_1 + j_2$ :

base  $|J, M\rangle \rightarrow |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle = |j_1, j_2\rangle \leftarrow$  base  $|m_1, m_2\rangle$

2. Aplicando  $J_- = J_{1-} + J_{2-}$  a cada lado sacamos secuencialmente los demás estados con  $J = j_1 + j_2$ .

3. El segundo bloque de la tabla, el subespacio de Hilbert con  $M = j_1 + j_2 - 1$  tiene dim-2 y ya conocemos uno de sus vectores:  $|j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1\rangle$ .

El otro será el  $|j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1\rangle$ , que lo sacamos por ortogonalidad y cogiendo los CG reales.

4. Repetimos el paso 2 para sacar todos los estados con  $J = j_1 + j_2 - 1$ .

5. Repetimos los pasos 3 y 4 para

$$J = j_1 + j_2 - 2, \dots, |j_1 - j_2|$$

## ② Sumar $L+L$ :

$1 \times 1$	$\begin{matrix} 2 \\ +2 \\ +1+1 \\ +1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 2 \\ +1 \\ +1 \\ 0+1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} +2-1 & 1/15 & 1/3 & 3/5 \\ +1 & 0 & 8/15 & 1/6-3/10 \\ 0+1 & 2/5 & -1/2 & 1/10 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 3 \\ 0 \\ 0 \end{matrix}$
$+1+1$	$\begin{matrix} 1 \\ +1 \\ +1 \\ 0+1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2-1/2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix}$	$\begin{matrix} +1-1 & 1/5 \\ 0 & 0 \\ -1+1 & 1/5 \end{matrix}$
$+1$	$\begin{matrix} 0 \\ 0+1 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1/2 \\ 1/2-1/2 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 1/6 & 1/2 & 1/3 \\ 2/3 & 0-1/3 \\ -1+1 & 1/6-1/2 & 1/3 \end{matrix}$	$\begin{matrix} 2 & 1 \\ -1 & -1 \end{matrix}$
$Y_\ell^{-m} = (-1)^m Y_\ell^{m*}$			$\begin{matrix} 0-1 & 1/2 & 1/2 & 2 \\ -1 & 0 & 1/2-1/2 & -2 \\ -1-1 & 1 \end{matrix}$	$d$

para que practiquen leyendo los CG

$$\vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2$$

$$|LM\rangle \leftrightarrow$$

$$\langle m_1, m_2 \rangle$$

$$|LM\rangle = |m_1, m_2\rangle$$

$$|22\rangle = |LL\rangle$$

$$|21\rangle = (|LO\rangle + |OL\rangle)/\sqrt{2}$$

$$|20\rangle = (|L-L\rangle + \sqrt{2}|00\rangle + |-LL\rangle)/\sqrt{6}$$

$$|2-1\rangle = (|O-L\rangle + |-L0\rangle)/\sqrt{2}$$

$$|2-2\rangle = |-L-L\rangle$$

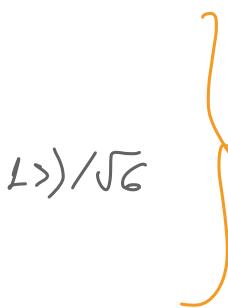
$$L=2$$

SIMÉTRICO

$$|LL\rangle = (|LO\rangle - |OL\rangle)/\sqrt{2}$$

$$|L0\rangle = (|L-L\rangle - |-LL\rangle)/\sqrt{2}$$

$$|L-L\rangle = (|O-L\rangle - |-L0\rangle)/\sqrt{2}$$



$$L=1$$

ANTISIMÉTRICO

(por eso no sale el |m<sub>1</sub>, m<sub>2</sub>> = |0, 0>)

$$|OO\rangle = (|L-L\rangle - |O0\rangle + |-L0\rangle)/\sqrt{3} \quad \{ \quad L=0, \text{ SIMÉTRICO}$$

$$\textcircled{3} \quad \vec{F} = \vec{J} + \vec{I} = \vec{L} + \vec{S} + \vec{I} ; \quad I=1, \quad S=\frac{1}{2}.$$

$\rightarrow$  Estado  $1s \rightarrow l=0$

Tenemos que  $\vec{J} = \vec{S}$ , así que  $J = \frac{1}{2}$ .

$$\vec{F} = \vec{S} + \vec{I} \Rightarrow F = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}.$$

Donde hemos usado que para  $\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2$ , el número cuántico  $J$  asociado al  $J^2$  total toma los valores

$$J = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2|$$

$\rightarrow$  Estado  $2p \rightarrow l=1$ .

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \Rightarrow J = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}.$$

$$\vec{F} = \vec{J} + \vec{I} \left\{ \begin{array}{l} J = \frac{3}{2} \Rightarrow F = \frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \\ J = \frac{1}{2} \Rightarrow F = \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \end{array} \right\} \quad F = \frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}.$$

Se repiten valores, pero simplemente nos dice que tenemos varios formas de combinar cada momento angular para llegar al mismo momento angular total. Por tanto, el subespacio de Hilbert  $E(J)$  asociado a ese valor de  $J$  será mayor.

$$\textcircled{4} \quad \begin{aligned} l_1 &= 7, \quad l_2 = 1, \quad l_3 = 6 \\ m_1 &= -7, \quad l_2 = 0, \quad m_3 = -6 \end{aligned} \quad \left\{ \quad \vec{L} = \vec{l}_1 + \vec{l}_2 + \vec{l}_3$$

Tenemos que sumar 3 momentos angulares, pero sólo sabemos sumar 2. Lo bueno es que sabemos que la suma de dos M.A. es también un M.A., así que sumamos primero 2 y el resultado le sumamos el tercero.

En principio da igual en qué orden los combinemos, deberíamos llegar a lo mismo, pero en este caso es más fácil empezar sumando el primero y el tercero, porque ambos están alineados hacia  $-\vec{l}_2$ , así que sabemos que combinarán al estado con  $\vec{l}_1 + \vec{l}_3$  más alto:

$$\vec{l}_{13} = \vec{l}_1 + \vec{l}_3 \Rightarrow |7, 6; -7, -6\rangle = |7, 6; 13, -13\rangle \\ |l_1, l_3; m_1, m_3\rangle \quad |l_1, l_3; L_{13}, M_{13}\rangle$$

Y este  $|13, -13\rangle$  lo sumamos al  $|1, 0\rangle$ , que nos da dos posibilidades:

$$\vec{L} = \vec{l}_{13} + \vec{l}_2 \Rightarrow |13, 1; -13, 0\rangle = \left\{ \begin{array}{l} |13, 1; 14, -13\rangle \\ |13, 1; 13, -13\rangle \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} |l_{13}, l_2; L, M\rangle \\ \text{Combinación de estos dos pesos por sus CG.} \end{array}$$

Así que mediremos  $L = 13 \circ 14$ , con sus prob. dadas por los CG. Fijos que sumar  $13 \oplus L$  también da  $L=12$ , pero no con  $M = m_1 + m_2 + m_3 = -13$ .

$$\textcircled{5} \quad \vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3 \quad S_1 = S_2 = S_3 = \frac{1}{2} \quad (\text{notación } | \frac{1}{2}, \pm \frac{1}{2} \rangle \equiv | \pm \rangle)$$

Sumamos primero  $\vec{S}_{12} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ , que sabemos que nos da el singlete más triplete:

$$S_{12} = 0 \rightarrow |0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle)$$

$$S_{12} = 1 \rightarrow \begin{cases} |1, 1\rangle = |++\rangle \\ |1, 0\rangle = (|+-\rangle + |-+\rangle)/\sqrt{2} \\ |1, -1\rangle = |--\rangle \end{cases}$$

A estos dos espines totales le sumamos el tercero.

Nota: Tenemos que sumar  $0 \times \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$  y  $1 \times \frac{1}{2} = \frac{1}{2} \oplus \frac{3}{2}$ , de modo que nos saldrán el doble de estados para  $S = \frac{1}{2}$ . No pasa nada, simplemente nos dice que hay varias formas de combinar los  $S_i$  para de forma que tengan  $S$  total  $\frac{1}{2}$ . De todas formas, para evitar confusiones ponemos explícitos los valores de  $S_{12}$  y  $S_3$  que estamos combinando (y normalmente omitimos).

El singlete es trivial:

$$S_{12}=0 \Rightarrow S = \frac{1}{2}:$$

$$S = \frac{1}{2} \begin{cases} |S_{12}, S_3; S, M\rangle & |M_{12}, m_3\rangle & |m_1, m_2, m_3\rangle \\ |0, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = |0, +\rangle & = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle) \\ |0, \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = |0, -\rangle & = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+--\rangle - |-+-\rangle) \end{cases}$$

$S_{12} = 1 \Rightarrow S = 1/2, 3/2$ : usamos la tabla CG:

$$|S_{12}, s_3; S_r, M\rangle \quad |M_{12}, m_3\rangle \quad |m_1, m_2, m_3\rangle$$

$$\left\{ \begin{array}{l} |1, 1/2; 3/2, 3/2\rangle = |1, +\rangle = |+++> \\ |1, 1/2; 3/2, 1/2\rangle = \frac{|1-\rangle + \sqrt{2}|0+\rangle}{\sqrt{3}} = \frac{1}{\sqrt{3}}(|++-\rangle + |+-+\rangle + |-++\rangle) \\ |1, 1/2; 3/2, -1/2\rangle = \frac{\sqrt{2}|0-\rangle + |1+\rangle}{\sqrt{3}} = \frac{1}{\sqrt{3}}(|+--\rangle + |-+-\rangle + |---\rangle) \\ |1, 1/2; 3/2, -3/2\rangle = |1-\rangle = |---> \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} |1, 1/2; 1/2, 1/2\rangle = \frac{\sqrt{2}|1-\rangle - |0+\rangle}{\sqrt{3}} = \frac{1}{\sqrt{6}}(2|++-\rangle - |+-+\rangle - |-++\rangle) \\ |1, 1/2; 1/2, -1/2\rangle = \frac{|0-\rangle - \sqrt{2}|1+\rangle}{\sqrt{3}} = \frac{1}{\sqrt{6}}(|+--\rangle + |-+-\rangle - 2|---\rangle) \end{array} \right.$$

En total obtenemos 8 estados, 4 con  $S = 3/2$  y 2 + 2 con  $S = 1/2$ , cada uno con una combinación de  $S_1 + S_2$  distinta. Como debe ser, son el mismo número de estados que combinando los espines de las tres partículas:

$$2 \times 2 \times 2 = 4 + 2 + 2$$

# SOLUCIONES HOJA 5

## PARTÍCULAS IDENTICAS

### ① Teorema Espín-Estadística partículas compuestas

Nota: en clase hemos hecho la identificación

bosón  $\leftrightarrow$  s entero

fermión  $\leftrightarrow$  s semientero

a huevo, simplemente como parte del postulado de simetrización. Hemos mencionado que existe algo más profundo en QFT que lo demuestre, pero nada más.

Asumimos que las partículas fundamentales, aquellas que no están compuestas por nada aún más fundamental, cumplen este teorema, esta relación entre simetría y espín.

Una partícula compuesta estará formada por varias partículas fundamentales, y su espín será la suma de los espines de todas las fundamentales y del momento angular total (si lo tienen).

La simetría de intercambio entre dos partículas compuestas la podemos ver como el intercambio de todas las partículas fundamentales de la primera partícula compuesta con todas las de la segunda:

$$\Pi: q_1 \dots q_n \Rightarrow \Pi^a \Pi^L: \underbrace{q_1^a \dots q_n^a}_{\downarrow} \underbrace{q_1^L \dots q_n^L}_{\downarrow} = q_1^L \dots q_n^L q_1^a \dots q_n^a : \Pi^L \Pi^a$$

$\hookrightarrow \Pi$ : partícula compuesta por n fundamentales  $q$ .

## Part. Fundamentales Bosónicas.

↳ Sim: como cada intercambio de bosones fundamentales es simétrico, no cambia signo, la partícula compuesta también será simétrica:  $\Pi^a \Pi^b = \Pi^b \Pi^a$ .

↳ Espín: como el espín de cada bosón fundamental es entero, la suma de espines también lo será. Y en caso de tener  $L$  también será entero, así que el espín de la partícula compuesta será entero.

Formado por bosones:  $\Pi$  bosón con  $S$  entero ✓

## Part. fundamental fermiónica:

Sim: ahora cada intercambio nos mete un signo, así que  $\Pi$  será simétrico si está formado por un número par de fermiones y antisim. si es impar.

Espín: ahora sumamos espines semienteros, que dará algo entero si tenemos un número par de fermiones y algo semientero si tenemos un número impar. Como  $L$  es siempre entero, no cambia el counting. Entonces:

#par fermiones:  $\Pi$  bosón con  $S$  entero ✓

#impar fermiones:  $\Pi$  fermión con  $S$  semientero ✓

Ej: en el SM los building blocks suelen ser quarks, fermiones  $s=\frac{1}{2}$ , que forman hadrones: mesones  $q\bar{q}$ : bosones con  $S$  entero ( $\pi, K, \eta, \dots$ ) báriones  $qqq$ : fermiones con  $S$  semi ( $p, n, \dots$ )

## ② $\Delta^{++}$

Un barión es una partícula formada por 3 quarks (o 3 antiquarks), siendo los quarks partículas fundamentales de  $s=1/2$ , y por tanto fermiones. La carga de un barión es la suma de cargas de los quarks. En el caso del  $\Delta^{++}$ , la única opción que tenemos es que esté formada por 3 quarks u, cada uno con carga  $+2/3$ . ( $m_{\Delta^{++}} \sim 1.2 \text{ GeV}$ , así que no puede tener otros quarks, que tampoco sé si se conocían en aquél entonces...). Como sólo podemos tener u-s con  $s=\pm 1/2$ , sólo podemos juntar 2 quarks u, así que es imposible tener uuu.

