CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

$$E_0 = \frac{\xi^2}{a^2 \frac{2m}{\hbar^2}} = \frac{\xi^2 V_0}{16} = \frac{(1.1)^2 V_0}{4} = \boxed{E_0 \sim 0,3 V_0}$$

$$\Delta E \sim \pm \frac{0,2\, e^{-6,8\beta}}{\beta} V_0$$

Luego para la solución par: ; para la solución impar:

$$\boxed{E_{par} = V_0\left[0,3 - \frac{0,2\, e^{-6,8\beta}}{\beta}\right]}$$

$$\boxed{E_{impar} = V_0\left[0,3 + \frac{0,2\, e^{-6,8\beta}}{\beta}\right]}$$

$\beta = b/a$.

La fuerza de atracción estará dada por la derivada respecto a b

$$\left(\frac{dE_{par}}{db}\right) = \frac{6,8 \times 0,2\, e^{-6,8\beta}}{\beta a} + \cancel{\frac{0,2}{a\beta^2} e^{-6,8\beta}} \sim \boxed{\frac{1,36\, e^{-6,8\beta}}{\beta a} = \frac{dE_{par}}{db}}$$

$$\boxed{\left(\frac{dE_{impar}}{db}\right) \sim -\frac{1,36\, e^{-6,8\beta}}{\beta a}}$$

Muito bom. ←

6

1) Si el núcleo es una esfera uniforme de radio $a = \frac{1}{2}\frac{e^2}{mc^2}A^{1/3}$, ¿cuál es la modificación de los niveles del H en primer orden para los estados 1s, 2p, 2s? e indicar, si se puede, una expresión general para los estados siguientes.

Para $r>a$, el potencial no queda alterado por el tamaño finito del núcleo:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad \text{para } r>a$$

Para $r<a$, el ~~potencial~~ campo eléctrico es el que corresponde a una esfera de densidad uniforme de radio r. La carga de esta esfera es $\frac{Zer^3}{a^3}$ y ~~el potencial~~ la energía potencial que ella determina para $r<a$ será $+\frac{Ze^2r^2}{2a^3} - \frac{3Ze^2}{2a}$

$$\text{Luego } V(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{r} & \text{para } r>a \\ -\left(\frac{Ze^2}{2a}+\frac{Ze^2r^2}{2a^3}\right) = -\frac{Ze^2}{r} + \underbrace{\frac{Ze^2}{r} + \frac{Ze^2r^2}{2a^3} - \frac{3Ze^2}{2a}}_{U} & \text{para } r<a \end{cases}$$

Como queremos estudiar la desviación con respecto al caso Coul. puro, podemos definir nuestro potencial perturbador U de la siguiente manera:

$$U(r) = \begin{cases} 0 & \text{para } r>a \\ Ze^2\left[\frac{1}{r} + \frac{r^2}{2a^3} - \frac{3}{2a}\right] \end{cases}$$

Luego, en primer orden, la variación de energía para el estado n,l será:

$$\Delta E = U_{nl;nl} = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^*_{nlm} U(r) \varphi_{nlm}\, d^3x = \int_0^a \left(R_{nl}(r)\right)^2 U(r)\, r^2 dr$$

debemos tomar R_{nl} normalizada según $\int_0^\infty (R_{nl})^2 r^2 dr = 1$

En tales condiciones:

$$R_{nl} = -\left\{\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3}\right\}^{1/2} e^{-\rho/2} \rho^l L^{2l+1}_{n+l}(\rho) \quad \text{donde } \boxed{\rho = \frac{2Zr}{na_0}}$$

$$\Delta E = U_{nl;nl} = Ze^2\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n((n+l)!)^3}\int_0^a e^{-\rho}\rho^{2l}\left(L^{2l+1}_{n+l}(\rho)\right)^2\left(r + \frac{r^4}{2a^3} - \frac{3r^2}{2a}\right)dr$$

$$= \boxed{\frac{Z^2e^2}{n^2a_0}\frac{(n-l-1)!}{((n+l)!)^3}\int_0^\alpha e^{-\rho}\rho^{2l+1}\left(L^{2l+1}_{n+l}(\rho)\right)^2\left(1 - \frac{3\rho}{2\alpha} + \frac{\rho^3}{2\alpha^3}\right)d\rho = \Delta E} \quad \boxed{\alpha = \frac{2Za}{na_0}}$$

Naturalmente, dado n y l esta integral puede calcularse exactamente por integraciones parciales. Sin embargo, podemos hacer algunas aproximaciones para obtener fácilmente una fórmula general. Para ello basta observar que α es muy pequeño pues $a = 1.4\times10^{-13}A^{1/3}$ cm y $a_0 = 0.53\times10^{-8}$ cm. Cuanto más liviano sea el núcleo más pequeño será α. Por lo tanto en el integrando podemos reemplazar $e^{-\rho}$ por 1 y $L^{2l+1}_{n+l}(\rho)$ por el término de orden cero de su desarrollo en potencias de ρ, es decir por $L^{2l+1}_{n+l}(0)$.

Calcularemos ahora cuánto vale $L_n^m(0)$

$$L_n^m(\rho)=\frac{d^m}{d\rho^m}L_n(\rho)=\frac{d^m}{d\rho^m}\left(\frac{d}{d\rho}-1\right)^n\rho^n=(-1)^n\frac{d^m}{d\rho^m}\left(1-\frac{d}{d\rho}\right)^n\rho^n$$

~~El operador~~

$$\left(1-\frac{d}{d\rho}\right)^n=1-\binom{n}{1}\frac{d}{d\rho}+\binom{n}{2}\frac{d^2}{d\rho^2}+\dots=\sum_{j=0}^{n}\binom{n}{j}\frac{d^j}{d\rho^j}(-1)^j$$

en que $\binom{n}{j}=\frac{n!}{(n-j)!\,j!}$ ~~número~~ es decir $\binom{n}{j}$ representa un "número combinatorio".

