Mecánica Cuántica I
DF - FCEx - UNLP
2do semestre 2023

PROF: Pablo Pisani
JTP: Lucas Manzo
AD: Tomás Vignau

Práctica 8

Los ejercicios marcados con asterisco (*) son opcionales.

Los ejercicios marcados con una daga (†) están relacionados con la cátedra Experimentos Cuánticos I (DF-FCEx-UNLP). Son particularmente recomendados para quienes cursen, hayan cursado o vayan a cursar dicha materia.

8.1 Efecto Zeeman

86. Considerar el efecto Zeeman en un átomo de hidrógeno ^{1}H para campos magnéticos intensos (que permiten ignorar el efecto espín-órbita).

    a. Dibujar un esquema con el desdoblamiento por efecto Zeeman de las capas $n = 2$ y $n = 3$.

    b. Para un campo magnético con intensidad $|\boldsymbol{B}| = 5T$, determinar el espaciamiento entre niveles de una misma capa debido al desdoblamiento Zeeman.

    c. Sobre el mismo esquema del inciso 86a, dibujar todas las transiciones posibles teniendo en cuenta las reglas de selección del modelo dipolar (dadas en el problema 60). ¿Qué diferencia de energía posee cada transición? ¿Cuántas líneas espectrales se observan?

87.† Considerar el efecto Zeeman en un átomo de hidrógeno ^{1}H para campos magnéticos "débiles" (en el sentido que no permiten despreciar la interacción espín-órbita). El momento magnético total puede ser escrito como $\hat{\boldsymbol{\mu}} = -(g_L\hat{\boldsymbol{L}} + g_S\hat{\boldsymbol{S}})\mu_B/\hbar$, donde los factores giromagnéticos son $g_L = 1$ y $g_S = 2$.

    a. Fijando que el campo magnético externo se encuentra en la dirección del eje z, probar que el potencial de interacción puede ser escrito como

$$\hat{V}_{\text{Zee(J)}} = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \boldsymbol{B} = \mu_B\,|\boldsymbol{B}|\frac{\hat{L}_z + 2\hat{S}_z}{\hbar}$$

Se sabe que la "buena base" no está dada por los números cuánticos $\{l, m_l, s, m_s\}$, ya que m_l y m_s no son autovalores de la interacción espín-órbita. En su lugar, la buena base está dada por los números cuánticos $\{l, s, j, m_j\}$, donde el momento angular total es $\hat{\boldsymbol{J}} = \hat{\boldsymbol{L}} + \hat{\boldsymbol{S}}$. Un valor medio calculado en esta base será denotado $\langle \ldots \rangle_{jm_j}$, dejando implícitos a los números cuánticos l y s.

b. Probar

$$\langle \hat{V}_{\text{Zee(J)}} \rangle_{jm_j} = \mu_B |\boldsymbol{B}| \left(m_j + \frac{\langle \hat{S}_z \rangle_{jm_j}}{\hbar} \right) .$$

c. Probar la relación

$$\begin{aligned}\left| j = l + \frac{1}{2}\,,\, m_j \right\rangle = &\sqrt{\frac{l + m_j + 1/2}{2l+1}} \left| l\,,\, s = \frac{1}{2}\,,\, m_l = m_j - \frac{1}{2}\,,\, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle \\ &+ \sqrt{\frac{l - m_j + 1/2}{2l+1}} \left| l\,,\, s = \frac{1}{2}\,,\, m_l = m_j + \frac{1}{2}\,,\, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle .\end{aligned}$$

Sugerencia: proceder por inducción sobre m_j. Primero observar que la relación debe ser necesariamente cierta para el caso $m_j = l + 1/2$. Luego asumir que la relación es válida para un dado m_j y aplicar el operador escalera $\hat{J}_- = \hat{L}_- + \hat{S}_-$ a ambos lados de la igualdad para probar que es válida para $m_j - 1$. Se debe usar el resultado del problema 58b.

d. Probar, a menos de una fase global, la relación

$$\begin{aligned}\left| j = l - \frac{1}{2}\,,\, m_j \right\rangle = &-\sqrt{\frac{l - m_j + 1/2}{2l+1}} \left| l\,,\, s = \frac{1}{2}\,,\, m_l = m_j - \frac{1}{2}\,,\, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle \\ &+ \sqrt{\frac{l + m_j + 1/2}{2l+1}} \left| l\,,\, s = \frac{1}{2}\,,\, m_l = m_j + \frac{1}{2}\,,\, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle .\end{aligned}$$

Sugerencia: en primer lugar, notar que el estado del lado izquierdo de la igualdad debe necesariamente ser una combinación lineal de los dos estados del lado derecho. Luego obtener dos ecuaciones para dichos coeficientes: una por normalización y otra por ortogonalidad con los estados del inciso anterior.