Además, el espín de  $\Delta^{++}$  es  $s=3/2$ , así que tendríamos que alinear los 3 espines de los quarks para que sumen  $s=3/2$ . Es decir, un  $\Delta^{++}$  tendría que estar formado por 3 quarks u con el mismo espín, que está mega-excluido por el principio de Pauli.

Pero el  $\Delta^{++}$  con  $s=3/2$  existe. ¿Cómo es posible?

Esta contradicción entre teoría y experimento llevó a Gell-mann a extender la teoría (creo que en 1965). Dijo que para poder tener 3 quarks en el mismo estado y espín pero seguir cumpliendo el principio de exclusión de Pauli debían tener algún número cuántico adicional y con al menos 3 valores distintos. A este número cuántico lo llamó color, por analogía a la teoría de color de toda la vida de pintura, y dijo

que venían en 3 colores: rojo, verde y azul. De esta forma el  $\Delta^{++}$  estaría formado por:

$$|\Delta^{++, m=\frac{3}{2}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{6!}} \begin{vmatrix} |1: u_r, \uparrow\rangle & |2: u_b, \uparrow\rangle & |2: u_g, \uparrow\rangle \\ |2: u_r, \uparrow\rangle & |2: u_b, \uparrow\rangle & |2: u_g, \uparrow\rangle \\ |3: u_r, \uparrow\rangle & |3: u_b, \uparrow\rangle & |3: u_g, \uparrow\rangle \end{vmatrix}$$

$\hookrightarrow$  los 3 u-s con spin-up.

Esto fue el inicio de la cromodinámica cuántica, nuestra teoría cuántica de campos de la interacción nuclear fuerte que se encarga de mantener unidas los núcleos.

③ Diferencia entre partícula y antipartícula aunque no midamos su carga

$$|\phi\rangle \text{ y } |x\rangle ; \quad A|\alpha_i\rangle = \alpha_i|\alpha_i\rangle$$

Nos piden la prob. de medir  $(\alpha_i, \alpha_j)$ , que la sacamos de proyectar sobre el estado  $|\alpha_i, \alpha_j\rangle$

$$P(\alpha_i, \alpha_j) = |\langle \alpha_i, \alpha_j | \psi \rangle|^2$$

Lo único que tenemos que tener cuidado con la simetría de las partículas en cada caso:

## ② Dos $e^-$ .

Como son fermiones, antisimétrizamos la función de onda en la que se encuentran inicialmente:

$$A|\phi, \chi\rangle = \frac{1-P_2}{2}|\phi, \chi\rangle = \frac{1}{2}(|\phi, \chi\rangle - |\chi, \phi\rangle)$$

$\xrightarrow{\text{normalizamos}}$   $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\phi, \chi\rangle - |\chi, \phi\rangle)$

asumimos  $|\phi\rangle, |\chi\rangle$  normalizados

Igual para el estado final:

$$|\alpha_i, \alpha_j\rangle \xrightarrow{A} \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha_i, \alpha_j\rangle - |\alpha_j, \alpha_i\rangle) \equiv |\psi_a\rangle$$

Entonces:

$$\begin{aligned} \langle \psi_a | \psi \rangle &= \frac{1}{2}(\langle \alpha_i | \alpha_j \rangle - \langle \alpha_j | \alpha_i \rangle)(|\phi, \chi\rangle - |\chi, \phi\rangle) \\ &= \langle \alpha_i | \phi \rangle \langle \alpha_j | \chi \rangle - \langle \alpha_i | \chi \rangle \langle \alpha_j | \phi \rangle \end{aligned}$$

Es ojo con la notación:  $|\phi, \chi\rangle = |1:\phi\rangle \otimes |2:\chi\rangle$  (part. 1 en  $\phi$ , 2 en  $\chi$ )

$$\Rightarrow \langle \alpha_i, \alpha_j | \phi, \chi \rangle = (\langle 1: \alpha_i | \otimes \langle 2: \alpha_j |)(|1: \phi\rangle \otimes |2: \chi\rangle) = \langle \alpha_i | \phi \rangle \langle \alpha_j | \chi \rangle = \langle \alpha_j | \alpha_i | \chi, \phi \rangle$$

$$\Rightarrow P(\alpha_i, \alpha_j) = |\langle \alpha_i | \phi \rangle \langle \alpha_j | \chi \rangle - \langle \alpha_i | \chi \rangle \langle \alpha_j | \phi \rangle|^2 \quad 2e^-$$

Tenemos la prob. de las dos configuraciones (que  $\phi$  de  $\alpha_i$  y  $\chi$  de  $\alpha_j$ , y al revés), pero con interferencia por ser part. idénticas. De hecho  $P(\alpha_i, \alpha_i) = 0$ , como debe ser según la exclusión de Pauli.

## ⑤ $e^-$ y $e^+$

Como ahora tenemos dos partículas distinguibles, no tenemos que antisimetrizar. Podemos numerar las partículas, por ejemplo 1 al  $e^-$  y 2 al  $e^+$ , de forma que el estado inicial será:

$$|\psi\rangle = |\phi, \chi\rangle$$

Al realizar la medida, como no medimos la carga, no podemos saber si el  $e^-$  ha dado  $a_i$  y el  $e^+$   $a_j$ , o al revés, así que tenemos dos opciones de configuración final que nos valen. Pero como son ortogonales, sumamos las prob. incoherently:

$$\begin{aligned} P(a_i, a_j) &= |c_{a_i, a_j}|\langle\psi, \chi\rangle|^2 + |c_{a_j, a_i}|\langle\phi, \chi\rangle|^2 \\ &= |c_{a_i}|\langle\phi\rangle|^2 |c_{a_j}|\langle\chi\rangle|^2 + |c_{a_i}|\langle\chi\rangle|^2 |c_{a_j}|\langle\phi\rangle|^2 \end{aligned}$$

$e^- e^+$

A pesar que el experimento no nos permita diferenciar  $e^+$  y  $e^-$ , realmente son dos partículas distintas (un exp. más completo sí que las distinguiría) y por tanto el postulado de simetrización no aplica. Los prob. se suman incoherently, sin interferencia, y por tanto no hay problema en tener ambas partículas en el mismo estado,  $P(a_i, a_i) \neq 0$ .

Para bosones igual, sólo que tendremos interferencia constructiva si son idénticos y por tanto no aplicará Pauli.

④ Fuerza Intercambio  $\Psi_{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi(\vec{r}_1) \chi(\vec{r}_2) \pm \chi(\vec{r}_1) \phi(\vec{r}_2)]$

Queremos calcular el valor medio de la distancia relativa:

$$\begin{aligned} \langle (r_1 - r_2)^2 \rangle &= \int d^3 r_1 d^3 r_2 (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 \\ &= \int d^3 r_1 d^3 r_2 (r_1^2 + r_2^2 - 2\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2) |\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 \end{aligned}$$

Imaginemos que no hubiesemos simetrizado y que tenemos simplemente

$$\Psi_{12}(r_1, r_2) = \phi(r_1) \chi(r_2) \Rightarrow |\Psi_{12}(r_1, r_2)|^2 = |\phi(r_1)|^2 |\chi(r_2)|^2$$

↳ notación pero recordar que numeramos las partículas.

Entonces,

$$\begin{aligned} \langle (r_1 - r_2)^2 \rangle_{\Psi_{12}} &= \int d^3 r_1 d^3 r_2 (r_1^2 + r_2^2 - 2\vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2) |\phi(r_1)|^2 |\chi(r_2)|^2 \\ &= \int d^3 r_1 r_1^2 |\phi(r_1)|^2 + \int d^3 r_2 r_2^2 |\chi(r_2)|^2 - 2 \int d^3 r_1 \vec{r}_1 |\phi(r_1)|^2 \int d^3 r_2 \vec{r}_2 |\chi(r_2)|^2 \\ &= \langle r_1^2 \rangle_\phi + \langle r_2^2 \rangle_\chi - 2 \langle \vec{r}_1 \rangle_\phi \cdot \langle \vec{r}_2 \rangle_\chi \end{aligned}$$

Es fácil de calcular porque la densidad de prob. es factorizable en  $\vec{r}_1$  y  $\vec{r}_2$ . El postulado de simetrización nos joderá esto:

$$\begin{aligned} |\Psi_{\pm}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 &= \frac{1}{2} (\phi(r_1) \chi(r_2) \pm \chi(r_1) \phi(r_2)) (\phi^*(r_1) \chi^*(r_2) \pm \chi^*(r_1) \phi^*(r_2)) \\ &= \frac{1}{2} \left\{ |\phi(r_1)|^2 |\chi(r_2)|^2 + |\chi(r_1)|^2 |\phi(r_2)|^2 \right. \\ &\quad \left. \pm \phi(r_1) \chi(r_2) \chi^*(r_1) \phi^*(r_2) \pm \chi(r_1) \phi(r_2) \phi^*(r_1) \chi^*(r_2) \right\} \end{aligned}$$

La primera fila factoriza y es igual que antes para ambos términos, ya que  $(r_1 - r_2)^2$  es simétrico. Pero la segunda fila no factoriza, y de hecho depende del signo. Lo calculamos explícitamente, recordando que  $\phi$  y  $\chi$  son ortogonales:  $\langle \phi | \chi \rangle = \int d^3r \phi^*(r) \chi(r) = 0$

$$\begin{aligned} & \int d^3r_1 d^3r_2 (r_1 - r_2)^2 \frac{1}{2} (\phi(r_1) \chi(r_2) \chi^*(r_1) \phi^*(r_2) + r_1 \leftrightarrow r_2) \\ &= \cancel{\int d^3r_1 r_1^2 \phi(r_1) \chi^*(r_1)} \cancel{\int d^3r_2 \chi(r_2) \phi^*(r_2)}^0 \\ &+ \cancel{\int d^3r_1 \phi(r_1) \chi^*(r_1)}^0 \int d^3r_2 r_2^2 \chi(r_2) \phi^*(r_2) \\ &- 2 \int d^3r_1 \vec{r}_1 \phi(r_1) \chi^*(r_1) \int d^3r_2 \vec{r}_2 \phi^*(r_2) \chi(r_2) = -2 |\langle \phi | \vec{r} | \chi \rangle|^2 \end{aligned}$$

Este "valor esperado cruzado" mide el grado de solapamiento entre ambas funciones de onda, que se anulará si  $\phi$  y  $\chi$  están tan separadas en  $\vec{r}$  que se pueden distinguir.

Juntando todo, tenemos que el valor esperado para el estado simetrizado es igual que el de sin simetría más una corrección proporcional al (modulo del) solapamiento:

$$\langle (r_1 - r_2)^2 \rangle_{\psi_s} = \langle (r_1 - r_2)^2 \rangle_{\psi_0} \mp 2 |\langle \phi | \vec{r} | \chi \rangle|^2$$

Vemos que, de media, los bosones están más cerca entre sí que los fermiones, como si hubiese una "fuerza" de repulsión. Esto se conoce como fuerza de intercambio, aunque obviamente no es una fuerza real, sólo una consecuencia del postulado de simetrización.

$$\textcircled{5} \quad H = H_0(1) + H_0(2) + H_0(3) \quad , \quad H_0 \rightarrow E_n = n\hbar\omega_0, \quad n=0,1,2.$$

Como no hay interacción entre las partículas, los autoestados comunes serán:

$$|\Psi\rangle = |n_1, m_1\rangle \otimes |n_2, m_2\rangle \otimes |n_3, m_3\rangle$$

con niveles de energía

$$E = E_1 + E_2 + E_3 = (n_1 + n_2 + n_3) \hbar\omega_0 \equiv n\hbar\omega_0, \quad n=0,1,\dots,6$$

La degeneración de estos estados será en general enorme, ya que la degeneración propia de  $n$  (o sea las diferentes opciones de  $n_1+n_2+n_3$  de dar la misma  $n$ ) tenemos que multiplicarlas por las  $(2s+1)$  de cada  $m_i$ .

Sin embargo, el postulado de simetrización reducirá esta degeneración aceptando sólo estados totalmente simétricos o antisimétricos. En algunos casos, podrá incluso prohibir algunos niveles de energía.

@) 3 e<sup>-</sup>. Estudiamos cada nivel  $n=0,\dots,6$  por separado.

**$n=0$**  Una única opción:  $n_1=n_2=n_3=0$ , pero como el  $s=1/2$ , no podemos tener 3e<sup>-</sup> en estados diferentes. Es lo mismo que en los átomos multielectrónicos, que el estado ls sólo acepta 2e<sup>-</sup>. Por tanto, el principio de exclusión de Pauli prohíbe el nivel  $E=0$  para 3e<sup>-</sup>.

$n=1$  Tendremos  $2e$  con  $n_i=0$  y  $1e^-$  con  $n_j=1$ , de forma que sí podemos llenar este nivel sin meternos en problemas con Pauli. De hecho, éste será el estado fundamental.

Los espines de los estados  $n_i=0$  tendrán que ser opuestos, mientras que el de  $n=1$  estará libre, así que nos deja 2 posibilidades, o sea una degeneración de 2.