Luego $L_n^m(\rho)=\sum_{j=0}^{n-m}\frac{n!}{(n-j)!\,j!}(-1)^{j+n}\frac{d^{j+m}}{d\rho^{j+m}}\rho^n=$

$$\sum_{j=0}^{n-m}\frac{n!}{(n-j)!\,j!}(-1)^{j+n}\frac{n!}{(n-j-m)!}\rho^{(n-j-m)}$$; Si llamo $k=n-j-m$:

$$\boxed{L_n^m(\rho)=\sum_{k=0}^{n-m}\frac{(-1)^{k+m}(n!)^2\rho^k}{(k+m)!\,(n-k-m)!\,k!}}\quad\therefore$$

$$L_n^m(0)=\frac{(-1)^m(n!)^2}{m!\,(n-m)!}\quad\therefore\quad\boxed{L_{n+l}^{2l+1}(0)=\frac{(-1)^{2l+1}[(n+l)!]^2}{(2l+1)!\,(n-l-1)!}}$$

Llamando $E_n=-\frac{Z^2e^2}{2a_0n^2}$ ~~energía del núcleo considerado co~~ (energía del caso Coul. puro):

$$\Delta E=-2E_n\frac{(n+l)!}{[(2l+1)!]^2(n-l-1)!}\int_0^{\alpha}\rho^{2l+1}\left(1-\frac{3\rho}{2\alpha}+\frac{\rho^3}{2\alpha^3}\right)d\rho$$

$$-2E_n\frac{(n+l)!}{((2l+1)!)^2(n-l-1)!}\frac{3\alpha^{2l+2}}{(2l+2)(2l+3)(2l+5)}=-\frac{6}{(2l+5)}\frac{E_n(n+l)!\,\alpha^{2(l+1)}}{(n-l-1)!\,(2l+1)!\,(2l+3)!}$$

$$\boxed{(\Delta E)_{nl}=-\frac{6}{(2l+5)}\frac{E_n(n+l)!}{(n-l-1)!\,(2l+1)!\,(2l+3)!}\left(\frac{2Z}{n}\frac{a}{a_0}\right)^{2(l+1)}}$$

Caso 1s para H ($n=1$, $l=0$, $Z=1$)

$$(\Delta E)_{10}=-\frac{4}{5}\left(\frac{a}{a_0}\right)^2E_1\ \therefore\ \frac{(\Delta E)_{10}}{E_1}=-\frac{4}{5}\left(\frac{1.4\times10^{-13}}{0.53\times10^{-8}}\right)^2\sim-5.6\times10^{-10}\ ✓$$

$\boxed{\frac{(\Delta E)_{10}}{E_1}\sim-5.6\times10^{-10}}$; $E_1=-\text{Rydberg}=-13.6$ evolts $\therefore$ $\boxed{(\Delta E)_{10}\sim 7.61\times10^{-9}\text{ evolts}}$

Para el estado 2s ($n=2$; $l=0$):

$\frac{(\Delta E)_{20}}{E_2}=-\frac{2}{5}\left(\frac{a}{a_0}\right)^2\sim\boxed{-2.8\times10^{-10}=\frac{(\Delta E)_{20}}{E_2}}$ $E_2=-\frac{\text{Ryd.}}{4}=-3.4$ evolts $\therefore$

$\boxed{(\Delta E)_{20}\sim 9.52\times10^{-10}\text{ evolts}}$ ✓

Para el estado 2p ($n=2$; $l=1$):

$$\frac{(\Delta E)_{21}}{E_2} = -\frac{1}{140}\left(\frac{a}{a_0}\right)^4 \sim \boxed{-3.5 \times 10^{-21} = \frac{(\Delta E)_{21}}{E_2}}$$

$$\boxed{(\Delta E)_{21} \sim 11.9 \times 10^{-21} \text{ evolts}}$$

En general, observamos que la influencia del ~~núcleo~~ radio finito del núcleo es ~~despre~~ pequeñísima siendo mayor en el estado fundamental 1s. Esta influencia disminuye un poco al pasar al estado 2s y disminuye notablemente al considerar el estado 2p. Esto está de acuerdo con nuestras ideas generales pues sabemos que cuando $r \to 0$ la función de onda se comporta como r^l y por tanto podíamos predecir que la influencia del radio finito del núcleo debía ser necesariamente mayor para ~~los~~ los estados s que para los siguientes. Esto se debe a que cuando aumenta el momento angular, el electrón no puede acercarse mucho al origen (es decir, hay poca probabilidad de que se acerque). ✓

Podemos considerar todos los estados s ($l=0$): ✓

$$\boxed{\frac{(\Delta E)_{n0}}{E_n} = -\frac{4}{5}\,\frac{Z^2}{n}\left(\frac{a}{a_0}\right)^2} \checkmark$$

fórmula que muestra que para $l=0$, la influencia relativa del radio finito del núcleo sobre los niveles de energía decrece como $\frac{1}{n}$ al aumentar n. La modificación absoluta de los niveles variará como $\frac{1}{n^3}$. Las influencias del radio finito del núcleo aumentan, si consideramos núcleos pesados, como $Z^{2(l+1)}$.

Observación: Hemos usado una teoría de perturbaciones para niveles no degenerados, en ciertos estados degenerados del átomo de H. A primera vista esto parecería incorrecto pues de acuerdo con aquella teoría teníamos en la primera aproximación: $a_n(E_0-E_n) = U_{0n}$; por tanto si $E_0 = E_n$ (estados degenerados) debe ser $U_{0n} = 0$. Si esta condición no se cumple falla el método usado. Pero en nuestro caso esta condición se cumple, es decir: $U_{0n}=0$. Más aún, es ~~…~~ claro que siempre que $V(r)$ y $U(r)$ sean esféricos simétricos $U_{0n}=0$. En el problema 3 trataremos el efecto Stark y veremos que allí no podemos usar la teoría para niveles no degenerados pues en ese caso el potencial $U(r)$ no será radial. ✓

Otimo!

