

Mecánica Cuántica

Semestre 2022-2

Prof: Asaf Paris Mandoki

Ayud: Leonardo Uthhoff Rodríguez

Ayud: Alondra Jazmín Tapia de la Rosa



Tarea 6

Entrega: 19/06/2022

Ejercicio 1: Distinguibilidad de partículas idénticas

En clase discutimos que, para partículas indistinguibles el vector de estado debe ser simétrico o anti-simétrico ante el intercambio de etiquetas de partículas. En este ejercicio mostrarás que aunque se trate de partículas del mismo tipo, si éstas se encuentran muy separadas la simetrización de la función de onda no es necesaria.

La parte espacial para un sistema de dos partículas idénticas puede escribirse como

$$\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_A(\vec{x}_1)\phi_B(\vec{x}_2) \pm \phi_A(\vec{x}_2)\phi_B(\vec{x}_1)],$$

donde el signo depende de si la parte espacial de la función de onda debe ser simétrica o anti-simétrica.

- Muestra que esta función es simétrica o anti-simétrica ante el intercambio de partículas $1 \leftrightarrow 2$ dependiendo del signo elegido.
- ¿Cuál es la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula 1 en \vec{x}_1 y a la partícula 2 en \vec{x}_2 ?
- Muestra que si $\phi_A(\vec{x})$ es una función que sólo es distinta de cero en una región A y $\phi_B(\vec{x})$ sólo es distinta de cero en B , donde A y B son conjuntos ajenos entonces

$$\int_C \int_C |\psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2)|^2 d^3x_1 d^3x_2 = \int_C \int_C |\phi_A(\vec{x}_1)|^2 |\phi_B(\vec{x}_2)|^2 d^3x_1 d^3x_2.$$

siempre que $A \subseteq C$ y $B \subseteq C$.

Esto significa que si describimos de electrones distantes, con traslape de función de onda despreciable, no es necesario antisimetrizar la función de onda. Esto es bastante útil pues al describir al átomo de hidrógeno no necesitamos tomar en cuenta el resto de los electrones del universo para encontrar un estado anti-simétrico.

Ejercicio 2: Oscilador anarmónico

Considera el hamiltoniano de oscilador armónico

$$H_0 = \frac{1}{2m}P^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$$

con eigenvalores $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ y eigenvectores $|\phi_n\rangle$. Este oscilador está sometido a una perturbación de la forma

$$W = \lambda\hbar\omega X^3.$$

- Escribe W en términos de a y a^\dagger y $N = a^\dagger a$.
- Encuentra cuáles elementos de matriz $\langle\phi_i|W|\phi_j\rangle$ de W son distintos de cero.
- Para el nivel n , calcula la corrección de la energía hasta segundo orden en λ debido a esta perturbación.
- Calcula la corrección a primer orden en λ para el eigenvector $|\phi_n\rangle$.

Ejercicio 3: Sistema de dos niveles

Considerar el hamiltoniano H_0 y la perturbación W dados por

$$H_0 = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\Delta \end{pmatrix}, \quad W = \hbar \begin{pmatrix} 0 & \Omega \\ \Omega & 0 \end{pmatrix}.$$

Responda las siguientes preguntas (puedes auxiliarte con la computadora):

- ¿Cuáles son los eigenvalores y eigenvectores de H_0 ?
- ¿Cuáles son los eigenvalores de $H_0 + W$ de acuerdo a la teoría de perturbaciones de primer y segundo orden?
- ¿Cuáles son los eigenvalores exactos de $H_0 + W$?
- Graficar **por computadora** los eigenvalores obtenidos en los incisos anteriores en función de Δ para distintos valores reales de Ω de tal forma que sea fácil comparar la solución exacta y la de teoría de perturbaciones (i.e. ponlas en la misma gráfica). ¿En qué región la solución por teoría de perturbaciones se aproxima bien a la solución exacta?

Ejercicio 4: Estado base de hidrógeno

Para calcular estado base de hidrógeno usando el método variacional considera funciones de onda $\phi_\alpha(\vec{r})$ esféricamente simétricas cuya dependencia radial está dada por

$$\begin{cases} \phi_\alpha(r) = C(1 - \frac{r}{\alpha}) & r \leq \alpha \\ \phi_\alpha(r) = 0 & r > \alpha \end{cases}$$

con C una constante de normalización y α un parámetro variacional.

- Calcula $\mathcal{E}(\alpha) = \frac{\langle\phi_\alpha|H|\phi_\alpha\rangle}{\langle\phi_\alpha|\phi_\alpha\rangle}$. Escribe el valor esperado de la energía cinética en términos de $\nabla\phi_\alpha$ para evitar las funciones delta que aparecerían en $\nabla^2\phi_\alpha$ por discontinuidades en $\nabla\phi_\alpha$. (i.e. calcula $\nabla \cdot (f\nabla g)$ e integra sobre todo el espacio para encontrar que $\int f\nabla^2 g dV = -\int \nabla f \cdot \nabla g dV$).

- b) Encuentra el valor óptimo de α denotado por α_0 y compáralo con el radio de Bohr.
- c) Compara el valor obtenido para la aproximación de la energía del estado base con el valor obtenido con la solución analítica exacta.

Ejercicio 5: Oscilador armónico 2D

Considera una partícula con masa m limitada a moverse en el plano XY con hamiltoniano

$$H_0 = \frac{P_x^2}{2m} + \frac{P_y^2}{2m} + 12m\omega^2(X^2 + Y^2).$$

Queremos conocer el efecto que tiene sobre este sistema perturbaciones de la forma

$$\begin{aligned} W_1 &= \lambda_1 m\omega XY, \\ W_2 &= \lambda_2 \hbar\omega (L_z^2/\hbar^2 - 2) \end{aligned}$$

con λ_1 y λ_2 parámetros reales adimensionales.

- a) Tomando en cuenta que H_0 se puede escribir como $H_0 = H_{0x} \otimes \mathbf{1} + \mathbf{1} \otimes H_{0y}$, donde H_{0x} y H_{0y} son hamiltonianos de oscilador armónico en una dimensión, escribe sin calcular los eigenvalores de H_0 denotados por E_{n_x, n_y} y el grado de degeneración de cada uno.

En lo siguiente, considera únicamente el segundo estado excitado de H_0 , con energía $3\hbar\omega$ que es tres veces degenerado.

- b) Calcula la representación matricial de W_1 y W_2 en el subespacio de eigenvalores de H_0 con eigenvalor $3\hbar\omega$.
Sugerencia: Usa $L_z = XP_y - YP_x$ y escribe todo en términos de $a_x, a_x^\dagger, a_y, a_y^\dagger$.
- c) Calcula el efecto en la energía del segundo estado excitado a primer orden de la perturbación W_1 .
- d) Calcula el efecto en la energía del segundo estado excitado a primer orden de la perturbación W_2 .
- e) Considerando el resultado del inciso **c** como un nuevo eigenvalor sin perturbar, calcula el efecto de W_2 sobre las energías previamente obtenidas en caso de $\lambda_2 \ll \lambda_1 \ll 1$.
- f) Considerando el resultado del inciso **d** como un nuevo eigenvalor sin perturbar, calcula el efecto de W_1 sobre las energías previamente obtenidas en caso de $\lambda_1 \ll \lambda_2 \ll 1$.