Para construir los dos estados, seguimos los pasos de clase. Primero construimos un estado con los números cuánticos que queremos y numerando las partículas de manera arbitraria:

$$|n=1, \pm\rangle \rightarrow |1:0,+\rangle \otimes |2:0,-\rangle \otimes |3:1,\pm\rangle$$

↗ part. #3

$\hookleftarrow n_3 \quad \hookleftarrow m_3$

y antisimetrizamos con el det. de Slater:

$$|n=1, \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} |1:0+\rangle & |1:0-\rangle & |1:1\pm\rangle \\ |2:0+\rangle & |2:0-\rangle & |2:1\pm\rangle \\ |3:0+\rangle & |3:0-\rangle & |3:1\pm\rangle \end{vmatrix}$$

Para ver el espín total, ayuda calcular el determinante entorno a la tercera columna:

$$|n=1, \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \left( |1:1\pm\rangle \begin{vmatrix} |2:0+\rangle & |2:0-\rangle \\ |3:0+\rangle & |3:0-\rangle \end{vmatrix} - |2:1\pm\rangle \begin{vmatrix} |1:0+\rangle & |1:0-\rangle \\ |3:0+\rangle & |3:0-\rangle \end{vmatrix} + \dots \right)$$

Los dos  $e^-$  con  $n=0$  siempre salen en la combinación (antisimétrica) del singlete con  $S=0$ . Así que el espín total será  $S=1/2$ , marcado por el  $e^-$  en  $n=1$ .

$$n=2 \quad \text{Dos opciones de } n_i : \quad \left. \begin{array}{l} n_i = n_j = 0, \quad n_K = 2 \\ n_i = n_j = 1, \quad n_K = 0 \end{array} \right\}$$

Análogo al caso  $n=1$ , ya que tenemos  $2e^-$  con el mismo  $n$  y el tercero distinto. Cada caso tendrá dos casos de espín, para una degeneración total de 4. Tendremos 4 det. de Slater para construir estos 4 estados, y todos tendrán  $S=1/2$ .

$n=3$  A priori parece que tenemos 2 opciones:

$$\left. \begin{array}{l} n_1 = n_2 = n_3 = 1 \\ n_i = 0, \quad n_j = 1, \quad n_K = 2 \end{array} \right\} \quad \begin{array}{l} \longrightarrow \text{Prohibido por excl. Pauli} \\ \longrightarrow \text{único caso posible.} \end{array}$$

Como ahora todos los  $n_i$  son diferentes tenemos más posibilidades:

$$|0, \pm\rangle \otimes |1, \pm\rangle \otimes |2, \pm\rangle$$

La combinatoria de  $n_i$ -s se reducirá a la combinación antisimétrica, pero como todas las comb. de espín son posibles, tendremos una degeneración de  $2 \times 2 \times 2 = 8$ .

Los dls. de Slater de estos 8 estados serán:

$$|n=3, m_1, m_2, m_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} |1:0\pm\rangle & |2:1\pm\rangle & |1:2\pm\rangle \\ |2:0\pm\rangle & |2:1\pm\rangle & |2:2\pm\rangle \\ |3:0\pm\rangle & |3:1\pm\rangle & |3:2\pm\rangle \end{vmatrix}$$

En este caso además podremos tener todas las opciones de espín total:

$$S_1 + S_2 = \begin{cases} 1 & \xrightarrow{+S_3} 3/2 \quad 4 \text{ casos} \\ & \xrightarrow{} 1/2 \quad 2 \text{ casos} \\ 0 & \xrightarrow{} 1/2 \quad 2 \text{ casos} \end{cases}$$

8 casos ✓

n=4 Análogo a n=2: 4 estados

n=5 Análogo a n=1: 2 estados

n=6 Análogo a n=0: Excl. Pauli.

Resumen 3 e<sup>-</sup>: degeneración g<sub>n</sub> de cada nivel n:

$$\left. \begin{array}{l} g_0 = g_5 = 0 \\ g_1 = g_5 = 2 \\ g_2 = g_4 = 4 \\ g_3 = 8 \end{array} \right\} \text{total de } 20 \text{ estados}$$

## ⑤ 3 bosones $s=0$ .

Ahora tenemos que simetrizar. Y como no hay espín todo es más fácil.

**$n=0$**  Ahora sí es posible tener  $n_1=n_2=n_3=0$ , así que el estado fundamental será más bajo que para  $e^-$ . Encima ya es simétrico directamente:

$$|n=0\rangle = |0\ 0\ 0\rangle \rightarrow 1 \text{ estado.}$$

**$n=1$**   $n_i=n_j=0, n_k=1$ . Simetrizamos:

$$|n=1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|001\rangle + |010\rangle + |100\rangle) \rightarrow 1 \text{ estado}$$

**$n=2$**  Dos opciones:  $\begin{cases} n_i=n_j=0, n_k=2 \\ n_i=n_j=1, n_k=0 \end{cases}$

$$|n=2\rangle_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} (|110\rangle + |101\rangle + |011\rangle) \quad \left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} \rightarrow 2 \text{ estados}$$

$$|n=2\rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} (|002\rangle + |020\rangle + |200\rangle)$$

**$n=3$**  Dos opciones  $\begin{cases} n_1=n_2=n_3=1 \\ n_i=0, n_j=1, n_k=2 \end{cases}$

$$|n=3\rangle_1 = |111\rangle$$

$$|n=3\rangle_2 = \frac{1}{\sqrt{6}} (|012\rangle + |112\rangle + |120\rangle + |201\rangle + |210\rangle + |102\rangle + |021\rangle) \quad \left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\} \rightarrow 2 \text{ estados}$$

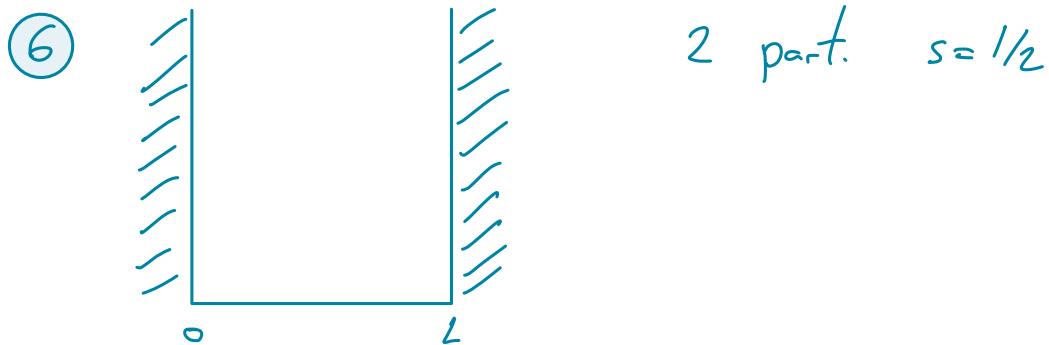
$n=4$  Análogo a  $n=2$  {  $\begin{array}{l} n_i=n_j=2, n_k=0 \\ n_i=n_j=1, n_k=2 \end{array}$  }  $\rightarrow$  2 estados

$n=5$  Análogo a  $n=1$ :  $n_i=n_j=2, n_k=1$   $\rightarrow$  1 estado

$n=6$  Análogo a  $n=0$ :  $n_1=n_2=n_3=2$   $\rightarrow$  1 estado

Resumen 3 bosones  $s=0$ :

$$\left. \begin{array}{l} g_0 = g_1 = g_5 = g_6 = 1 \\ g_2 = g_3 = g_4 = 2 \end{array} \right\} \Rightarrow \text{total de } 10 \text{ estados}$$



Recap pozo infinito 1D:

$$\psi_n(x) = A \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right); \quad A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

$$H = \frac{P^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m L^2} n^2 = \bar{E}_0 n^2$$

Como no interactúan, tendremos esto para cada particula, con energía total  $E_n = \bar{E}_1 + \bar{E}_2 = (n_1^2 + n_2^2) \bar{E}_0 \equiv n^2 \bar{E}_0$ , pero tendremos que antisimetrizar:

Estado fundamental:  $n_1 = n_2 = 1$ ,  $E_2 = 2E_0$ .

Como la parte espacial es simétrica, la parte de espín tendrá que ser antisimétrica, de forma que la función de onda total sea antisim. Esto nos lleva al singuleto:

$$\Psi_{1,}^{s=0}(x_1, x_2) = \frac{\sqrt{2}}{L} \underbrace{\sin\left(\frac{\pi}{L}x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{L}x_2\right)}_S \underbrace{(|+-\rangle - |-+\rangle)}_A$$

Primer estado excitado:  $n_i = 1$ ,  $n_j = 2$ ,  $E_2 = 5E_0$

Ahora tenemos dos posibilidades de  $n_i$ -s, que el postulado de simetrización reducirá sólo a la comb. antisim. Pero como los espines ahora pueden estar de cualquier forma, tendremos una degeneración de  $\Psi$ , y por tanto 4 det. de Slater para los estados:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} |1:1+\rangle & |1:2+\rangle \\ |1:1+\rangle & |1:2+\rangle \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{(\Psi_1(x_1)\Psi_2(x_2) - \Psi_2(x_1)\Psi_1(x_2))}_A \underbrace{|++\rangle}_S \equiv \Psi_{2,}^{s=1, m=1}(x_1, x_2)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} |1:1+\rangle & |1:2-\rangle \\ |1:1+\rangle & |1:2-\rangle \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1(x_1)\Psi_2(x_2)|+-\rangle - \Psi_2(x_1)\Psi_1(x_2)|-+\rangle)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} |1:1-\rangle & |1:2+\rangle \\ |1:1-\rangle & |1:2+\rangle \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1(x_1)\Psi_2(x_2)|-+\rangle - \Psi_2(x_1)\Psi_1(x_2)|+-\rangle)$$

Como son dos estados degenerados, podemos combinarlos linealmente y seguirán siendo autoestados. En concreto, si sumamos y restamos podemos sacar estados con  $S$  total definido:

suma:  $\Psi_2^{s=1, m=0}(x_1, x_2) = \frac{1}{2} \left( \underbrace{\Psi_1(x_1)\Psi_2(x_2) - \Psi_2(x_1)\Psi_1(x_2)}_A \right) \underbrace{(|+> + |->)}_S$

resta:  $\Psi_2^{s=0}(x_1, x_2) = \frac{1}{2} \left( \underbrace{\Psi_1(x_1)\Psi_2(x_2) + \Psi_2(x_1)\Psi_1(x_2)}_S \right) \underbrace{(|+> - |->)}_A$

El último de Slater es análogo al primero:

$$\Psi_2^{s=1, m=-1}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \underbrace{(\Psi_1(x_1)\Psi_2(x_2) - \Psi_2(x_1)\Psi_1(x_2))}_A \underbrace{|->}_S$$

Segundo estado excitado:  $n_1 = n_2 = 2, E_3 = 8 E_0^2$

Análogo al estado fundamental:

$$\Psi_3^{s=0}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_2(x_1)\Psi_2(x_2) (|+> - |->)$$

Nota: también podríamos habernos planteado dejar una de las partículas en el estado fundamental y seguir excitando la otra, pero en este caso tiene una energía mayor, así que realmente correspondería al tercer estado excitado:

$$n_i = 1, n_j = 3 \Rightarrow E_4 = 10 E_0$$

$$\textcircled{7} \quad \Psi(x_1, x_2) = \frac{\sqrt{2}}{L} \left( \sin \frac{\pi x_1}{L} \sin \frac{2\pi x_2}{L} - \sin \frac{2\pi x_1}{L} \sin \frac{\pi x_2}{L} \right) |-->$$

a) Tenemos 2 partículas de  $s=1/2$  en un pozo 1D filo unidimensional de anchura  $L$  y que no interactúan entre sí. Es fácil comprobarlo explícitamente escribiendo el  $H$  y ver que es autoestado con  $(n_1, n_2) = (1, 2)$ , pero es que ya lo hemos hecho en el 6.

\textcircled{5} Tenemos un estado simétrico de espín, correspondiente al triplete  $S=1$  con  $M=-1$ . La parte espacial es antisim., de forma que la f.d.o. completa es antisim.

\textcircled{c} Para subir  $M$  en una unidad sin tocar nada más, aplicamos  $J_+ = J_{1+} + J_{2+}$ . Esto nos lleva a

$$J_+ \Psi(x_1, x_2) = \frac{1}{L} \left( \sin \frac{\pi x_1}{L} \sin \frac{2\pi x_2}{L} - \sin \frac{2\pi x_1}{L} \sin \frac{\pi x_2}{L} \right) (|+-> + |-+>)$$

## ⑧ Átomo con 3e<sup>-</sup> sin interacción

Como no hay interacción entre los e<sup>-</sup>, tendremos que cada uno de ellos estará en una solución de un átomo hidrogenoide con z protones:

$$H = H_z(1) + H_z(2) + H_z(3), \quad H_z = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{ze^2}{r}$$

Las soluciones individuales serán  $|n_i, \ell_i, m_i\rangle$  como en el hidrógeno, simplemente con  $E_I$  y  $r_0$  modificados por  $z$  (tendrá  $E_I$  mayor y  $r_0$  menor, ya que la interacción será más intensa). Los estados completos serán:

$$\Psi(r_1, r_2, r_3) \sim |n_1, \ell_1, m_1\rangle \otimes |n_2, \ell_2, m_2\rangle \otimes |n_3, \ell_3, m_3\rangle$$

con  $E = E_1 + E_2 + E_3 = -E_I(z) \left( \frac{1}{n_1^2} + \frac{1}{n_2^2} + \frac{1}{n_3^2} \right)$

Esos sí, tendremos que antisimetrizar...

Estado fundamental: el caso obvio sería  $n_1 = n_2 = n_3$  pero está excluido por Pauli. Así que tendremos:

$$n_i = n_j = 1, \quad n_k = 2 \quad \Rightarrow \quad E_2 = -\frac{9}{4} E_I(z)$$

Igual que en el problema 5, tendremos una degeneración de 2, y sus autoestados los sacaremos con los det. de Slater.

Primer estado excitado: Es mejor seguir subiendo uno de los  $e^-$  o subir uno de los que estaba abajo?

$$n_i = n_j = 1, \quad n_k = 3 \quad \Rightarrow \quad E_2 = -\frac{19}{9} E_I(z)$$

$$n_i = 1, \quad n_j = n_k = 2 \quad \Rightarrow \quad E_2' = -\frac{3}{2} E_I(z) \quad \leftarrow \text{más energético}$$

Debido a la dependencia  $\frac{1}{n^2}$  de la energía, sale más barato excitar sólo uno de los  $e^-$  hasta el infinito (o sea hasta liberarlo), que excitar dos de ellos aunque sea al segundo nivel. Es justo lo contrario que pasa en el pozo de potencial, donde la dependencia es de  $n^2$ .