---

2) Oscilador armónico $\frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2 (1+\epsilon x)$

Hallar los niveles de energía hasta segundo orden.

El potencial perturbador es $\frac{1}{2} m\omega_0^2 \epsilon x^3 = U$

Las autofunciones del oscilador armónico son:

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2} 2^n n!}\right)^{1/2} H_n(\alpha x)\, e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \quad \text{donde } \alpha = \left(\frac{mK}{\hbar^2}\right)^{1/4};\ K = m\omega_0^2$$

y $H_n(\alpha x)$ son los polinomios de Hermite; $E_n = \hbar\omega_0 (n+\frac{1}{2})$

Es sabido que los polinomios de Hermite tienen la paridad de n.

Luego $U_{nn} = \int_{-\infty}^{+\infty} (\varphi_n(x))^2 U(x)\,dx = 0$ ya que el integrando es impar.

Es decir, en primer orden no hay modificación de los niveles de energía. Hasta segundo orden tendremos:

$$E = E_n + \sum_{m\neq n} \frac{U_{nm}U_{mn}}{E_n-E_m} = E_n + \sum_{m\neq n}\frac{(U_{nm})^2}{(E_n-E_m)};$$

Llamando $\xi = \alpha x$:

$$U_{nm} = \frac{1}{2} \frac{m\omega_0^2 \epsilon}{\alpha^3 \pi^{3/2}}\left(\frac{1}{2^{n+m} n!\, m!}\right)^{1/2} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi)\,\xi^3 H_m(\xi)\, e^{-\xi^2} d\xi}_{I_{nm}}$$

~~Para evaluar~~ $I_{nm} = \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi)\,\xi^3 H_m(\xi)\, e^{-\xi^2} d\xi$ ~~evaluaremos la integral~~

$$A_{nm} = \int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi)\,\xi\, H_m(\xi)\, e^{-a^2\xi^2} d\xi$$ ~~en que a es una constante. Evidentemente~~ $\boxed{I_{nm} = \left(\frac{dA_{nm}}{da^2}\right)_{a^2=1}}$

Para valuar I_{nm} conviene hacer uso de la función ~~generador~~ generatriz de los polinomios de Hermite:

$$e^{-s^2+2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)\, s^n}{n!}.$$ Evaluemos la integral

$$B = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-s^2+2s\xi}\, e^{-t^2+2t\xi}\,\xi\, e^{-a^2\xi^2} d\xi = \sum_{n,m=0}^{\infty} \frac{s^n t^m}{n!\, m!}\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi)\,\xi\, H_m(\xi)\, e^{-a^2\xi^2} d\xi$$

en que a es una constante

$$B = e^{-s^2-t^2+\left(\frac{s+t}{a}\right)^2}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\left(a\xi-\frac{(s+t)}{a}\right)^2}\xi\, d\xi;$$ haciendo $u = a\xi - \left(\frac{s+t}{a}\right)$, y suponiendo que a es positiva para no intercambiar los límites de integración:

$$B = \frac{e^{-s^2-t^2+\left(\frac{s+t}{a}\right)^2}}{a^2}\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2}\left(u+\frac{s+t}{a}\right)du$$ (la primera integral se anula pues el integrando es impar)

$$\boxed{B = \frac{e^{-s^2-t^2+\left(\frac{s+t}{a}\right)^2}(s+t)\,\pi^{1/2}}{a^3}}$$ Ahora bien, es evidente que:

$$\boxed{-\left(\frac{dB}{da^2}\right)_{a=1} = \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty} \frac{s^n t^m}{n!\, m!}\, I_{nm}}$$

$$-\left(\frac{dB}{da^2}\right)_{a=1} = \pi^{1/2} e^{2st}(s+t)\left[(s+t)^2+\frac{3}{2}\right] =$$

$$= \pi^{1/2}\sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n s^n t^n}{n!}\left(s^3+t^3+3s^2t+3st^2+\frac{3(s+t)}{2}\right) = \pi^{1/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2^n}{n!}\Big[s^{n+3}t^n + s^n t^{n+3} + 3s^{n+2}t^{n+1} + 3s^{n+1}t^{n+2} + \frac{3}{2} s^{n+1}t^n + \frac{3}{2} s^n t^{n+1}\Big]$$

Luego:

$$\boxed{\pi^{1/2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{2^n}{n!}\left[s^{n+3}t^n+s^nt^{n+3}+3s^{n+2}t^{n+1}+3s^{n+1}t^{n+2}+\frac{3}{2}s^{n+1}t^n+\frac{3}{2}s^nt^{n+1}\right]= \sum_{n=0}^{\infty}\sum_{m=0}^{\infty}\frac{s^nt^m}{n!\,m!}I_{nm}}$$

Tomemos $m=n+1$ e igualemos los coeficientes de s^nt^{n+1} en ambos miembros.

$$\frac{s^nt^{n+1}}{n!\,(n+1)!}I_{n,n+1}=s^nt^{n+1}\left(\frac{3\cdot 2^{n-1}}{(n-1)!}+\frac{3}{2}\frac{2^n}{n!}\right)\therefore \boxed{I_{n,n+1}=3\cdot 2^{n-1}(n+1)!\,(n+1)\pi^{1/2}} = I_{n+1,n}$$

Igualmente $\boxed{I_{n,n+3}=2^n(n+3)!\,\pi^{1/2}=I_{n+3,n}}$

En todos los demás casos $I_{n,m}=0$

$$\boxed{\begin{aligned}&I_{n,n+1}=I_{n+1,n}=3\cdot 2^{n-1}(n+1)(n+1)!\,\pi^{1/2}\\&I_{n,n+3}=I_{n+3,n}=2^n(n+3)!\,\pi^{1/2}\\&\text{En los otros casos } I_{n,m}=0\end{aligned}}$$

