Mecánica Cuántica I

Año 2019

Prof: Alejandro Mariano — JTP: Mauricio Matera – Ay. Dipl: Mariela Nieto

Práctica 7 — Teoría de perturbaciones

y acoplamiento de momentos angulares

Acoplamiento de momentos angulares

Problema 1. El Hamiltoniano dependiente del spin de un sistema electrón-positrón en la presencia de un campo magnético uniforme en la dirección z puede escribirse como

$$\mathbf{H} = A\ \vec{\mathbf{S}}^{(e^-)}.\vec{\mathbf{S}}^{(e^+)} + \frac{eB}{mc}(\mathbf{S}_z^{(e^-)} - \mathbf{S}_z^{(e^+)})$$

Suponga que la función de spin del sistema esta dada por $\chi_+^{(e^-)}\chi_-^{(e^+)}$.

1. ¿Es esta una autofunción de $\mathbf{H}$ en el límite $A \to 0$, $\frac{eB}{mc} \neq 0$? Si lo es, ¿cuál es el autovalor de la energía? Si no lo es, ¿cuál es el valor de expectación de $\mathbf{H}$?
2. El mismo problema en el límite $\frac{eB}{mc} \to 0$, $A \neq 0$.

Problema 2. Considerar una partícula de spin 1/2 en un campo central.

1. Hallar la forma de las autofunciones que sean simultáneamente autoestados de $\mathbf{L}^2, \mathbf{J}^2, \mathbf{J}_z$, donde $\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{L}} + \vec{\mathbf{S}}$.
2. Hallar los posibles valores de $\mathbf{L}_z$ y $\mathbf{S}_z$, sus respectivas probabilidades y sus valores medios.

Problema 3. Considerar dos partículas de spin 1/2. Hallar los estados que son simultáneamente autoestados de ${\mathbf{S}_1}^2, {\mathbf{S}_2}^2, \mathbf{S}^2$ y $\mathbf{S}_z$, donde $\vec{\mathbf{S}} = \vec{\mathbf{S}}_1 + \vec{\mathbf{S}}_2$.

Problema 4. Tenemos que sumar dos momentos angulares $j_1 = 1$ y $j_2 = 1$ para formar estados de $j = 2, 1, 0$. Usando el método de operadores de "bajada" y "subida" ó la relación de recurrencia, expresar los nueve autoestados $\{j, m\}$ en términos de $|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle$.

Teoría de perturbaciones

Problema 5. Un oscilador armónico simple en una dimensión es perturbado por una fuerza constante,

$$H_I = \lambda x$$

1. Calcular el cambio en la energía del estado fundamental al orden más bajo no nulo.
2. Resolver el problema exactamente y comparar con el resultado anterior.

Problema 6. Considere una partícula de masa m en el potencial unidimensional $V(x) = -\frac{m\omega^2 a^2}{2\cosh^2(x/a)}$ (que resolvimos exactamente en la práctica 2). Discuta la aplicabilidad de la teoría de perturbaciones (en función de a y ω) para encontrar los autoestados de este problema a partir de los siguientes potenciales no perturbados:

1. Un pozo cuadrado $V_0(x) = \begin{cases} -\frac{m\omega^2 a^2}{2} & x \leq a \\ 0 & x > a \end{cases}$

2. Un oscilador armónico $V_0(x) = \frac{m\omega^2}{2}(x^2 - a^2)$

3. Un pseudopotencial $V_0(x) = -m\omega^2 a^3 \delta(x)$

Donde sea aplicable, compare con el resultado exacto.

Problema 7. ¿Cuál es la probabilidad de encontrar en el estado perturbado $|k\rangle$ al estado no perturbado $|k^{(0)}\rangle$? Resolver a orden g^2. Considere el caso en el que el espectro es no degenerado.

Problema 8. Considerar un oscilador armónico isótropo en 2 dimensiones

1. calcular las energías de los primeros tres niveles y analizar la degeneración

2. considere ahora que sobre el sistema actúa la perturbación

$$V_I = \delta\, m\, \omega^2\, xy,$$

donde δ es un número real adimensional mucho menor que 1. Encontrar el autoestado de energía a orden cero en δ y la energía a primer orden para cada uno de los niveles estudiados.