Con esta lógica, los siguientes estados excitados serán:

$$n_i = n_j = 1, \quad n_k = n \quad \Rightarrow \quad E_n = -\left(2 + \frac{1}{n^2}\right) E_I(z)$$

Todos tendrán una degeneración de 2, un espín total de  $S = 1/2$ , y dos det. de Slater a calcular.

# SOLUCIONES HOJA 6

PERT. ESTACIONARIAS. ESTRUCTURA FINA/HIPERFINA

Resumen de lo visto en clase y notación: buscamos solución aproximada para

$H(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle$  con  $H(\lambda) = H_0 + H_1 = H_0 + \lambda W$ ,  $\lambda \ll 1$   
expandiendo entorno a las soluciones de  $H_0$ :

$$H_0 |\psi_n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |\psi_n^{(0)}\rangle$$

$$E_n(\lambda) = \sum_{q \geq 0} \lambda^q E_n^{(q)} = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$$

$$|\psi_n(\lambda)\rangle = \sum_{q \geq 0} \lambda^q |\psi_n^{(q)}\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \lambda |\psi_n^{(1)}\rangle + \dots$$

Y, para un estado  $|\psi_n^{(0)}\rangle$  no degenerado, las correcciones eran:

$$E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | W | \psi_n^{(0)} \rangle$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \sum_{i=1}^{g_m} \frac{|\langle \psi_{mi}^{(0)} | W | \psi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} , \quad g_m \text{ la degeneración del subespacio con } E_m.$$

$$|\psi_n^{(1)}\rangle = \sum_{m \neq n} \sum_{i=1}^{g_m} \frac{\langle \psi_{mi}^{(0)} | W | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} |\psi_{mi}^{(0)}\rangle$$

No vimos los siguientes términos más altos en  $\lambda$ , básicamente porque sólo utilizaremos esto, y a veces sólo el orden más bajo en energía y ya.

## ① Error al cortar en $\lambda$ más bajo.

Aunque hemos visto cómo son las correcciones a la energía a orden  $\lambda$  y  $\lambda^2$ , muchas veces sólo calcularemos el orden  $\lambda$ , bien porque es una perturbación pequeña y ya nos valdrá con esto, bien porque sólo nos interesa ver cómo rompe las degeneraciones de  $H_0$  y nos vale con quedarnos a  $\mathcal{O}(\lambda)$ . En estos casos, nos vendrá bien tener una estimación de cuánto la estamos cagando por quedarnos sólo a orden dominante.

Para eso usamos las soluciones obtenidas en el caso no degenerado para las correcciones a  $\mathcal{O}(\lambda^2)$ :

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \sum_{i=1}^{g_m} \frac{|\langle \varphi_{mi}^{(0)} | W | \varphi_n^{(0)} \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

Al cortar la expansión a  $\mathcal{O}(\lambda)$ , o sea quedándonos sólo con  $E_n^{(0)}$ , estamos cometiendo un error tan grande como grande puede ser  $E_n^{(2)}$  (ya que  $E_n^{(g+2)}$  serán aún más pequeños). Así que nos gustaría estimar  $|E_n^{(2)}|_{\max}$ .

Como niveles más cercanos en energía contribuyen más, podemos simplificar la expresión usando sólo el nivel de energía más cercano:

$$|E_n^{(0)} - E_m^{(0)}| \geq \Delta E_{\min}$$

$$\Rightarrow E_n^{(2)} \leq \frac{1}{\Delta E_{\min}} \sum_{m \neq n} \sum_{i=1}^{g_m} \underbrace{\langle \varphi_n^{(0)} | W | \varphi_{mi}^{(0)} \rangle}_{\langle \varphi_{mi}^{(0)} | W | \varphi_n^{(0)} \rangle} \langle \varphi_{mi}^{(0)} | W | \varphi_n^{(0)} \rangle$$

$|\langle \varphi_{mi}^{(0)} | W | \varphi_n^{(0)} \rangle|^2$  con  $W$  hermético ( $H(\lambda)$  debe serlo y  $\lambda$  es real)

De la relación de cierre:

$$\sum_{m \neq n} \sum_{i=1}^{g_m} |\varphi_{mi}^{(\omega)} \langle \varphi_{ni}^{(\omega)} | - \langle \varphi_n^{(\omega)} | \varphi_{ni}^{(\omega)} | |$$

tenemos:

$$E_n^{(2)} \leq \frac{1}{\Delta E_{\min}} \left[ \frac{\langle \varphi_n^{(1)} | W^2 | \varphi_n^{(1)} \rangle - (\langle \varphi_n^{(1)} | W | \varphi_n^{(1)} \rangle)^2}{\langle W^2 \rangle} \right] \frac{(\Delta w)^2}{(\langle W \rangle)^2}$$

$$\Rightarrow E_n^{(2)} \leq \frac{(\Delta w)^2}{\Delta E_{\min}}$$

$$\Delta E_n^{O(\lambda)} = \lambda^2 E_n^{(2)} \leq \frac{(\Delta H_1)^2}{\Delta E_{\min}}$$

↓ error por quedarnos a  $O(\lambda)$

O sea que el orden de magnitud del error que cometemos viene dado por la desviación estandar (o la incertidumbre) de la perturbación sobre el estado original, dividido por la separación de energía con su estado más cercano.

Una vez más, vemos que la aproximación detrás de nuestra teoría de perturbaciones no es simplemente asumir una pert. pequeña, sino que su efecto sea menor que la separación entre los niveles de energía de  $H_0$  (que no mezcle las cosas demasiado, vamos).

## ② Oscilador armónico perturbado.

Nota: en clase vimos como ejemplo la pert. libel. Aquí van otros dos ejemplos,  $x^2$  y  $x^3$ . Todo en el Cohen Axi.

Punto de partida:  $H_0 = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$

Soluciones:  $E_n^{(0)} = \hbar\omega (n + \frac{1}{2})$

autoestados  $|n\rangle$  con  $\left\{ \begin{array}{l} N|n\rangle = n|n\rangle \\ a^+|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \\ a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \end{array} \right. , [a, a^+] = L$

## ③ Perturbación cuadrática $H_1 = \frac{1}{2} m \omega^2 \lambda x^2$ .

Como tiene la misma forma que el potencial original la solución analítica se obtiene simplemente redefiniendo la freq:

$$\omega^2 \rightarrow \omega^2(1+\lambda) \Rightarrow E_n^{(0)} \rightarrow E_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar\omega \sqrt{1+\lambda} = E_n^{(0)} \left( 1 + \frac{\lambda}{2} - \frac{\lambda^2}{8} + \dots \right)$$

Para tratarlo con teoría de pert. tendremos que sandwichear  $H_1$  entre todos los niveles posibles. Empezamos por reescribirlo:

$$H_1 = \frac{1}{4} \hbar\omega \lambda (a^+ + a)^2 = \frac{1}{4} \hbar\omega \lambda (a^{+2} + a^2 + 2N + L)$$

Así que un nivel  $|n\rangle$  se podrá medir sólo con  $|n\rangle$  y  $|n \pm 2\rangle$ :

$$\langle n | H_1 | n \rangle = \frac{1}{4} \hbar\omega \lambda \langle n | 2N + L | n \rangle = \frac{1}{2} \hbar\omega \lambda (n + \frac{1}{2}) = \frac{1}{2} \lambda E_n^{(0)}$$

$$\langle n+2 | H_1 | n \rangle = \frac{1}{4} \hbar\omega \lambda \langle n+2 | a^{+2} | n \rangle = \frac{1}{4} \hbar\omega \lambda \sqrt{(n+1)(n+2)}$$

$$\langle n-2 | H_1 | n \rangle = \frac{1}{4} \hbar\omega \lambda \langle n-2 | a^2 | n \rangle = \frac{1}{4} \hbar\omega \lambda \sqrt{n(n-1)}$$

Juntando todo:

$$\begin{aligned}
 E_n(\lambda) &= E_n^{(0)} + \langle n | H_1 | n \rangle + \frac{|\langle n+2 | H_1 | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n+2}^{(0)}} + \frac{|\langle n-2 | H_1 | n \rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_{n-2}^{(0)}} + \dots \\
 &= E_n^{(0)} + \frac{1}{2} \lambda E_n^{(0)} - \frac{1}{32} \hbar \omega \lambda^2 \left( \frac{(n+1)(n+2) - n(n-1)}{n^2 + 3n + 2 - n^2 + n} = 4n + 2 \right) \\
 &= E_n^{(0)} \left( 1 + \frac{1}{2} \lambda - \frac{1}{8} \lambda^2 + \dots \right)
 \end{aligned}$$

Y los autoestados:

$$\begin{aligned}
 |\psi_n(\lambda)\rangle &= |ns\rangle + \frac{\langle n+2 | H_1 | ns \rangle}{E_n^{(0)} - E_{n+2}^{(0)}} |n+2\rangle + \frac{\langle n-2 | H_1 | ns \rangle}{E_n^{(0)} - E_{n-2}^{(0)}} |n-2\rangle + \dots \\
 &= |ns\rangle + \frac{1}{8} \lambda \left( \sqrt{n(n-1)} |n-2\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)} |n+2\rangle \right) + \dots
 \end{aligned}$$

Nota: a mi de primeras me rayó este resultado, porque el  $H = H_0 + H_1$  sigue siendo armónico, así que las soluciones exactas seguirán siendo de la forma  $|ns\rangle$ , y no entendí de donde salió el mixing con  $|n\pm2\rangle$ ...

Mi problema era que me estaba liando con la notación. Ambas soluciones tendrían la misma forma analítica, pero cada una con una  $\omega$  distinta. Pasemos de  $|ns\rangle$  a  $|ns_\omega\rangle$ . En espacio de posición, tendremos Gaussicas de anchura distintas.

No lo hice, pero imagino que si expresamos  $|ns_\omega\rangle$  en función de  $|ns\rangle$  y expandimos, nos saldrá el resultado aprox.

$$\textcircled{5} \quad \text{Pert. c\'ubica} \quad H_1 = \lambda \sqrt{\frac{m^3 \omega^5}{8\hbar}} x^3 = \lambda \hbar \omega (a^+ a)^3 = \lambda \hbar \omega (a^{+3} + a^3 + 3N a^+ a^3 + 3(N+1)a)$$

Ahora conectamos  $|n\rangle$  con  $|n+1\rangle$  y  $|n-3\rangle$ . Como no habr\'e elementos  $\langle n | H_1 | n \rangle = 0$ , no tenemos correcci\'on a orden  $\lambda$ .

$$\langle n+1 | H_1 | n \rangle = 3\lambda \hbar \omega \langle n+1 | N a^+ | n \rangle = 3\lambda \hbar \omega (n+1)^{3/2}$$

$$\langle n-1 | H_1 | n \rangle = 3\lambda \hbar \omega \langle n-1 | (N+1)a^- | n \rangle = 3\lambda \hbar \omega n^{3/2}$$

$$\langle n+3 | H_1 | n \rangle = \lambda \hbar \omega \langle n+3 | a^{+3} | n \rangle = \lambda \hbar \omega [(n+1)(n+2)(n+3)]^{1/2}$$

$$\langle n-3 | H_1 | n \rangle = \lambda \hbar \omega \langle n-3 | a^3 | n \rangle = \lambda \hbar \omega [n(n-1)(n-2)]^{1/2}$$

Juntando:

$$E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \frac{|\langle n+1 | H_1 | n \rangle|^2}{-\hbar \omega} + \frac{|\langle n-1 | H_1 | n \rangle|^2}{\hbar \omega} + \frac{|\langle n+3 | H_1 | n \rangle|^2}{-3\hbar \omega} + \frac{|\langle n-3 | H_1 | n \rangle|^2}{3\hbar \omega} + \dots$$

$$= E_n^{(0)} - 9\lambda^2 \hbar \omega (3n^2 + 3n + 1) - \lambda^2 \hbar \omega (3n^2 + 3n + 2) + \dots$$

$$= (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega - \lambda^2 \hbar \omega (30n^2 + 30n + 11) + \dots$$

$$= (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega - \lambda^2 \hbar \omega \left( 30(n + \frac{1}{2})^2 - \frac{7}{2} \right) + \dots \quad \leftarrow \text{esta forma s\'olo por hacer el check con el Cohen, no me dice nada...}$$

Y los autoestados:

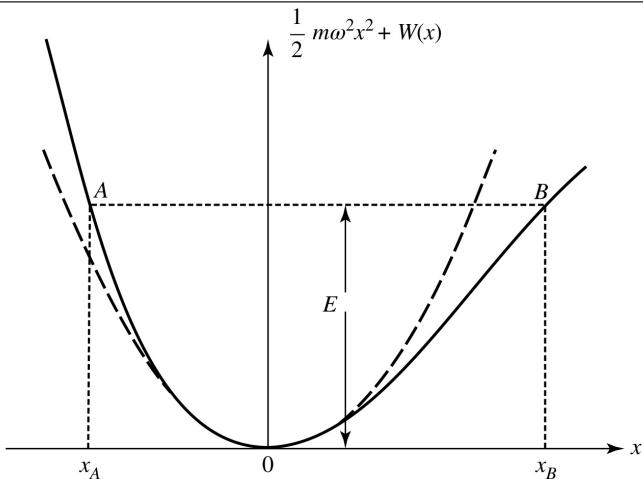
$$|\varphi_n(\lambda)\rangle = |n\rangle + 3\lambda \hbar \omega \left[ n^{3/2} |n-1\rangle - (n+1)^{3/2} |n+1\rangle \right]$$

$$- \frac{1}{3} \lambda \hbar \omega \sqrt{(n+1)(n+2)(n+3)} |n+3\rangle$$

$$+ \frac{1}{3} \lambda \hbar \omega \sqrt{n(n-1)(n-2)} |n-3\rangle + \dots$$

## Interpretación:

Un término  $x^3$  en el potencial es la pert. más baja que podemos meter a un osc. armónico. La parte más importante es que no es simétrico  $x \rightarrow -x$ , así que no afecta por igual a  $x$  positivo y negativo.