Escribamos: $U_{n,m}=C_{n,m}\,I_{n,m}$ donde

$$C_{nm}=\frac{1}{2}\frac{m\omega_0^2\epsilon}{\alpha^3\pi^{1/2}}\left(\frac{1}{2^{n+m}\,n!\,m!}\right)^{1/2}$$

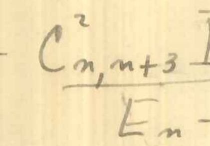
$$\sum_{m\neq n}\frac{(U_{nm})^2}{(E_n-E_m)}=\frac{C_{n,n-3}^2\,I_{n,n-3}^2}{E_n-E_{n-3}}+\frac{C_{n,n-1}^2\,I_{n,n-1}^2}{E_n-E_{n-1}}+\frac{C_{n,n+1}^2\,I_{n,n+1}^2}{E_n-E_{n+1}}$$

$$+\frac{C_{n,n+3}^2\,I_{n,n+3}^2}{E_n-E_{n+3}}=\frac{1}{32}\frac{m^2\omega_0^4\epsilon^2}{\alpha^6\hbar\omega_0}\left[\frac{1}{3}\left(\frac{n!}{(n-3)!}-\frac{(n+3)!}{n!}\right)+9\left(n^3-(n+1)^3\right)\right]$$

$$\alpha^6=\left(\frac{mK}{\hbar^2}\right)^{3/2}=\left(\frac{m^2\omega_0^2}{\hbar^2}\right)^{3/2}=\left(\frac{m\omega_0}{\hbar}\right)^3$$

Luego $\boxed{(\Delta E)_n=-\frac{1}{32}\frac{\epsilon^2\hbar^2}{m}\left[9\left[(n+1)^3-n^3\right]+\frac{1}{3}\left(\frac{(n+3)!}{n!}-\frac{n!}{(n-3)!}\right)\right]}$

En primer lugar podemos observar que la corrección es negativa. El efecto, en segundo orden, del potencial perturbador torna a los niveles más ligados. Es como si el primitivo potencial se hubiera levantado. La corrección depende sólo de ϵ, n y m, es decir no depende de la constante elástica K y además no depende del signo de ϵ (esto último es intuitivo). La fórmula anterior es válida si $n\geq 3$; si $n<3$ hay que reemplazar $\frac{n!}{(n-3)!}$ por 0.



Como ejemplo, calculemos $(\Delta E)_0$, $(\Delta E)_1$ y $(\Delta E)_2$

$$\boxed{(\Delta E)_0 = -\frac{11}{32}\frac{\epsilon^2\hbar^2}{m}} \quad ; \quad \boxed{\frac{(\Delta E)_0}{E_0} = -\frac{11}{16}\frac{\epsilon^2\hbar}{m\omega_0}}$$

Observamos que las correcciones relativas dependen m y ω_0.

$$\boxed{(\Delta E)_1 = -\frac{71}{32}\frac{\epsilon^2\hbar^2}{m}} \quad ; \quad \boxed{\frac{(\Delta E)_1}{E_1} = -\frac{71}{48}\frac{\epsilon^2\hbar}{m\omega_0}}$$

$$\boxed{(\Delta E)_2 = -\frac{191}{32}\frac{\epsilon^2\hbar^2}{m}} \quad ; \quad \boxed{\frac{(\Delta E)_2}{E_2} = -\frac{191}{80}\frac{\epsilon^2\hbar}{m\omega_0}}$$

~~Nuestra fórmula para $(\Delta E)_n$~~

Observamos que $(\Delta E)_n$ crece al aumentar n; lo mismo ~~que~~ sucede $\frac{(\Delta E)_n}{E_n}$.

Nuestra fórmula final puede escribirse en la forma más simple:

$$\boxed{\begin{aligned} &(\Delta E)_n = -\frac{1}{32}\frac{\epsilon^2\hbar^2}{m}\left[30n^2+30n+11\right] \text{ para } n \geq 3 && (1)\\ &(\Delta E)_n = -\frac{1}{32}\frac{\epsilon^2\hbar^2}{m}\left[\frac{n^3}{3}+29n^2+\frac{92}{3}n+11\right] \text{ para } n < 3 && (2)\end{aligned}}$$

$$\boxed{E_{total} = \hbar\omega_0(n+\tfrac{1}{2}) + (\Delta E)_n}$$

Se nota que $(\Delta E)_n$ crece como n^2 y por tanto $\frac{(\Delta E)_n}{E_n}$ crecerá como n.

Para grandes valores de n:

$\frac{(\Delta E)_n}{E_n} \sim -\frac{\epsilon^2\hbar}{m\omega_0}n$; cuando $n \sim \frac{m\omega_0}{\epsilon^2\hbar}$, $\frac{(\Delta E)_n}{E_n} \sim 1$ es decir la ~~según~~ ~~aproximación~~ estimación hecha falla completamente.

En la primera expresión que obtuvimos para $(\Delta E)_n$ el ~~factor~~ término $9[(n+1)^3-n^3]$ proviene de los niveles $n-1$ y $n+1$ mientras que el término $\frac{1}{3}\left(\frac{(n+3)!}{n!}-\frac{n!}{(n-3)!}\right)$ proviene de los términos $n-3$ y $n+3$.

Se ve que la influencia de los dos estados cercanos es mayor que la de los dos más alejados, y dicha diferencia aumenta con n.

a expressão (1) basta para $n<3$ também!

Observa que para $n=0$, $n=1$ e $n=2$ as duas expressões (1) e (2) são iguais!