3. Resolver el problema exactamente y comparar con los resultados obtenidos anteriormente

Problema 9. Un átomo con un solo electrón cuyo estado fundamental es no degenerado es colocado en un campo eléctrico uniforme en la dirección z. Obtener una expresión aproximada para el momento dipolar eléctrico inducido del estado fundamental considerando el valor de expectación de ez con respecto al vector de estado perturbado a primer orden. Mostrar que la expresión coincide con la obtenida del cambio de energía $\Delta E = -\alpha|\mathbf{E}|^2/2$ del estado fundamental calculado a segundo orden (ignore el espín).

Problema 10. Evaluar los siguientes elementos de matriz (si alguno se anula, justificar usando argumentos de simetría)

1. $\langle n=2, l=1, m=0|\, \mathbf{x}\, |n=2, l=0, m=0\rangle$ ($|nlm\rangle$ denota los autoestados del átomo de hidrógeno ignorando el espín)

2. $\langle n=2, l=1, m=0|\, \mathbf{p}_z\, |n=2, l=0, m=0\rangle$

3. $\langle \mathbf{L}_z \rangle$ para un electrón en un campo central con $j = 9/2,\ m_j = 7/2,\ l = 4$

4. $\langle singlete|\left(\mathbf{S}_z^{(e^-)} - \mathbf{S}_z^{(e^+)}\right)|triplete, m_s = 0\rangle$

5. $\left\langle \mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(2)} \right\rangle$ para el estado fundamental de la molécula de hidrógeno.

Problema 11. Considerar una partícula sin espín en una caja cuadrada bidimensional

$$V = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a, 0 \leq y \leq b \\ \infty & \text{caso} \quad \text{contrario} \end{cases}$$

¿Cuáles son los primeros tres autoestados de energía?
Tomando en cuenta la perturbación débil definida por el potencial

$$V_1 = \lambda xy \quad 0 \leq x \leq a, \quad 0 \leq y \leq b.$$

1. ¿Es el cambio de energía lineal o cuadrático en λ?

2. Obtener las expresiones para los cambios de energía de los tres estados más bajos a orden λ.

3. Graficar las energías con y sin perturbación para estos tres estados.

Problema 12. El hamiltoniano de un rotador rígido en un campo magnético perpendicular al eje es de la forma

$$A\mathbf{L}^2 + B\mathbf{L}_z + C\mathbf{L}_y$$

si los términos cuadráticos en el campo son despreciados.

1. Asumiendo $B \gg C$ usar la teoría de perturbaciones a orden dominante para aproximar los autovalores.
2. Hallar la solución exacta y comparar.
3. Considerar los elementos de matriz
$$\langle n', l', m_l', m_s' | 3z^2 - r^2 | n, l, m_l, m_s\rangle,$$
$$\langle n', l', m_l', m_s' | xy | n, l, m_l, m_s\rangle$$
de un átomo de un electrón. Escribir las reglas de selección para Δl, Δm_l y Δm_s.

Problema 13. Efecto Zeeman cuadrático : Estudiar para el estado fundamental del átomo de hidrógeno la corrección (a primer orden) debida al término $e^2A^2/2m_ec^2$ (despreciado inicialmente en el hamiltoniano). Escribiendo el cambio en la energía como

$$\Delta = -\frac{1}{2}\chi B^2,$$

obtener una expresión para la susceptibilidad diamagnética χ.

Problema 14. Considerar el hamiltoniano

$$\begin{aligned}
& && \mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_B, \\
&\mathbf{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mathbf{V}; && V(r) = -\frac{e^2}{r}; \qquad \mathbf{H}_1 = \mathbf{H}_{cm} + \mathbf{H}_{LS}, \\
& && \mathbf{H}_{cm} = -\frac{1}{8}\frac{\mathbf{p}^4}{m^3c^2}, \\
& && \mathbf{H}_{LS} = \frac{1}{m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\,\vec{\mathbf{L}}\cdot\vec{\mathbf{S}}, \\
& && \mathbf{H}_B = -\frac{eB}{2mc}(\mathbf{L}_z + 2\mathbf{S}_z)
\end{aligned}$$

1. Calcular perturbativamente el espectro en el límite $H_1 \gg H_B$ (Zeeman)
2. Calcular perturbativamente el espectro en el límite $H_B \gg H_1$ (Paschen-Back)
3. Resolver exactamente el problema de autovalores y comparar.

En todos los casos analizar las correcciones para los estados con $n = 2$.

Datos útiles

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

Acoplamiento de momentos angulares $l + 1/2$:

$$|l \pm \frac{1}{2}, M\rangle = \pm\sqrt{\frac{l \pm M + \frac{1}{2}}{2l+1}}|l, M - \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{l \mp M + \frac{1}{2}}{2l+1}}|l, M + \frac{1}{2}; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$$