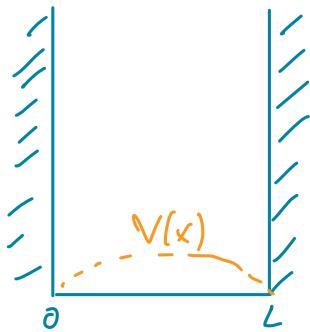
Clásicamente, además de que la partícula no oscilará la misma distancia derecha que izquierda, hace que el periodo de oscilación dependa de la posición / amplitud. Tenemos un potencial anarmónico

Cuánticamente, vemos que la separación homogénea entre niveles, que se irán juntando según aumente  $n$  (que será como tener amplitudes más grandes, y  $x^3$  más importante):

$$\bar{E}_n - \bar{E}_{n-1} = \hbar\omega [1 - 60\lambda^2 n]$$

También induce mezcla entre estados  $n \pm 1$  y  $n \pm 3$ .

③



Pozo infinito + pert:

$$V(x) = \lambda \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$

Soluciones sin pert, base  $|n\rangle$ :

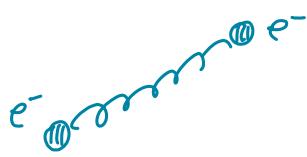
$$\Psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) ; E_n^{(0)} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Las correcciones a primer orden (como tenemos estados no degenerados):

$$\begin{aligned} E_n^{(1)} &= \langle n | W | n \rangle = \langle n | \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) | n \rangle \\ &= \int_0^L dx \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \\ &= (\dots \text{mathematica} \dots) = \frac{8}{\pi} \frac{n^2}{4n^2 - 1} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow E_n(\lambda) = E_n^{(0)} + \frac{8\lambda}{\pi} \frac{n^2}{4n^2 - 1} + \dots$$

④ Dos e<sup>-</sup> confinados entre sí por un potencial armónico ω más una pert.



$$V' = \beta(x_1 - x_2)^2 \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

Como tenemos un sist. de 2 partículas separamos CM + mov. Rel de una mas reducida

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_e} \Rightarrow \mu = \frac{m_e}{2}$$

La parte CM es aburrida, nos fijamos sólo en k relativa:

$$H_{\text{rel}} \equiv H_0 = \frac{P^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 \quad \text{con} \quad x \equiv x_1 - x_2$$

Los niveles de energía entonces:

$$E_n^{(o)} = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$$

Por otro lado tenemos k perturbación

$$V' = \beta x^2 \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

Lo que nos dice que mejor trabajar con  $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2$ :

$$S^2 = S_1^2 + S_2^2 \Rightarrow V' = \frac{1}{2}\beta x^2 (S^2 - S_1^2 - S_2^2) = \frac{\hbar^2}{2}\beta x^2 (s(s+1) - \frac{3}{2})$$

Si tuviésemos partículas distinguibles, cada nivel lo tendría un degeneración de 4, que igual podríamos romper con V'. Pero como tenemos partículas indistinguibles (y fermiones), tenemos que mirar primero que los estados sean totalmente antisim.

Como en el espacio y espín están separados, podemos escribir la f.d.o. como un producto tensorial:

$$|n, m_1, m_2\rangle = |n\rangle \otimes |m_1, m_2\rangle \quad \text{ó} \quad |n, S, M_S\rangle = |n\rangle \otimes |S, M_S\rangle$$

La base  $|m_1, m_2\rangle$  nos viene bien para ver la sim. de intercambio de los  $e^-$  ( $m_1 \leftrightarrow m_2$ ). La base  $|S, M_S\rangle$  son antitacidos de  $V'$ .

El postulado de simetrización nos dice que la f.d.o. completa tiene que ser antisim., de forma que en este caso necesitaremos f.d.o. espacial sim y espínorial antisim., o al revés.

La simetría de la parte espacial la sacamos mirando las f.d.o.:

$$\Psi_n(x) = \left(\frac{\mu\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{n! 2^n}} e^{-\frac{\mu\omega x^2}{2\hbar}} H_n\left(x\sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}\right)$$

Intercambiar los  $e^-$  implica  $x_1 \leftrightarrow x_2 \Rightarrow x \rightarrow -x$ , o sea paridad. La paridad de  $\Psi_n(x)$  viene dada de la paridad de los polinomios de Hermite:

$$H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$$

La parte de espín la sacamos de los CG, que en este caso son el singlete (antisim) y triplete (sim):

$$|S, M_S\rangle \quad |m_1, m_2\rangle$$

$$|0 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle)$$

$$|1 +\rangle = |++\rangle$$

$$|1 0\rangle = (|+-\rangle + |-+\rangle)/\sqrt{2}$$

$$|1 -\rangle = |--\rangle$$

Combinando todo, vemos que no todos los niveles tienen la misma degeneración.

$|n, S, M\rangle$

$n$  par  $\Rightarrow |n, 0, 0\rangle$  no degenerados

$n$  impar  $\Rightarrow |n, 1, M\rangle$  3 veces degenerados

a) Energías perturbadas:

Escribimos la pert. en función de  $a^\dagger, a$ :

$$X = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^\dagger + a) \equiv A(a^\dagger + a) \Rightarrow V' = \frac{1}{2} \beta \hbar^2 A^2 (a^\dagger + a)^2 + 2n + 1 \left( S(S+1) - \frac{3}{2} \right)$$

Y lo aplicamos sobre los estados permitidos de  $H_0$ .

$$n \text{ par: } V' |n, 0, 0\rangle = -\frac{3}{4} \beta \hbar^2 A^2 \left( \sqrt{(n+1)(n+2)} |n+2\rangle + \sqrt{n(n-1)} |n-2\rangle + (2n+1) |n\rangle \right) \otimes |0, 0\rangle$$

$$\Rightarrow E_n^{(')} = \langle n, 0, 0 | V' |n, 0, 0\rangle = -\frac{3}{4} \beta \hbar^2 A^2 (2n+1)$$

$$n \text{ impar: } V' |n, 1, M\rangle = \frac{1}{2} \beta \hbar^2 A^2 \left( \sqrt{(n+1)(n+2)} |n+2\rangle + \sqrt{n(n-1)} |n-2\rangle + (2n+1) |n\rangle \right) \otimes |1, M\rangle$$

$$\Rightarrow E_n^{(')} = \langle n, 1, M | V' |n, 1, M\rangle = \frac{1}{4} \beta \hbar^2 A^2 (2n+1)$$

La pert. afecta de manera diferente a niveles pares (que los baja) que a impares (los sube), y el efecto crece con  $n$ . Sin embargo no rompe la degeneración. Como siempre, el truco está en que  $V'$  tiene simetría esférica, así que no puede depender de  $M$ .

Esquemáticamente:

$$n=4 \quad \text{---} \quad -\cdots-\cdots \quad \text{---} + \frac{7}{4} \beta \hbar^2 A^2$$

$$n=3 \quad \text{---} \quad -\cdots-\cdots \quad \text{---} - \frac{15}{4} \beta \hbar^2 A^2$$

$$n=2 \quad \text{---} \quad -\cdots-\cdots \quad \text{---} + \frac{3}{4} \beta \hbar^2 A^2$$

$$n=1 \quad \text{---} \quad -\cdots-\cdots \quad \text{---} - \frac{3}{4} \beta \hbar^2 A^2$$

### ⑤ Estado fundamental perturbado:

Usando los resultados de antes, veremos que sólo se mezcla con  $|2,0,0\rangle$ :

$$V'|0,0,0\rangle = -\frac{3}{4} \beta \hbar^2 A^2 (\sqrt{2}|2,0,0\rangle + |0,0,0\rangle)$$

Así que:

$$E_0^{(0)} - E_2^{(0)} = 2\hbar\omega$$

$$\Rightarrow |\varphi_0(\beta)\rangle = |0,0,0\rangle - \frac{3}{4\sqrt{2}} \beta \frac{\hbar A^2}{\omega} |2,0,0\rangle + \mathcal{O}(\beta^2)$$

$$\textcircled{5} \quad H_0 = \begin{pmatrix} E_0 & & \\ & E_1 & \\ & & E_1 \end{pmatrix}, \quad H_1 = \lambda W = \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} |\phi_1\rangle \\ |\phi_2\rangle \\ |\phi_3\rangle \end{matrix}$$

Tenemos un nivel no degenerado y dos degenerados. Para el primero simplemente:

$$E_1^{(1)} = \langle \phi_1 | W | \phi_1 \rangle = 1 \Rightarrow E_1(\lambda) = E_0 + \lambda + \dots$$

$$|\phi_1(\lambda)\rangle = |\phi_1\rangle + \sum_{i \neq 1} \frac{\langle \phi_i | H_1 | \phi_1 \rangle}{E_0 - E_1} + \dots = |\phi_1\rangle + \frac{\lambda}{E_0 - E_1} |\phi_3\rangle$$

Para el degenerado, necesitamos la matriz  $W$  en es subespacio:

$$W_1 = \begin{pmatrix} \langle \phi_2 | W | \phi_2 \rangle & \langle \phi_2 | W | \phi_3 \rangle \\ \langle \phi_3 | W | \phi_2 \rangle & \langle \phi_3 | W | \phi_3 \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

Diagonalizamos: rotación 45°, estados  $\pm$ :

$$|\phi_{1\pm}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|\phi_2\rangle \pm |\phi_3\rangle); \quad E_{1+} = 0, \quad E_{1-} = 2.$$

La pert. rompe la degeneración:

$$E_1 \xrightarrow{|\phi_2, \phi_3\rangle} \xrightarrow{--- \quad ---} \frac{|\phi_{1-}\rangle}{|\phi_{1+}\rangle} \xrightarrow{E_1 + 2\lambda} E_1$$

Las correcciones a estos estados vendrán de su mezcla con  $\phi_1$ :

$$\langle \phi_1 | W | \phi_{1\pm} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\langle \phi_1 | W | \phi_2 \rangle \pm \langle \phi_1 | W | \phi_3 \rangle) = \pm \frac{\lambda}{\sqrt{2}}$$

$$\Rightarrow |\phi_{1\pm}(\lambda)\rangle = |\phi_{1\pm}\rangle \pm \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \frac{1}{E_0 - E_1} |\phi_1\rangle$$

$$\textcircled{6} \quad V(x, y, z) = \frac{1}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2); \quad 2\omega_x = 2\omega_y = \omega_z = 2\omega.$$

a) 3 niveles más bajos

Tenemos 3 osciladores armónicos, uno por eje, independientes:

$$|n_x, n_y, n_z\rangle = |n_x\rangle \otimes |n_y\rangle \otimes |n_z\rangle$$

Con  $|n_i\rangle$  las f.d.o. de siempre del oscilador:

$$\Psi_{n_x}(x) = \sqrt{\frac{m\omega_x}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{n_x! 2^{n_x}}} e^{-\frac{m\omega_x x^2}{2\hbar}} H_n\left(x\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\right)$$

y la energía total:

$$\begin{aligned} E_{n_x n_y n_z} &= E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z} = \left(n_x + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_x + \left(n_y + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_y + \left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_z \\ &= (n_x + n_y + 2n_z + 2)\hbar\omega \equiv (N+2)\hbar\omega = E_N \end{aligned}$$

La energía viene determinada por  $N = n_x + n_y + 2n_z$ , así que su deg:

$$N=0 \Rightarrow E_0 = 2\hbar\omega : n_x = n_y = n_z = 0 \quad g_0 = 1.$$

$$N=1 \Rightarrow E_1 = 3\hbar\omega : n_z = 0; n_x + n_y = 1 \quad g_1 = 2$$

$$\begin{aligned} N=2 \Rightarrow E_2 &= 4\hbar\omega : n_z = 0; n_x + n_y = 2 \quad g_2 = 4 \\ &\quad n_z = 1; n_x = n_y = 0 \end{aligned}$$

⑤ Energías corregidas por pert.  $V'(x, y, z) = \lambda xy z^2$

La reescribimos usando  $\alpha, \alpha^\dagger$ :

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2mc\omega}} (\alpha_x^\dagger + \alpha_x) = A(\alpha_x^\dagger + \alpha_x) ; \quad (\text{lo mismo } y, z)$$

$$z^2 = A^2 (\alpha_z^\dagger + \alpha_z)(\alpha_z^\dagger + \alpha_z) = A^2 (\alpha_z^{+2} + \alpha_z^2 + 2n_z + L)$$

$$\Rightarrow V'(x, y, z) = A^4 (\alpha_x^\dagger + \alpha_x)(\alpha_y^\dagger + \alpha_y)(\alpha_z^{+2} + \alpha_z^2 + 2n_z + L)$$

Corrección  $E_0$ : nivel no degenerado:

$$E_0^{(1)} = \langle 000 | V' | 000 \rangle = 0 \quad (\text{lo meten } (\alpha_x^\dagger + \alpha_x)(\alpha_y^\dagger + \alpha_y))$$

sin corrección a primer orden:  $E_0(\lambda) = 2\hbar\omega + \mathcal{O}(\lambda^2)$

Corrección  $E_1$ : nivel dos veces degenerado:  $\{ |1,0,0\rangle, |0,1,0\rangle \}$

Construimos la matriz:

$$\begin{aligned} V' |1,0,0\rangle &= A^4 (\alpha_x^\dagger + \alpha_x)(\alpha_y^\dagger + \alpha_y)(\alpha_z^{+2} + \alpha_z^2 + 2n_z + L) |1,0,0\rangle \\ &= A^4 (\alpha_x^\dagger + \alpha_x)(\alpha_z^{+2} + L) |1,0,0\rangle \\ &= A^4 |0,1,0\rangle + \underbrace{\dots |2,1,0\rangle + \dots |0,1,2\rangle + \dots |2,1,2\rangle}_{\text{no están en } E_1, \text{ no nos interesa en pert.}} \end{aligned}$$