Sirlin IV

3) Determinar el efecto Stark para el H en $n=2$. (primer orden, caso degenerado).
Tenemos un campo eléctrico constante $|\mathbb{E}|$ dirigido según el eje z.
El Hamiltoniano perturbador es: $U = e|\mathbb{E}|z$.

x

Ante todo podemos observar que no puede haber efecto Stark de primer orden para estados no degenerados, pues las funciones de onda correspondientes a estos estados tienen paridad definida y el operador U es impar de modo que todos los U_{ii} para estados no degenerados serán 0.
El estado $n=2$ es cuatro veces degenerado. Las cuatro autofunciones son:

$$2s \Rightarrow \psi_1 = R_{20}\, Y_0^0$$

$$2p \Rightarrow \begin{cases} \psi_2 = R_{21}\, Y_1^0 \\ \psi_3 = R_{21}\, Y_1^1 \\ \psi_4 = R_{21}\, Y_1^{-1} \end{cases}$$

Debemos resolver la ecuación secular:

$$\boxed{\mathrm{Det}\,\left|\Delta E\,\delta_{ij} - U_{ij}\right| = 0}$$

$$U_{ij} = \int \psi_i^* U \psi_j \, d^3x$$

Ante todo, observemos que todos los U_{ii} son nulos pues todas las autofunciones del átomo de H tienen paridad definida (la paridad de l) y por lo tanto $|\psi_i|^2$ es siempre par, de modo que $|\psi_i|^2 U$ es impar.
Por el mismo motivo, $U_{23} = U_{24} = U_{34} = U_{32} = U_{42} = U_{43} = 0$ pues ψ_2, ψ_3 y ψ_4 tienen la misma paridad (son todas impares) pues corresponden a un mismo momento angular $l=1$. Por lo tanto todos los dobles productos entre ψ_2, ψ_3 y ψ_4 son pares y al multiplicar por U tendremos integrandos impares.
También podemos ver que $U_{13} = U_{31} = U_{14} = U_{41} = 0$ por el siguiente motivo: si pasamos a coordenadas polares, el operador U no dependerá del ángulo φ (pues será $e|\mathbb{E}|r\cos\vartheta$), de modo que nuestras integrales se anularán al integrar respecto a φ salvo que m sea igual para ambas autofunciones. Luego los únicos elementos no nulos serán:

$$U_{12} = U_{21} = 2\pi e|\mathbb{E}| \int_0^\infty R_{20} R_{21} r^3 dr \int_{-1}^{+1} Y_0^0 Y_1^0 \cos\vartheta \, d(\cos\vartheta) =$$

$$e|\mathbb{E}| \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^4 \int_0^\infty \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) r^4 e^{-\frac{Zr}{a_0}} dr \int_{-1}^{+1} \cos^2\vartheta \, d(\cos\vartheta) =$$

$$\frac{2}{3} e|\mathbb{E}| \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^4 \left[2\int_0^\infty r^4 e^{-\frac{Zr}{a_0}} dr - \frac{Z}{a_0}\int_0^\infty r^5 e^{-\frac{Zr}{a_0}} dr\right] = -2e|\mathbb{E}|\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^4 \int_0^\infty r^4 e^{-\frac{Zr}{a_0}} dr$$

Mediante sucesivas integraciones por partes:

$$\int_0^\infty r^4 e^{-\frac{Zr}{a_0}} dr = 4!\left(\frac{a_0}{Z}\right)^5 ; \quad \text{Finalmente:} \quad \boxed{U_{12} = U_{21} = -\frac{3e|\mathbb{E}|a_0}{Z}}$$

~~Para Z = 1:~~ $\cancel{U_{12} = U_{21} = -3e|\mathbb{E}|a_0}$

Nuestra ~~determinante~~ ecuación secular queda:

$$\begin{vmatrix} \Delta E & \frac{3e|\mathbb{E}|a_0}{2} & 0 & 0 \\ \frac{3e|\mathbb{E}|a_0}{2} & \Delta E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta E \end{vmatrix} = 0$$

Las soluciones de esta ecuación son:

$$\begin{cases} \Delta E_1 = \frac{3e|\mathbb{E}|a_0}{2} \; ; \; \Delta E_2 = -\frac{3e|\mathbb{E}|a_0}{2} \\ \Delta E_3 = 0 \; ; \; \Delta E_4 = 0 \end{cases}$$

Para el átomo de H:

$$\begin{cases} \Delta E_1 = 3e|\mathbb{E}|a_0 \; ; \; \Delta E_2 = -3e|\mathbb{E}|a_0 \\ \Delta E_3 = 0 \; ; \; \Delta E_4 = 0 \end{cases}$$

Es decir: de los cuatro estados degenerados que teníamos al principio dos permanecen inalterados; un tercero aumenta su energía en $3e|\mathbb{E}|a_0$; el cuarto la disminuye en $-3e|\mathbb{E}|a_0$.

Estudiemos las autofunciones: nuestro sistema de ecuaciones era:

$\sum_1 c_j(\Delta E\delta_{ij} - U_{ij}) = 0 \quad i = 1$ a 4. En nuestro caso:

$$\begin{cases} c_1\Delta E - c_2 U_{12} = 0 \\ -c_1 U_{12} + c_2\Delta E = 0 \\ c_3\Delta E = 0 \\ c_4\Delta E = 0 \end{cases}$$

Obtenemos:

$\Delta E_1 = 3e|\mathbb{E}|a_0 = -U_{12} \; : \; c_1 = -c_2$.

$\psi = c_1(\psi_1 - \psi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(R_{20}Y_0^0 - R_{21}Y_1^0)$; la decisión $c_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ se debe a la normalización.

Para $\Delta E_2 = -3e|\mathbb{E}|a_0 = U_{12} \; : \; c_1 = c_2 \; \therefore$

$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(R_{20}Y_0^0 + R_{21}Y_1^0)$

Para $\Delta E_3 = \Delta E_4 = 0$ ψ puede ser una combinación lineal de ψ_3 y ψ_4. En particular puede ser $\psi = \psi_3$; $\psi = \psi_4$.

Pregunta: ¿se podría decir que los estados ψ_3 y ψ_4 no se han modificado por efecto Stark pero sí se han modificado los estados ψ_1 y ψ_2?

Fato é na primeira ordem estados ψ_1, ψ_2 é, do modo de falar, modificado — mas os estados $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1+\psi_2)$, $\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1-\psi_2)$, ψ_3, ψ_4 cada um que esta uma eigenfunção sem perturbação, não estão modificados a primeira ordem. as funções não é modificado — so alguma combinações estão selecionados.

