Física Atómica y Materia Condensada

Semestre 2020-1

Prof: Asaf Paris Mandoki

Ayud: Manuel Mendoza López

Tarea 2
Entrega: 19 septiembre 2019

Ejercicio 1 : Estructura fina de Hidrógeno **40 Puntos**

En clase vimos que el Hamiltoniano de estructura fina tiene la forma

$$H = m_e c^2 + \underbrace{\frac{p^2}{2m_e} + V(r)}_{H_0} - \underbrace{\frac{p^4}{8m_e^3c^2}}_{H_1} + \underbrace{\frac{1}{2m_e^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV(r)}{dr}\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}}_{H_{SO}} + \underbrace{\frac{\hbar^2}{8m_e^2c^2}\nabla^2 V(r)}_{H_D}$$

En este ejercicio calcularás la corrección total a la energía debido a estos términos del Hamiltoniano.

a. Muestra que la corrección debido a la variación de la masa con la velocidad se puede escribir como

$$\Delta E_1 = \langle nlsjm_j|H_1|nlsjm_j\rangle = \frac{m_e c^2 Z^4\alpha^4}{2n^3}\left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{l+\frac{1}{2}}\right).$$

Nota: puedes encontrar los valores de $\langle 1/r\rangle$ y $\left\langle 1/r^2\right\rangle$ en las notas del curso al final de la sección 2.2.

b. Muestra que la corrección debido a la interacción espín-órbita H_{SO} para el caso $l \neq 0$ se puede escribir como

$$\Delta E_{SO} = \langle nlsjm_j|H_{SO}|nlsjm_j\rangle = \frac{m_e c^2 Z^4\alpha^4}{4l(l+\frac{1}{2})(l+1)n^3}\begin{cases} l & \text{si} \quad j = l + \frac{1}{2} \\ -l-1 & \text{si} \quad j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

¿Cuánto vale ΔE_{SO} para el caso $l = 0$?

c. Para cuáles eigenfunciones el término de Darwin resultará en una corrección

$$\Delta E_D = \langle nlsjm_j|H_D|nlsjm_j\rangle$$

distinta de cero? Para este caso, muestra que

$$\Delta E_D = \frac{m_e c^2 Z^4\alpha^4}{2n^3}.$$

Nota: para $l = 0$, $|l = 0, s, j, m_j\rangle = |l = 0, m_l = 0, s, m_s\rangle$. Esto te permite usar las funciones hidrogenoides $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$ para responder este inciso.

d. Muestra que tanto para $l = 0$ como para $l \neq 0$ se tiene que

$$\Delta E_1 + \Delta E_{SO} + \Delta E_D = \frac{m_e c^2 Z^4 \alpha^4}{2n^3} \left[\frac{3}{4n} - \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right].$$

Al agregar los términos restantes del Hamiltoniano de estructura fina al cálculo perturbiativo encontramos que

$$E_{n,j} = m_e c^2 \left(1 - \frac{Z^2 \alpha^2}{2n^2} + \frac{Z^4 \alpha^4}{2n^3} \left[\frac{3}{4n} - \frac{1}{j + \frac{1}{2}} \right] \right).$$

¿Cómo explicas que la energía total depende de j pero no de l, m_l o m_s?

Ejercicio 2 : Interacción espín órbita en estructura fina **30 Puntos**

En este ejercicio encontrarás la representación matricial del operador $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ en las bases $|l, m_l, s, m_s\rangle$ y $|l, s, j, m_j\rangle$ para $s = 1/2$ y $l = 1$.

a. Recuerda el método que usamos en clase para reescribir $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ para poderlo aplicar a un elemento de la base $|l, s, j, m_j\rangle$. Escribe el operador $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ en esta base.

b. Para calcular los elementos de la matriz de $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ en la base $|l, m_l, s, m_s\rangle$ pruebe la siguiente identidad

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = \frac{1}{2}(L_+ S_- + L_- S_+) + L_z S_z.$$

Escribe el operador $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ en esta base.

c. Explica por qué usamos la base $|l, s, j, m_j\rangle$ para calcular $\Delta E = \langle \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \rangle$ como perturbación al Hamiltoniano hidrogenoide y no la base $|l, m_l, s, m_s\rangle$.

Nota: Ponga atención a la estructura de los elementos de matriz antes de calcular todas las entradas y note que muchos son cero.

Ejercicio 3 : Operadores vectoriales **30 Puntos**

Muestra que si $\mathbf{V}$ es un operador vectorial (i.e. satisface la relación de conmutación $[J_i, V_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} V_k$) entonces

$$[J^2, [J^2, \mathbf{V}]] = \hbar^2 \left(2(J^2 \mathbf{V} + \mathbf{V} J^2) - 4(\mathbf{V} \cdot \mathbf{J})\mathbf{J} \right)$$

Usa la convención de suma de Einstein para simplificar la notación. Por ejemplo, usa $J^2 = J_i J_i$. También puedes usar las siguientes identidades

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C],$$
$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B,$$
$$\epsilon_{ijk}\epsilon_{imn} = \delta_{jm}\delta_{kn} - \delta_{jn}\delta_{km}.$$

Sugerencia: Muestra primero que

$$[J^2, \mathbf{V}] = 2i\hbar \mathbf{V} \times \mathbf{J} + 2\hbar^2 \mathbf{V}$$

o lo que es lo mismo

$$[J_i J_i, V_j] = 2i\hbar \epsilon_{jki} V_k J_i + 2\hbar^2 V_j.$$