Lo mismo con:  $V' |0,1,0\rangle = A^4 |1,0,0\rangle + \dots$

$$\Rightarrow V'_{N=1} = \lambda A^4 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} |100\rangle \\ |010\rangle \end{matrix}$$

Diagonalizando nos quedan la suma y resta:

$$E_{1\pm}(\lambda) = 3\hbar\omega \pm \lambda A^4 + \dots$$

$$|1\pm\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (|100\rangle \pm |010\rangle)$$

Corrección  $E_2$ : lo mismo, pero ahora  $g_n=4\dots$

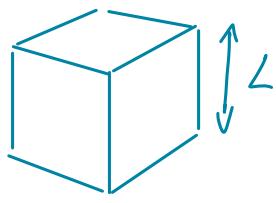
⑤ Corrección al  $|Q_{N=0}\rangle$ :  $E_0$  no se corrige, pero  $|Q_0^{(1)}\rangle$  mezcla los estados y no será cero. Calculemos:

$$\begin{aligned} V'|000\rangle &= A^4 (\alpha_x^+ + \alpha_x^-)(\alpha_y^+ + \alpha_y^-)(\alpha_z^{+2} + \alpha_z^{-2} + 2n_z + L)|000\rangle \\ &= A^4 (\alpha_z^{+2} + L)|1,1,0\rangle = A^4 (\sqrt{2}|1,1,2\rangle + |1,1,0\rangle) \end{aligned}$$

Se mezclará con un estado de  $N=4$  y otro  $N=2$ , que contribuirá más por estar más cerca en energías:

$$\begin{aligned} |Q_{N=0}\rangle &= |0,0,0\rangle + \lambda A^4 \left( \frac{1}{E_0^{(o)} - E_2^{(o)}} |1,1,0\rangle + \frac{\sqrt{2}}{E_0^{(o)} - E_4^{(o)}} |1,1,2\rangle \right) + \dots \\ &= |0,0,0\rangle - \frac{\lambda A^4}{2\hbar\omega} \left( |1,1,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |1,1,2\rangle \right) + \dots \end{aligned}$$

(7)



Cubo infinito +

$$V' = -\lambda \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \cos\left(\frac{\pi y}{L}\right)$$

De  $H_0$  sabemos:

$$E_{n_x n_y n_z} = E_{n_x} + E_{n_y} + E_{n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad (n_i \geq 1)$$

$$|n_x n_y n_z\rangle = |n_x\rangle \otimes |n_y\rangle \otimes |n_z\rangle$$

con  $\Psi_{n_x}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right).$

Estado fundamental de  $H_0$ :

$$n_x = n_y = n_z = 1 \Rightarrow E_0 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (\text{no degenerado})$$

$$|0\rangle \equiv |111\rangle$$

Para calcular el efecto de  $V'$  más fácil, usamos la propiedad:

$$\cos x \sin(n_x) = \frac{1}{2} \sin[(n+1)x] + \frac{1}{2} \sin[(n-1)x]$$

$$\Rightarrow \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \Psi_{n_x}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) = \frac{1}{2} (\Psi_{n_x+1}(x) + \Psi_{n_x-1}(x))$$

$$\Rightarrow V' \Psi_{n_x n_y n_z} = -\frac{\lambda}{4} (\Psi_{n_x+1}(x) + \Psi_{n_x-1}(x)) (\Psi_{n_y+1}(y) + \Psi_{n_y-1}(y)) \Psi_{n_z}(z)$$

Así que sobre el estado fundamental:

$$V' |111\rangle = -\frac{\lambda}{4} |221\rangle$$

De forma que, a primer orden, su energía no cambia:

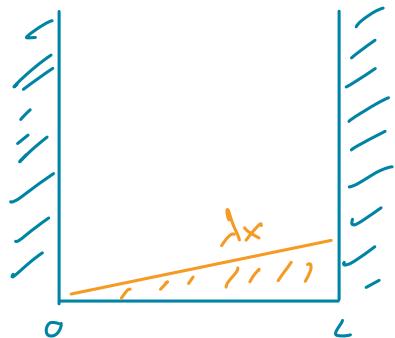
$$E_0(\lambda) = E_0 + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

y si sus autoestados se mezclan con el  $|221\rangle$ :

$$E_{111} - E_{221} = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} - \frac{9\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = -\frac{3\pi^2 \hbar^2}{mL^2}$$

$$|\psi(\lambda)\rangle = |111\rangle - \lambda \frac{mL^2}{12\pi^2 \hbar^2} |221\rangle + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

⑧



$$\text{Pot. Inf.} + V' = \lambda x$$

De  $H_0$  sabemos:

$$E_n^{(0)} = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}; \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Como no hay estados degenerados:

$$E_n^{(1)} = \langle n | x | n \rangle = \frac{2}{L} \int_0^L dx \times \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) = (\dots) = \frac{L}{2}$$

Independiente de  $n$ , todos los niveles se corrigen igual:

$$E_n(\lambda) = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} + \frac{1}{2} \lambda L + \mathcal{O}(\lambda^2)$$

## ⑨ Atomo Helio

$$② H_0 = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} - \frac{2e^2}{r_2}$$

Despreciando la interacción tenemos los  $e^-$ , cada uno con un  $H$  como el hidrógeno pero con  $Z=2$ . Así que cada uno tendrá energías:

$$E_n = -\frac{E_I^{Z=2}}{n^2} \quad \text{con} \quad E_I^{Z=2} = Z^2 E_I \approx 54'4 \text{ eV}$$

$$\rightarrow E_I = \frac{m_e e^4}{2 \pi^2} \sim 13'6 \text{ eV}$$

Así que la energía del helio en estado fundamental será:

$$E_{n_1, n_2}^{(0)} = E_{n_1}^{(0)} + E_{n_2}^{(0)} \Rightarrow E_{11}^{(0)} = -4E_I \approx -108'8 \text{ eV}$$

Que no se parece mucho al experimental  $E_0^{\exp} = -78'975 \text{ eV}$ .

**Nota:** no damos incertidumbres para hacer esta comparación bien, pero se entiende que son pequeñas.

$$⑥ H_{int} = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

Se entiende que la diferencia tan grande entre nuestro resultado anterior y el experimental se debe a la interacción entre electrones. Estamos hablando de una corrección del  $\sim 25\%$ , así que no es tan pequeña. Esto ya nos lo podríamos imaginar sólo de comparar  $H_{int}$  con  $H_0$ , que no tenemos  $H_{int} \ll H_0$  como en el resto de problemas de este tema. De hecho,  $H_{int}$  se vuelve enorme si los dos  $e^-$  están cerca.

Aún así, vamos a probar a introducirlo usando teoría de perturbaciones. Como consuelo para poder dormir sin pesadillas por el límite  $\vec{r}_1 \rightarrow \vec{r}_2$ , podemos consolarnos pensando que el principio de Pauli tratará de evitar esa situación (la fuerza de intercambio del ejercicio 5.4).

Entonces, la corrección al primer orden será:

$$\Delta E_{II}^{(1)} = \langle H_{\text{int}} \rangle = \int d^3 r_1 d^3 r_2 \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} |\Psi_{100}(r_1)|^2 |\Psi_{100}(r_2)|^2$$

sustituimos  $\Psi_{100}(\vec{r}) = R_{10}(r) Y_0^0(\theta, \varphi) = 2 \left(\frac{z}{r_B}\right)^{3/2} e^{-zr/r_B} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

$$\Delta E_{II}^{(1)} = \frac{z^6 e^2}{\pi^2 r_B^6} \int r_1^2 dr_1 e^{-4r_1/r_B} \int r_2^2 dr_2 e^{-4r_2/r_B} \int d\Omega_1 d\Omega_2 \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$$|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta_{12}}$$

Tenemos que integrar bajo los dos ángulos sólidos. Usamos la simetría esférica para orientar el eje  $z$  con  $\vec{r}_1$ , de forma que la int en  $d\Omega_1$  nos da  $4\pi$ . Además tendremos un  $2\pi$  de la int en  $\varphi_2$  e identificaremos  $\theta_2 = \theta_{12}$ . Nos queda:

$$\begin{aligned} \int d\Omega_1 d\Omega_2 \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} &= 8\pi^2 \int_{-1}^1 d\cos\theta_{12} (r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta_{12})^{-1/2} \\ &= -\frac{8\pi^2}{r_1 r_2} \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\theta_{12}} \Big|_{-1}^1 \\ &= -\frac{8\pi^2}{r_1 r_2} \left( \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2} - \sqrt{r_1^2 + r_2^2 + 2r_1 r_2} \right) \\ &= \frac{8\pi^2}{r_1 r_2} (r_1 + r_2 - |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \Delta E_{11}^{(1)} = \frac{8Z^6 e^2}{r_B^6} \int r_1 dr_1 e^{-4r_1/r_B} \int r_2 dr_2 e^{-4r_2/r_B} (r_1 + r_2 - |r_1 - r_2|)$$

$$= \frac{8Z^6 e^2}{r_B^6} \left(\frac{r_B}{2Z}\right)^5 \int dx_1 x_1 e^{-x_1} \int dx_2 x_2 e^{-x_2} (x_1 + x_2 - |x_1 - x_2|) \quad \hookrightarrow (\dots) = 5/2$$

$$= \frac{5}{8} \frac{Z e^2}{r_B} = \frac{5}{8} m c^2 Z \alpha^2 = \frac{5}{4} Z E_I \simeq 34 \text{ eV}$$

$$\Rightarrow E_{11} \simeq E_{11}^{(0)} + \Delta E_{11}^{(1)} \simeq -74'8 \text{ eV}$$

Mucho más parecido al  $E_0^{\text{exp}} = -78'975 \text{ eV}$ .

Además, sabemos que la corrección a siguiente orden será negativa, porque

$$E_{11} < E_m \Rightarrow \Delta E_{11}^{(2)} = \sum_{m \neq 11} \frac{|\langle m | H_{\text{int}} | 11 \rangle|^2}{E_{11}^{(0)} - E_m^{(0)}} < 0$$

que irá en la buena dirección.

## ⑯ Método Variacional.

Volvemos al átomo de helio, pero ahora usando el método variacional. La idea es probar una familia de soluciones que creemos puede ser una buena aprox. En este caso, como sabemos que los electrones captan la carga del núcleo, probamos con una solución de dos  $e^-$  indep. pero con carga efectiva  $z^*$ :

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, z^*) = \Psi_{100}(\vec{r}_1, z^*) \Psi_{100}(\vec{r}_2, z^*)$$

y ajustamos  $z^*$  para minimizar el valor esperado de  $H$ . Esto nos dará un límite superior a la energía fundamental real.

Como  $\Psi(\vec{r}, z^*)$  son soluciones a/  $H_0(z^*)$ , escribimos:

$$H = \frac{P_1^2}{2m} - \frac{z^* e^2}{r_1} + \frac{P_2^2}{2m} - \frac{z^* e^2}{r_2} + \frac{(z^*-z)e^2}{r_1} + \frac{(z^*-z)e^2}{r_2} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

Y calculamos:

$$\langle H \rangle_\Psi = 2E_{11}(z^*) + (z^*-z)e^2 \left( \langle \frac{1}{r_1} \rangle + \langle \frac{1}{r_2} \rangle \right) + \langle H_{int} \rangle$$

Vemos que  $\langle \frac{1}{r} \rangle_{1s} = \frac{1}{r_n}$  en el hidrógeno, y en el problema anterior hemos calculado  $\langle H_{int} \rangle$ . Así que:

$$\langle \frac{1}{r} \rangle_{1s} = \frac{z^*}{r_n} = \frac{z^*}{e^2} mc^2 \alpha^2$$

$$\langle H_{int} \rangle = \frac{\Sigma}{8} mc^2 z^* \alpha^2$$

$$\begin{aligned}
 \Rightarrow \langle H \rangle_{\psi} &= -mc^2\alpha^2 z^{*2} + (z^* - z) z^{*2} mc^2\alpha^2 + \frac{5}{8} mc^2 z^{*2} \alpha^2 \\
 &= -mc^2\alpha^2 \left( z^{*2} - 2z^*(z^* - z) - \frac{5}{8} z^{*2} \right) \\
 &= mc^2\alpha^2 \left[ z^{*2} + z^* \left( \frac{5}{8} - 2z \right) \right]
 \end{aligned}$$

Minimizamos:

$$\frac{d \langle H \rangle_{\psi}}{dz^*} = 0 \quad \Rightarrow \quad z^* = z - \frac{5}{16} = \frac{27}{16} \approx 1'7$$

como si tuviésemos un apantallamiento del  $\sim 15\%$ .

La energía mínima nos dará el límite que buscábamos:

$$E_0^{\text{real}} \leq \langle H \rangle_{\psi} \left( z^* = \frac{27}{16} \right) = -mc^2\alpha^2 \left( \frac{27}{16} \right)^2 \approx -77'5 \text{ eV}$$

Que queda muy cerca del  $E_0^{\text{exp}} = -78'975 \text{ eV}$ , más que con la teoría de perturbación al primer orden. Se ve que en este caso la aprox del apantallamiento funciona mejor que tratar la interacción de manera perturbativa.