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

4) Atomo de He $(Z=2)$ para el primer estado excitado.

$$H = H_0 + V; \quad H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2}; \quad V = \frac{e^2}{r_{12}}$$

r_{12}: distancia entre los dos electrones.

V es la energía potencial debida a la repulsión de los dos electrones.

El Ham. H_0 corresponde al de dos átomos de Hidrógeno con $Z=2$.

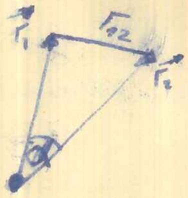
Las autofunciones correspondientes a H_0 en el primer nivel excitado son:

$$\psi_1 = \varphi_{100}(\vec{r}_1)\,\varphi_{200}(\vec{r}_2)$$
$$\psi_2 = \varphi_{100}(\vec{r}_2)\,\varphi_{200}(\vec{r}_1)$$
$$\psi_3 = \varphi_{100}(\vec{r}_1)\,\varphi_{210}(\vec{r}_2)$$
$$\psi_4 = \varphi_{100}(\vec{r}_2)\,\varphi_{210}(\vec{r}_1)$$
$$\psi_5 = \varphi_{100}(\vec{r}_1)\,\varphi_{211}(\vec{r}_2)$$
$$\psi_6 = \varphi_{100}(\vec{r}_2)\,\varphi_{211}(\vec{r}_1)$$
$$\psi_7 = \varphi_{100}(\vec{r}_1)\,\varphi_{2,1,-1}(\vec{r}_2)$$
$$\psi_8 = \varphi_{100}(\vec{r}_2)\,\varphi_{2,1,-1}(\vec{r}_1)$$

A la autofunción φ_{100} corresponden 4 Ryd. $(Z=2)$ y a las autofunciones φ_{2lm} corresponde 1 Ryd, de modo que el primer estado excitado del He, sin considerar la repulsión de los electrones, corresponde a una energía de 5 Ryd. (El estado fundamental del He: $\psi = \varphi_{100}(\vec{r}_1)\varphi_{100}(\vec{r}_2)$ corresponde a 8 Ryd.).

Para tener en cuenta la perturbación V debemos considerar:

$$\boxed{\mathrm{Det}\,|\Delta E\,\delta_{ij} - V_{ij}| = 0} \qquad V_{ij} = \iint \psi_i^* V \psi_j \, d^3\vec{r}_1\, d^3\vec{r}_2$$



$r_{12} = +\sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2\cos\alpha}$; observamos que r_{12} es una función par de r_1 y r_2: es decir si invertimos las coordenadas de los dos electrones, su distancia no variará.

Ante todo veamos cuáles integrales son nulas.

Por ejemplo: $V_{13} = V_{31} = 0$ pues $\varphi_{100}(\vec{r}_1)\varphi_{100}(\vec{r}_1)$ es una función par de r_1 (pues tienen el mismo momento angular y por tanto la misma paridad) mientras que $\varphi_{200}(\vec{r}_2)\varphi_{210}(\vec{r}_2)$ es una función impar de r_2 pues $\varphi_{200}(\vec{r}_2)$ es par mientras que $\varphi_{210}(\vec{r}_2)$ es impar (pues las autofunciones del H tienen la paridad de l). Por lo tanto $\varphi_{100}^*(\vec{r}_1)\varphi_{100}^*(\vec{r}_1)\varphi_{200}(\vec{r}_2)\varphi_{210}(\vec{r}_2)$ considerada como función de r_1 y r_2 es impar. Como r_{12} es par, el integrando queda impar y se anula. Luego $V_{13} = V_{31} = 0$. Por la misma razón $V_{14} = V_{41} = 0$. También: $V_{15} = V_{51} = V_{16} = V_{61} = V_{17} = V_{71} = V_{18} = V_{81} = V_{23} = V_{32} = V_{24} = V_{42} = V_{25} = V_{52} = V_{26} = V_{62} = V_{27} = V_{72} = V_{28} = V_{82} = 0$ por el mismo motivo.

Otro criterio que podemos usar para ver cuáles integrales son nulas es el siguiente: serán nulas todas aquellas integrales en las que las autofunciones correspondientes a un determinado electrón, tengan diferentes valores de m (número cuántico magnético). Por ejemplo, será nula U_{35} pues allí figurará el producto $\varphi_{210}(\vec{r_2})\varphi_{211}(\vec{r_2})$ es decir dos autofunciones del electrón 2 que tienen diferentes valores de m.

Para demostrar este criterio introduzcamos la notación más simple:

$\psi_i = \varphi_i(\vec{r_1})\,\varphi_i(\vec{r_2})$ Por ejemplo, para $i=1$: $\varphi_1(\vec{r_1}) = \varphi_{100}(\vec{r_1})$ y
$\varphi_1(\vec{r_2}) = \varphi_{200}(\vec{r_2})$, etc..

$$U_{ij} = e^2\iint d^3r_1 d^3r_2 \,\frac{\varphi_i^*(\vec{r_1})\,\varphi_j(\vec{r_1})\,\varphi_i^*(\vec{r_2})\,\varphi_j(\vec{r_2})}{r_{12}}$$

; supongamos ahora que las autofunciones $\varphi_i^*(\vec{r_2})$ y $\varphi_j(\vec{r_2})$ correspondientes al electrón 2 tengan diferentes valores del número cuántico magnético (digamos m y m' respectivamente).

$$U_{ij} = e^2\int d^3r_1\, \varphi_i^*(\vec{r_1})\varphi_j(\vec{r_1}) \left[\int d^3r_2\, \frac{\varphi_i^*(\vec{r_2})\,\varphi_j(\vec{r_2})}{r_{12}}\right]$$

Podemos realizar primero la integral

$\int d^3r_2 \,\frac{\varphi_i^*(\vec{r_2})\,\varphi_j(\vec{r_2})}{r_{12}}$ introduciendo coordenadas polares de modo que $\vec{r_1}$ sea el eje polar. En ese caso r_{12} no dependerá del ángulo φ y habrá ~~una integr~~ un factor de la forma $\int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi}\,d\varphi = 0$ si $m \neq m'$ en que m es el número cuántico magnético correspondiente a $\varphi_i(\vec{r_2})$ y m' el correspondiente a $\varphi_j(\vec{r_2})$.