Nota: el resultado de este inciso y del anterior pueden resumirse en

$$\begin{aligned}\left| j = l \pm \frac{1}{2}\,,\, m_j \right\rangle = &\pm\sqrt{\frac{l \pm m_j + 1/2}{2l+1}} \left| l\,,\, s = \frac{1}{2}\,,\, m_l = m_j - \frac{1}{2}\,,\, m_s = \frac{1}{2} \right\rangle \\ &+ \sqrt{\frac{l \mp m_j + 1/2}{2l+1}} \left| l\,,\, s = \frac{1}{2}\,,\, m_l = m_j + \frac{1}{2}\,,\, m_s = -\frac{1}{2} \right\rangle .\end{aligned} \tag{13}$$

e. Usar la ecuación (13) para probar

$$\frac{\langle \hat{S}_z \rangle_{j=l\pm 1/2, m_j}}{\hbar} = \pm \frac{m_j}{2l+1} .$$

f. A partir de los incisos 87b y 87e, probar

$$\langle \hat{V}_{\mathrm{Zee(J)}} \rangle_{jm_j} = g_J\, \mu_B |\boldsymbol{B}|\, m_j \ ,$$

donde g_J es el *factor de Landé*, dado por

$$g_J = \frac{1}{l+1/2} \times \begin{cases} l & \text{si } \ j = l + 1/2 \\ l+1 & \text{si } \ j = l - 1/2 \end{cases} .$$

88. a. Realizar un esquema con todos los niveles de energía y las transiciones permitidas por el modelo dipolar para las subcapas $1s$ y $2p$, teniendo en cuenta el efecto Zeeman para campos débiles. ¿Qué diferencia de energía posee cada transición? ¿Cuántas líneas espectrales se observan?

    b. Repetir el inciso anterior para los niveles y transiciones entre las subcapas $2p$ y $3d$.

89. Realizar un diagrama de niveles para el átomo de hidrógeno que contenga al menos a las subcapas $2p$ y $3d$, teniendo en cuenta los siguientes fenómenos:

    a. Niveles electrónicos “puros” (sin correcciones de ningún tipo).

    b. Efecto espín-órbita.

    c. Efecto espín-órbita + corrección relativista.

    d. Efecto espín-órbita + corrección relativista + efecto Zeeman débil.

8.2 Aproximación WKB

90. La aproximación WKB conduce a la *regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld*, que puede ser enunciada de la siguiente manera: sea $x \in (x_1, x_2)$ tal que $V(x) < E$, donde los *puntos de retorno* x_1 y x_2 son tales que $V(x_1) = V(x_2) = E$. Entonces la regla de Bohr-Sommerfeld se escribe en la forma

$$\int_{x_1}^{x_2} dx\, \sqrt{2m\Big[E - V(x)\Big]} = \hbar\pi \left(n + \frac{1}{2}\right) , \qquad n \in \mathbb{N}_0 \ .$$

Aplicar esta regla para los siguientes potenciales y obtener las correspondientes expresiones para la energía, comparando con la solución exacta:

a. El oscilador armónico:

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \ , \qquad E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right) .$$

b. El oscilador anarmónico (potencial de Morse):

$$V(x) = D_e \left(1 - e^{-x/L}\right)^2 , \qquad E_n = \sqrt{\frac{2D_e}{m}}\, \frac{\hbar}{L} \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{\hbar^2}{2mL^2} \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 .$$

Sugerencia: para resolver la integral en el caso del oscilador anarmónico, realizar la sustitución $u = 1 - e^{-x/L}$ y emplear la integral

$$\int_{-A}^{A} du\, \frac{\sqrt{A^2 - u^2}}{1 - u} = \pi\Big[1 - \sqrt{1 - A^2}\Big]\,, \quad \text{si} \quad 0 < A < 1\,.$$

91. Considerar una partícula con energía $E < 0$ que incide sobre una barrera de potencial de la forma $V(x) = -\alpha|x|^p$ con $p > 0$ y $\alpha > 0$.

   a. Utilizar la aproximación WKB para probar que el logaritmo del coeficiente de transmisión es

$$\ln T \sim -\frac{\sqrt{8m}}{\hbar}\frac{|E|^{(p+2)/2p}}{\alpha^{1/p}}\int_0^1 du\,\sqrt{1 - u^p}\,.$$

   b.* Mediante un programa de cálculo, resolver exactamente la integral anterior para p arbitrario.

   c. Resolver analíticamente para los casos $p = 1$ y $p = 2$.

   d. Para los casos del inciso anterior, suponer que la energía incidente está relacionada con los parámetros del problema mediante

$$|E| = \lambda\, \alpha^{2/(p+2)} \left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^{p/(p+2)}\,,$$

   donde λ es una constante adimensional (verificarlo). Determinar el coeficiente de transmisión como función de λ, es decir, $T(\lambda)$.

   e. Determinar el cambio δT en el coeficiente de transmisión $T(\lambda)$ hallado en el inciso anterior ante una pequeña modificación δE en la energía de la partícula incidente.