## II) Estructura fina ls.

Recap:  $H_F = H_{\text{cin}} + H_D + H_{\text{so}}$

$$H_{\text{cin}} = -\frac{p^4}{8m^2c^2} \quad \rightarrow \text{de expandir } E = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2}$$

$$H_D = \frac{\pi^2\hbar^2}{2m^2c^2} S(r) \quad \rightarrow \text{término de Darwin, no local}$$

$$H_{\text{so}} = \frac{e^2}{2m^2c^2} \frac{1}{r^3} \vec{L} \cdot \vec{S} \quad \rightarrow \text{espín-óbita}$$

Para la estructura fina, nos olvidamos del espín del protón, así que en el ls tenemos dos estados degenerados:

$$|n=L, l=0, m_L=0, m_S=\pm\rangle$$

Como la única diferencia es el espín, sólo  $H_{\text{so}}$  podrá romper la degeneración, pero como  $\vec{S}=0$ , no afectará al ls:

$$\langle H_{\text{so}} \rangle_{ls} = 0$$

Y por tanto seguirán degenerados también en estructura fina. Los otros dos términos no ven el espín, así que modificarán ambos niveles por igual. Calcularemos cuánto:

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{r} \Rightarrow p^4 = 4m^2 \left[ H_0 + \frac{e^2}{r} \right]^2$$

$$\Rightarrow \langle H_{\text{cin}} \rangle_{ls} = -\frac{1}{2mc^2} \left( E_{ls}^2 + 2e^2 E_{ls} \langle \frac{1}{r} \rangle_{ls} + e^4 \langle \frac{1}{r^2} \rangle_{ls} \right)$$

Así que tenemos que calcular los valores medios de  $\frac{1}{r}$  y  $\frac{1}{r^2}$ , usando

$$P_r^{ls}(r) = r^2 |R_{10}(r)|^2 = \frac{4}{r_B^3} r^2 e^{-2r/r_B}$$

$$\langle \frac{1}{r} \rangle_{1s} = \dots \text{ lo hicimos en el Tema 2...} = \frac{1}{r_B}$$

$$\langle \frac{1}{r^2} \rangle_{1s} = \int_0^\infty dr \frac{1}{r^2} P_r^{1s}(r) = \frac{4}{r_B^3} \int_0^\infty dr e^{-2r/r_B} = \frac{2}{r_B^2} \int_0^\infty dk e^{-k} = \frac{2}{r_B^2}$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \langle H_{\text{cin}} \rangle_{1s} &= -\frac{1}{2mc^2} \left( E_I^2 - \frac{2e^2 E_I}{r_B} + \frac{2e^4}{r_B^2} \right) & E_I &= \frac{1}{2} mc^2 \alpha^2 \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \left( \frac{1}{4} m^2 c^6 \alpha^4 - \frac{m^2 c^2 e^4 \alpha^2}{\hbar^2} + \frac{2m^2 e^8}{\hbar^4} \right) & r_B &= \frac{\hbar^2}{me^2}, \quad \alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \\ &= -\frac{1}{8} mc^2 \alpha^4 (1 - 4 + 8) = -\frac{5}{8} mc^2 \alpha^4 \end{aligned}$$

$$\hookrightarrow \langle H_D \rangle_{1s} = \int d^3 \vec{r} H_D |\psi_{1s}(\vec{r})|^2 = \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} |\psi_{1s}(0)|^2$$

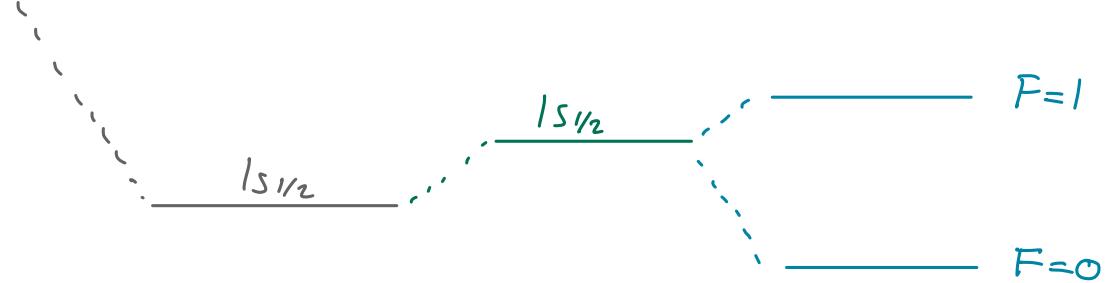
$$= \frac{\pi e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2} |\mathcal{R}_{1s}(0)|^2 |Y_0^0|^2 = \frac{e^2 \hbar^2}{2m^2 c^2 r_B^3} = \frac{m e^8}{2 \hbar^4 c^2} = \frac{1}{2} mc^2 \alpha^4$$

Sumando todo:

$$\boxed{\langle H_F \rangle_{1s} = \langle H_{\text{cin}} \rangle_{1s} + \langle H_D \rangle_{1s} = -\frac{1}{8} mc^2 \alpha^4}$$

## ⑫ Línea 21 cm

En clase hemos visto la estructura fina de la capa  $1s$ :



H<sub>0</sub>

Estructura fina

(+ Lamb)

Est. hiperfina.

Así que el estado fundamental será el  $1s_{1/2}$  con  $F=0$  y el primer estado excitado el  $1s_{1/2}$  con  $F=1$ .

La diferencia de energía es muy pequeña, ya que es puramente efecto hiperfino:

$$E_{1s_{1/2}}^{F=1} - E_{1s_{1/2}}^{F=0} = \Delta \hbar^2 \approx E_I \alpha^2 \frac{m_e}{m_p} \stackrel{\text{est. fina}}{\sim} \underset{\substack{\text{ef. magnéticos electrónicos} \\ \text{sobre nucleos, } \mu_B/\mu_n}}{\sim} 10^{-7} E_I$$

Que sea tan pequeño hace más fácil que átomos de hidrógeno se exciten a este nivel ("sólo" tienen que cambiar la orientación del espín del  $e^-$ ), así que es más probable que ocurra en la naturaleza y que luego emitan luz al desexcitarse.

En clase vimos que

$$\Delta \hbar^2 = \frac{4 g_F m}{3 m_p} m c^2 \alpha^4 \left(1 + \frac{m}{m_p}\right)^{-3} \approx 9'4 \cdot 10^{-25} \text{ J} \approx 5'87 \text{ meV}$$

$\hookrightarrow \text{PDG'24}$

Esto quiere decir que la longitud de onda del fotón emitido:

$$E = h\nu \Rightarrow \lambda = \frac{hc}{E} \approx 0.21\text{ m} = 21\text{ cm}$$

Este líne cae en el rango de microondas, una ventana en la que el polvo cósmico es transparente (no absorbe estos fotones y los deja pasar), así que nos permite observar el universo en zonas que no podemos ver con otro tipo de radiación (la visible, en concreto).

De hecho, buscar esta línea tan característica del hidrógeno, ha sido clave para estudiar, por ejemplo, la estructura espiral de nuestra galaxia, o para estudiar las primeras épocas del universo (el fin de la "éra oscura").

Nota: dada la importancia de este líne, se ha estudiado a muerte en el laboratorio y a día de hoy se conoce (experimentalmente) con muchísima más precisión de los dos dígitos que hemos estimado. No será la más actual, pero el Cohen da

$$\frac{4\pi}{2\pi} = 1420\,405\,751'767 \pm 0'001\text{ Hz.}$$

### (13) Efecto Stark.

Este efecto es parecido al efecto Zeeman, queremos romper la simetría esférica para romper la degeneración entre los estados con misma  $M_F$ , lo único que ahora lo hacemos con un campo eléctrico en vez de magnético.

$$H_S = -q \vec{E} \cdot \vec{r} = -q E z$$

Pero en este ejercicio no vamos a fijarnos en la ruptura de energías, sino simplemente en el momento dipolar inducido.

Vamos a asumir que  $\vec{E}$  es pequeño como para sólo perturbar  $H_0$ , pero mayor que  $H_F$  y  $H_{HF}$ , que vamos a despreciar. Igual que hicimos en clase con el efecto Zeeman, podríamos añadir después  $H_F$  o  $H_{HF}$ , o resolverlo también para la jerarquía inversa. Así que tenemos,

$$H = H_0 + H_S$$

El momento dipolar de un átomo de hidrógeno en el estado fundamental viene dado por:

$$\vec{d} = \langle q \vec{r} \rangle_{1s}$$

que resulte ser cero por paridad ( $\vec{r}$  es impar, mientras que  $|r|^2$  es par).

Al meter la perturbación  $H_S$ , la cosa cambia, porque los estados se verán modificados y, como  $H_S$  es impar bajo paridad, nos mezclará con estados impares, de forma

que  $\vec{r}$  sobre el estado modificado no se anule y tengamos un  $\vec{d}$  inducido por  $\vec{E}$ .  
 Lo hacemos explícito:

$$|\Psi\rangle = |L, 0, 0\rangle + \sum_{\substack{n>1 \\ l, m}} \frac{\langle n, l, m | H_s / 100 \rangle}{E_l - E_n} |n, l, m\rangle$$

Calculmos explícitamente:

$$\langle n l m | H_s / 100 \rangle = -qE \langle n l m | z / 100 \rangle$$

$$= -qE \int dr r^3 R_{nl}^* R_{1s} \int d\Omega \cos\Theta Y_e^{m*} Y_0^l$$

Para la int. angular usamos  $\cos\Theta = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0$  y  $Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ :

$$\int d\Omega \cos\Theta Y_e^{m*} Y_0^l = \frac{1}{\sqrt{3}} \int d\Omega Y_1^0 Y_e^{m*} = \frac{1}{\sqrt{3}} \delta_{mo} \delta_{ez}$$

así que sólo se mezcla con los estados  $|n, 1, 0\rangle$ . La int. radial se puede resolver, pero simplemente la deshacemos:

$$I_n \equiv \frac{1}{r_B} \int dr r^3 R_{nl}^* R_{1s} = 2^4 \frac{n^{7/2} (n-1)^{n-5/2}}{(n+1)^{n+5/2}} \quad (\text{irrelevantes darla})$$

$$\Rightarrow \langle n l m | H_s / 100 \rangle = -\frac{qE}{\sqrt{3}} r_B I_n \delta_{ez} \delta_{mo}$$

$$\Rightarrow |\Psi\rangle = |L00\rangle - \frac{qE}{\sqrt{3}} r_B \sum_{n>1} \frac{I_n}{E_l - E_n} |n10\rangle$$

Entonces el dipolo eléctrico:

$$\vec{d} = \langle q\vec{r} \rangle_{\psi} = \langle \psi | q\vec{r} | \psi \rangle$$

$$= -\frac{q^2 E}{\sqrt{3}} r_B \sum_{n>1} \frac{I_n}{E_0 - E_n} (\langle 100 | \vec{r} | n20 \rangle + \langle n10 | \vec{r} | 100 \rangle)$$

Igual que antes,  $\langle 100 | x, y | n10 \rangle = 0$  al integrar sobre  $\phi$ , y solo nos queda  $z$ :

$$\langle 100 | \vec{r} | n20 \rangle = \frac{r_0}{\sqrt{3}} I_n \hat{k}$$

$$\Rightarrow \vec{d} = \frac{q^2 r_B^2}{3 E_I} \vec{E} \sum_{n>1} \frac{I_n^2}{1 - 1/n^2}$$

Tenemos un momento dipolar inducido y paralelo a  $\vec{E}$ . En otras palabras, hemos calculado, desde nuestro modelo cuántico, la susceptibilidad del átomo de hidrógeno en el estado fundamental.

$$\chi_{1s} = \frac{q^2 r_B^2}{3 E_I} \sum_{n>1} \frac{I_n^2}{1 - 1/n^2}$$

# SOLUCIONES HOJA 7

## PERTURBACIONES DEPENDIENTES DEL TIEMPO

Resumen de lo visto en clase y notación: estudiamos transiciones desde un estado estacionario inicial  $|\psi_i\rangle$  hasta uno final  $|\psi_f\rangle$  (que puede pertenecer a un espectro discreto o continuo), mediados por un  $H = H(t)$ :

$$|\psi_i\rangle \xrightarrow{H(t)} |\psi_f\rangle \quad (\text{con } \psi_f \neq \psi_i)$$

Queremos calcular  $|\psi(t)\rangle$ , con  $|\psi(t=0)\rangle = |\psi_i\rangle$ , de forma que la prob. de transición será

$$P_{if}(t) = |\langle \psi_f | \psi(t) \rangle|^2$$

$|\psi(t)\rangle$  vendrá controlado por  $H(t)$ , pero para aplicar teoría de pert. asumimos

$$H(t) = H_0 + H_1(t) = H_0 + \lambda W(t), \quad \lambda \ll 1.$$

con  $H_0$  estacionario y con soluciones conocidas.

Usamos coef. variables (y dependientes de  $t$ ) para expresar  $|\psi(t)\rangle$ :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\psi_n^{(0)}\rangle = \sum_n b_n(t) e^{-i \frac{E_n^{(0)}}{\hbar} t} |\psi_n^{(0)}\rangle$$

y expandimos perturbativamente estos  $b_n(t)$ :

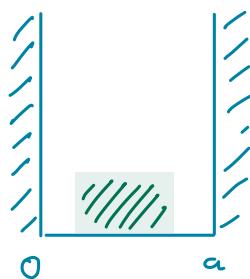
$$b_n(t) = b_n^{(0)}(\lambda) + \lambda b_n^{(1)}(t) + \lambda^2 b_n^{(2)}(t) + \dots$$

Resolviendo obtenemos a primer orden:

$$P_{if}(t) \simeq \lambda^2 |b_f^{(1)}(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t dt' e^{i \omega_{fi} t'} \langle \psi_f | H_1(t') | \psi_i \rangle \right|^2$$

con la frecuencia de Bohr  $\omega_{fi} = \frac{E_f - E_i}{\hbar}$ .