——— x ———

Con estos dos criterios vemos que las únicas integrales que quedan son:

U_{ii} (i de 1 a 8); U_{12}; U_{21}; U_{34}; U_{43}.

También se tienen las siguientes simplificaciones:

$U_{11} = U_{22}$; $U_{33} = U_{44}$; $U_{55} = U_{66}$; $U_{77} = U_{88}$ Para ver esto basta intercambiar r_1 por r_2 y r_2 por r_1 al efectuar las integrales.

$$\cancel{U_{11}=}\,U_{22} = e^2\int d^3r_1 \left|R_{10}\,Y_0^0\right|^2_{I} \int d^3r_2\, \frac{\left|R_{20}\,Y_0^0\right|^2_{II}}{r_{12}} =$$

α es el ángulo entre $\vec{r_1}$ y $\vec{r_2}$; es decir en la integración respecto a $\vec{r_2}$ hemos introducido a $\vec{r_1}$ como eje polar.

$$\cancel{e^2\int d^3r_1 \left|R_{10}\,Y_0^0\right|^2_{I}} \int_0^{2\pi} d\varphi \left|Y_0^0\right|^2 \int_0^{\infty}\int_{-1}^{+1} \frac{R_{20}^2\, r_2^2\, dr_2\, d(\cos\alpha)}{r_{12}} =$$

En lugar de $\cos\alpha$ introducimos como nueva variable

$r_{12}^2 = u^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1r_2\cos\alpha$ ∴ $2u\,du = -2r_1r_2\, d(\cos\alpha)$ ∴ $d(\cos\alpha) = \frac{-u\,du}{r_1r_2}$

$$U_{11} = e^2\int d^3r_1 \left|R_{10}\,Y_0^0\right|^2_{I}\, \frac{1}{2}\int_0^{\infty} dr_2 \int_{|r_1-r_2|}^{r_1+r_2} du\, \frac{R_{20}^2\, r_2}{r_1} = e^2\int d^3r_1 \left|R_{10}\,Y_0^0\right|^2_{I} \frac{1}{2r_1}\int_0^{\infty} R_{20}^2\, r_2\left(r_1+r_2-|r_1-r_2|\right) dr_2 =$$

Para valuar las integrales diagonales nos conviene valuar primero:

$$I_1(r_2) = \iiint_{-\infty}^{+\infty} \frac{|\varphi_{100}|^2}{r_{12}} d^3r_1 = \iiint \frac{(R_{10})^2 (Y_0^0)^2}{r_{12}} d^3r_1$$

$r_{12}^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos\alpha$; elijamos $\vec{r}_2$ como eje polar y sea α el ángulo entre $\vec{r}_1$ y $\vec{r}_2$.

$$I_1(r_2) = \frac{1}{2}\int_0^\infty (R_{10})^2 r_1^2 dr_1 \int_{-1}^{+1} \frac{d(\cos\alpha)}{r_{12}}$$

$$2r_{12}\,dr_{12} = -2r_1 r_2\, d(\cos\alpha) \therefore \quad d(\cos\alpha) = -\frac{r_{12}}{r_1 r_2} dr_{12}$$

$$I_1(r_2) = \frac{1}{2}\int_0^\infty dr_1 \frac{(R_{10})^2 r_1^2}{r_1 r_2} \int_{|r_1-r_2|}^{r_1+r_2} dr_{12} = \frac{1}{2}\int_0^\infty dr_1 \frac{(R_{10})^2 r_1^2}{r_1 r_2}\left(r_1+r_2-|r_1-r_2|\right) =$$

$$\boxed{\frac{1}{r_2}\int_0^{r_2} (R_{10})^2 r_1^2 dr_1 + \int_{r_2}^\infty (R_{10})^2 r_1 dr_1 = I_1(r_2)}$$

$$A_1 = \frac{1}{r_2}\int_0^{r_2} (R_{10})^2 r_1^2 dr_1 = \frac{4\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3}{r_2}\int_0^{r_2} e^{-\frac{2Zr_1}{a_0}} r_1^2 dr_1$$

Podemos usar la fórmula:

$$\int r_2^n e^{-\frac{\lambda r_2}{a_0}} dr_2 = -e^{-\frac{\lambda r_2}{a_0}} \sum_{\nu=0}^{n} \frac{n!}{(n-\nu)!} \frac{r_2^{n-\nu}}{\lambda^{\nu+1}}$$ que se obtiene ~~[illegible]~~ por partes.

$$A_1 = \frac{1}{r_2}\left\{1 - e^{-\frac{2Zr_2}{a_0}}\left[2r_2^2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^2 + 2r_2\left(\frac{Z}{a_0}\right)+1\right]\right\}$$

$$B_1 = \int_{r_2}^\infty (R_{10})^2 r_1 dr_1 = 4\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \int_{r_2}^\infty e^{-\frac{2Zr_1}{a_0}} r_1 dr_1 = +\frac{e^{-\frac{2Zr_2}{a_0}}}{r_2}\left[2r_2^2\left(\frac{Z}{a_0}\right)^2 + r_2\left(\frac{Z}{a_0}\right)\right]$$

$$\boxed{I_1(r_2) = A_1 + B_1 = \frac{1}{r_2}\left\{1 - e^{-\frac{2Zr_2}{a_0}}\left(r_2\left(\frac{Z}{a_0}\right)+1\right)\right\}}$$

$$U_{11} = U_{22} = e^2\int |\varphi_{200}(\vec{r}_2)|^2 d^3r_2 \int \frac{|\varphi_{100}|^2}{r_{12}} d^3r_1 = e^2\int_0^\infty (R_{20})^2 I_1(r_2)\, r_2^2 dr_2 =$$

