Física Atómica y de Láseres

Semestre 2021-2

Prof: Asaf Paris Mandoki

Tarea 1
Entrega: 03/03/2021

Ej. 1: Repaso átomo de hidrogenoide **20 Puntos**

Dados los números cuánticos n y ℓ, escribe un programa que calcule y grafique las funciones de onda radiales para estados ligados del átomo hidrogenoide $R_{n\ell}(r)$ y sus eigenvalores E_n a partir de las expresiones analíticas.

Ej. 2: Teorema Hellman-Feynman y observables de hidrógeno **20 Puntos**

El Teorema de Hellman-Feynan es útil para calcular observables para el átomo de hidrógeno. Éste teorema dice que si tenemos un Hamiltoniano $H(\lambda)$ que depende de un parámetro real λ y un eigenvector normalizado $|\psi(\lambda)\rangle$ de $H(\lambda)$ con eigenvalor $E(\lambda)$ entonces

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}E(\lambda) = \langle\psi(\lambda)|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}H(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle\,.$$

a Demuestra este teorema. (Hint: calcula la derivada de $H(\lambda)\,|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)\,|\psi(\lambda)\rangle$ respecto a λ y multiplica por $\langle\psi(\lambda)|$.)

Una manera de calcular valores esperado como $\langle 1/r\rangle$ y $\left\langle 1/r^2\right\rangle$ para el átomo de hidrógeno es calcular las integrales $\int R_{nl}(r)\frac{1}{r}R_{nl}(r)r^2\,\mathrm{d}r$ y $\int R_{nl}(r)\frac{1}{r^2}R_{nl}(r)r^2\,\mathrm{d}r$ respectivamente. El Teorema de Hellman-Feynman nos ofrece una alternativa ingeniosa a este cálculo. Considerando la ecuación radial para las funciones de onda, ésta tiene un Hamiltoniano de la forma

$$H_r = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}r + \frac{\hbar^2\ell(\ell+1)}{2\mu r^2} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r},$$

donde notamos que tenemos un término proporcional a $1/r$ y otro a $1/r^2$.

b Derivando H_r respecto a e vemos que podemos aislar el término $1/r$. Usa esto, el teorema de Hellman-Feynman y los eigenvalores conocidos de hidrógeno para obtener una expresión para $\langle 1/r\rangle$ cuando el sistema se encuentra en un eigenestado del Hamiltoniano.

c Calcula $\left\langle \frac{1}{r^2}\right\rangle$ cuando el sistema se encuentra en un eigenestado del Hamiltoniano usando el mismo método. En este caso es necesario derivar respecto a ℓ y recordar[1] de la derivación de las soluciones hidrogenoides que $n = \ell + k$, donde k era una constante por lo que $\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}\ell} = 1$.

Nota: en el planteamiento original de la ecuación e y ℓ eran parámetros fijos. Este método se aprovecha de considerarlos como variables.

[1] Cohen-Tannoudji, Quantum Mechanics, Vol. I, VII.C Eq. C-46.

Ej. 3: Perturbación radial **20 Puntos**

Considera un Hamiltoniano de la forma

$$H = H_0 + H',$$

donde

$$H_0 = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

es el hamiltoniano hidrogenoide y

$$H' = -\frac{\epsilon}{r^2}$$

es una perturbación pequeña. Muestra que esta perturbación quita la degenración "accidental" que ocurre respecto a ℓ para el potencial de Coulomb. Es decir, que los eigenvalores de los estados ligados $E_{n\ell}$ dependen ahora de n y de ℓ.

Ej. 4: Paridad de eigenestados **20 Puntos**

Considera un eigenestado hidrogenoide de la forma $\psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi) = R_{n\ell}(r)Y_\ell^m(\theta,\varphi)$. Sabemos que como el hamiltoniano conmuta con el operador de paridad que cambia $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$ entonces estas funciones deben tener paridad definida (son pares o impares). Muestra que la paridad de las funciones va como $(-1)^\ell$.