①



$$t < 0 : H_0 \text{ pazo inf. } E_n^{(0)} = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2ma^2}$$

$$\phi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

$$t \geq 0 : H_1 = \hbar\omega_0 \text{ para } \frac{a}{4} \leq x \leq \frac{3a}{4}$$

$$|\psi(t=0)\rangle = |\phi_3^{(0)}\rangle. \longrightarrow \text{Prob. } |\phi_3^{(0)}\rangle \rightarrow |\phi_1^{(0)}\rangle ?$$

La dependencia temporal viene porque la pert. aparece en  $t=0$ , aunque luego es constante. Este caso lo hemos resuelto en clase y sale:

$$P_{if}(t) \approx \frac{1}{\hbar^2} [H_2]_{fi}^2 \frac{\sin^2\left(\frac{\omega_{fi} t}{\hbar}\right)}{\omega_{fi}/4}$$

Calculamos el elemento de matriz (que no es nulo porque  $H_1$  no es constante en todo el rango  $(0, a)$ ):

$$[H_2]_{13} = \langle \phi_1^{(0)} | H_1 | \phi_3^{(0)} \rangle = \hbar\omega_0 \frac{2}{a} \int_{a/4}^{3a/4} dx \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right) = (\dots) = -\frac{\hbar\omega_0}{\pi}$$

Y la frecuencia de Bohr:

$$\omega_{13} = \frac{E_1 - E_3^{(0)}}{\hbar} = -\frac{4\pi\hbar}{ma^2}$$

Juntando:

$$P_{31}(t) \approx \frac{m^2 a^4 \omega_0^2}{4\pi^4 \hbar^2} \sin^2\left(\frac{2\pi\hbar}{ma^2} t\right)$$

La probabilidad de encontrarla en  $|\phi_1^{(0)}\rangle$  oscila con el tiempo con periodo

$$T = \frac{ma^2}{\hbar}$$

$$② \quad H_0 = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} kx^2 \quad (t < 0)$$

$$|\psi_0^{(0)}\rangle \longrightarrow |\phi_i^{(0)}\rangle ?$$

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} k(x-d)^2 \quad (t > 0)$$

Identificamos la perturbación:

$$H = \underbrace{\frac{P^2}{2m}}_{H_0} + \underbrace{\frac{1}{2} kx^2}_{H_1} - kdx + \underbrace{\frac{1}{2} kd^2}_{\hookrightarrow \text{término cte, no contribuye.}}$$

Usamos  $a^+$  y  $a$ :

$$H_1 = -kdx = -kd\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a^+ + a) \equiv -A(a^+ + a)$$

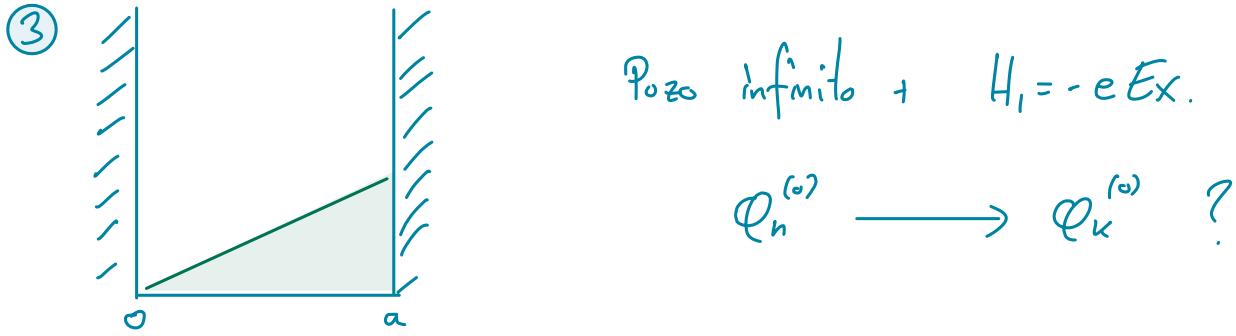
El elemento de matriz relevante y la freq. de Bohr:

$$\langle L | H_1 | 0 \rangle = -A \langle L | a^+ | 0 \rangle = -A$$

$$\omega_{10} = \frac{E_1 - E_0}{\hbar} = \omega \quad (\omega^2 = k/m)$$

Entonces, igual que el problema anterior:

$$P_{10}(t) \approx \frac{4A^2}{\hbar^2 \omega^2} \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) = \frac{2m\omega d^2}{\hbar} \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)$$



Igual que antes...

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} ; \quad \phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

$$\begin{aligned} \langle \phi_k | H_1 | \phi_n \rangle &= -eE \frac{2}{a} \int_0^a dx \times \sin\left(\frac{k\pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \\ &= (\dots) = \frac{eEa}{\pi^2} \left( \frac{\cos[(k+n)\pi] - 1}{(k+n)^2} - \frac{\cos[(k-n)\pi] - 1}{(k-n)^2} \right) \end{aligned}$$

Para  $k+n = \text{par}$ :

$$\cos[(k+n)\pi] = \cos[(k-n)\pi] = 1 \Rightarrow \langle \phi_k | H_1 | \phi_n \rangle = 0 \quad \text{SIN TRANSICIÓN}$$

Para  $k+n = \text{impar}$ :

$$\cos[(k+n)\pi] = \cos[(k-n)\pi] = -1 \Rightarrow \langle \phi_k | H_1 | \phi_n \rangle = \frac{-8eEa kn}{\pi^2 (k^2 - n^2)^2}$$

$$\omega_{kn} = (k^2 - n^2) \frac{\pi^2 \hbar}{2ma^2} \quad \rightarrow \text{Prob. de tener cosechas} = 1.$$

$$\Rightarrow P_{nk}(t) \simeq \frac{64e^2 E^2 a^6}{\pi^8 \hbar^4} \frac{k^2 n^2}{(k^2 - n^2)^6} \sin^2\left(\frac{(k^2 - n^2)\pi^2 \hbar}{4ma^2} t\right)$$

## ④ Regla de oro de Fermi para pert. sinusoidal.

En clase la hemos derivado para una pert. cte. La única diferencia será en la conservación de la energía, ya que la prob. de transición estará centrada sobre la frecuencia  $\omega$  de la perturbación.

En clase hemos hecho para  $H_1(t) = \lambda W$ :

$$\frac{dP(\varrho_i, E, \beta)}{dEd\beta dt} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle E, \beta | \lambda W | \varrho_i \rangle|^2 \rho(E, \beta) \delta(E - \bar{E}_i)$$

Ahora tendremos, para  $H_1(t) = \lambda W \sin(\omega t)$ :

$$\frac{dP(\varrho_i, E, \beta)}{dEd\beta dt} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle E, \beta | \lambda W | \varrho_i \rangle|^2 \rho(E, \beta) \delta(E - \bar{E}_i - \hbar\omega)$$

$$\textcircled{5} \quad C \rightarrow A + \gamma \quad \text{vs} \quad C \rightarrow B + \gamma$$

$$m_C = 2m, m_A = m; \quad m_B = \frac{3}{2}m. \quad \langle C | H_i | A + \gamma \rangle = \langle C | H_i | B + \gamma \rangle.$$

La regla de oro de Fermi nos dice que cada una de estas desintegraciones tendrá una anchura dada por:

$$\frac{d\Gamma(C \rightarrow x + \gamma)}{dp} = \frac{2\pi}{\hbar} \rho(E, \beta) |\langle C | H_i | x + \gamma \rangle|^2$$

Como el elemento de matriz para A y B son iguales, la única diferencia podrá venir de la densidad de estados.

Asumiendo que  $x = A, B$  están en reposo, el índice  $\beta$  en este caso caracterizará la dirección en la que sale el fotón. Más explícitamente, el espectro continuo (lo que llamaremos  $\rho$  en la teoría), corresponderá a  $|p\rangle$  del fotón. Para sacar la densidad de estados  $\rho(E, \beta)$ , usamos

$$E_\gamma = pc \Rightarrow d\alpha \equiv d^3p = p^2 dp d\Omega = \frac{E_\gamma^2}{c^3} dE_\gamma d\Omega$$

$$\Rightarrow \rho(E, \beta) = \rho(E) = E_\gamma^2/c^3$$

$$\text{La energía del fotón será: } E_\gamma = (m_C - m_x)c^2$$

$$\Rightarrow \frac{\Gamma(C \rightarrow A\gamma)}{\Gamma(C \rightarrow B\gamma)} = \frac{\rho_A(E)}{\rho_B(E)} = \frac{(m_C - m_A)^2}{(m_C - m_B)^2} = \frac{m^2}{m^2/4} = 4$$

Como  $m_A < m_B$ , hay más "espacio de fases", mayor densidad de estados, y por tanto la desintegración ocurrirá más frecuentemente.

## ⑥ Isospín.

Obviamente no hemos visto nada de isospín en clase, pero he metido este problema para que vean un uso aplicado de los Clebsch-Gordan, además en combinación con la regla de oro de Fermi.

A mí me parece un problema bonito para terminar, pero lo haré con mucha calma porque igual se les hace muy abstracto (también podéis exploraros más hablando sobre isospín)

(a) Juntamos dos cosas. Por un lado la regla de oro de Fermi, que nos dice:

$$\frac{dP(A \rightarrow B+C)}{d\beta} = \frac{2\pi}{\hbar} | \langle B+C | H_{QCD} | A \rangle |^2 \rho(E, \beta)$$

Tenemos la densidad de estados  $\rho(E, \beta)$ , el "espacio de fases" de antes, que dependerá de las masas; y tenemos el elemento de matriz.

Por otro lado, usamos que QCD conserva isospín. Esto quiere decir que

$$[H_{QCD}, \vec{\mathbf{I}}] = 0$$

y por tanto podemos usar la base  $|K, I, I_3\rangle$ , donde los índices  $K$  esconden toda la mienda extra que no sea isospín (igual que hicimos con  $\vec{\mathbf{Z}}$  en el átomo de hidrógeno). Esto quiere decir que

$$H_{QCD} |K, I, I_3\rangle \propto |K', I, I_3\rangle$$

(mismo autovector de isospín, puede cambiar la' de cualquier manera)

Así que el elemento de matriz:

$$\langle B+C | H_{QCD} | A \rangle \propto_{B+C} \langle I, I_3 | I, I_3 \rangle_A$$

será proporcional al producto escalar entre el isospín de la partícula A y la suma de los finales  $\vec{I}_B + \vec{I}_C$ . Y como el isospín es un momento angular, este coeficiente será justo el Clebsch-Gordan.

En otras palabras, como QCD conserva el isospín, necesitamos que  $\vec{I}_A = \vec{I}_B + \vec{I}_C$ , y la regla de oro de Fermi nos dice encima que será proporcional a su prod. escalar. Como estamos combinando momentos angulares, tenemos los CG.

- ⑤ Creo que se entiende mejor con ejemplos. Empezamos con el decay del  $\rho^0 \rightarrow \pi^0 \pi^0 / \pi^+ \pi^-$ . Asumiendo que las masas de todos los piones son iguales,  $\rho(E, \beta)$  será igual y se cancelará en el cociente. Lo mismo con toda la parte turbia de QCD, quedándonos sólo un cociente de CG de isospín.

En términos de isospín, tenemos

$$|\rho^0\rangle = |20\rangle ; |\pi^0\rangle = |20\rangle ; |\pi^\pm\rangle = |1\pm 1\rangle$$

Usamos la tabla 1⊗1 de CG para sumar los isospines de los pares finales:

$$|\pi^0 \pi^0\rangle \sim |20\rangle \otimes |20\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |20\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |00\rangle$$

$$|\pi^+ \pi^-\rangle \sim |11\rangle \otimes |1-1\rangle = \sqrt{\frac{1}{6}} |2,0\rangle + \sqrt{\frac{1}{2}} |2,0\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |0,0\rangle$$

Vemos que con  $\pi^+\pi^-$  sí podemos construir el estado  $|1,0\rangle$  total que correspondería al  $\rho^0$  pero con  $\pi^0\pi^0$  NO! (sólo  $I=0,2$ ). Así que  $\rho^0 \rightarrow \pi^+\pi^-$  podrá ocurrir a través QCD pero  $\rho^0 \rightarrow \pi^0\pi^0$  NO:

$$\frac{\Gamma(\rho^0 \rightarrow \pi^0\pi^0)}{\Gamma(\rho^0 \rightarrow \pi^+\pi^-)} = 0.$$

Repetimos para  $\omega \rightarrow K\bar{K}$ . Ahora tenemos  $|\omega\rangle \sim |0,0\rangle$ . Combinamos los Kaones:

$$|K^0\bar{K}^0\rangle \sim |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1,0\rangle + |0,0\rangle)$$

$$|K^+K^-\rangle \sim |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1,0\rangle - |0,0\rangle)$$

Ambos podrán ocurrir y con la misma intensidad:

$$\frac{\Gamma(\omega \rightarrow K^0\bar{K}^0)}{\Gamma(\omega \rightarrow K^+K^-)} = \frac{|<+|-|0,0>|^2}{|<-+|0,0>|^2} = 1.$$

Ejemplo extra, no está en la hoja pero igual es más interesante: cogemos  $K^{*0}$ , versión pesada del  $K^0$ , que se desintegre principalmente en pares  $K\pi$  neutros. Tenemos 3 opciones:

$$|K^0\pi^0\rangle \sim |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |1,0\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$

$$|K^+\pi^-\rangle \sim |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \otimes |1,-1\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$

$$|K^-\pi^+\rangle \sim |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \otimes |1,1\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$$

Como  $K^{*0} \sim |1/2 - 1/2\rangle$ , tenemos que  $K^{*0} \rightarrow K^-\pi^+$  esté prohibido, mientras que el cociente de los otros dos será:

$$\frac{\Gamma(K^{*0} \rightarrow K^0\pi^0)}{\Gamma(K^{*0} \rightarrow K^+\pi^-)} = \frac{1/3}{2/3} = \frac{1}{2}; \quad \Gamma(K^{*0} \rightarrow K^-\pi^+) = 0$$

Aunque sea sólo cambiar las cargas eléctricas, la conservación de isospin permite acceder al estado final  $K^-\pi^+$  a través de QCD.

El año que viene verán más (y mejores) ejemplos de estos.