$$\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^3 \int_0^\infty \left(4r_2 - \frac{4Zr_2^2}{a_0} + \frac{Z^2 r_2^3}{a_0^2}\right) e^{-\frac{Zr_2}{a_0}}\left(1 - e^{-\frac{2Zr_2}{a_0}}\left[r_2\frac{Z}{a_0}+1\right]\right) dr_2 =$$

$$\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^3 \int_0^\infty \left[\left(4r_2 - \frac{4Z}{a_0}r_2^2 + \frac{Z^2 r_2^3}{a_0^2}\right) e^{-\frac{Zr_2}{a_0}} - e^{-\frac{3Zr_2}{a_0}}\left(\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 r_2^4 - 3\left(\frac{Z}{a_0}\right)^2 r_2^3 + 4r_2\right)\right] dr_2$$

Podemos usar: $\int_0^\infty r_2^n e^{-\lambda r_2} dr_2 = \frac{n!}{\lambda^{n+1}}$

$$\boxed{U_{11} = U_{22} = \frac{17}{81} e^2 \frac{Z}{a_0}}$$

$$U_{33} = U_{44} = e^2 \int |\varphi_{210}(\vec r_2)|^2 d^3 r_2 \int \frac{|\varphi_{100}(\vec r_1)|^2}{r_{12}} d^3 r_1 =$$

$$e^2 \int_0^\infty (R_{21})^2_{(r_2)} \, I_1(r_2)\, r_2^2 \, dr_2 = \frac{e^2}{3\times 8}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^5 \int_0^\infty \left[e^{-\frac{Zr_2}{a_0}} r_2^3 - e^{-\frac{3Zr_2}{a_0}}\left(r_2^4 \left(\frac{Z}{a_0}\right) + r_2^3\right)\right] dr_2$$

$$= \frac{e^2}{24}\frac{Z}{a_0}\left\{6 - \frac{8}{81} - \frac{2}{27}\right\} = \frac{59}{243}\frac{e^2 Z}{a_0} = U_{33} = U_{44}$$

Si esta manera de calcular es correcta(?), es inmediato que:

$$\boxed{U_{33} = U_{44} = U_{55} = U_{66} = U_{77} = U_{88} = \frac{59}{243}\frac{e^2 Z}{a_0}}$$

— x —

$$U_{12} = U_{21} = e^2 \int_0^\infty R_{10}(r_2) R_{20}(r_2)\, r_2^2\, dr_2 \int_0^\infty \frac{R_{10}(r_1) R_{20}(r_1)\, r_1^2}{r_{12}} dr_1$$

Valuemos $I_2(r_2) = \int_0^\infty \frac{R_{10}(r_1) R_{20}(r_1)\, r_1^2\, dr_1}{r_{12}}$ Siguiendo el mismo método que antes:

$$I_2(r_2) = \frac{1}{r_2}\int_0^{r_2} R_{10}(r_1) R_{20}(r_1)\, r_1^2\, dr_1 + \int_{r_2}^\infty R_{10}(r_1) R_{20}(r_1)\, r_1\, dr_1$$

$$A_2 = \frac{1}{r_2}\int_0^{r_2} R_{20}(r_1) R_{20}(r_1)\, r_1^2\, dr_1 = \frac{\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3}{\sqrt{2}\, r_2}\int_0^{r_2}\left(2r_1^2 - \frac{Z}{a_0} r_1^3\right) e^{-\frac{3}{2}\frac{Z r_1}{a_0}} \cdot dr_1$$

$$= \boxed{\frac{e^{-\frac{3}{2}\frac{Z r_2}{a_0}} \sqrt{2}\, r_2^3}{3 r_2}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 = A_2}$$

$$B_2 = \int_{r_2}^\infty R_{10}(r_1) R_{20}(r_1)\, r_1\, dr_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \int_{r_2}^\infty \left(2r_1 - \frac{Z}{a_0} r_1^2\right) e^{-\frac{3}{2}\frac{Z}{a_0} r_1} dr_1$$

$$B_2 = -\frac{8}{\sqrt{2}} \frac{e^{-\frac{3Zr_2}{2a_0}}}{r_2}\left[\frac{2}{3} r_2^3 \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^3 - \frac{2}{9} r_2^2 \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^2 - \frac{2}{27}\left(\frac{Z}{2a_0}\right) r_2\right]$$

$$\boxed{I_2(r_2) = A_2 + B_2 = \frac{8}{9}\sqrt{2}\, e^{-\frac{3Zr_2}{2a_0}}\left(\frac{Z}{2a_0}\right)\left[r_2\left(\frac{Z}{2a_0}\right) + \frac{1}{3}\right]}$$

$$U_{12} = U_{21} = e^2 \int_0^\infty R_{10}(r_2) R_{20}(r_2)\, I_2(r_2)\, r_2^2\, dr_2 =$$

$$\frac{8}{9} e^2 \left(\frac{Z}{a_0}\right)^4 \int_0^\infty \left[-\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^2 r_2^4 + \left(\frac{Z}{2a_0}\right) r_2^3 + \frac{r_2^2}{3} - \frac{1}{3}\left(\frac{Z}{2a_0}\right) r_2^3\right] e^{-\frac{3Z}{a_0} r_2} dr_2$$

$$= \boxed{\frac{16}{729}\frac{e^2 Z}{a_0} = U_{12} = U_{21}}$$

Sirlin VII

Nuestro determinante quedaría:

$$\begin{vmatrix} \Delta E - U_{11} & U_{12} & & & & & & \\ U_{12} & \Delta E - U_{11} & & & & & & \\ & & \Delta E - U_{33} & & & & & \\ & & & \Delta E - U_{33} & & & & \\ & & & & \Delta E - U_{55} & & & \\ & & & & & \Delta E - U_{55} & & \\ & & & & & & \Delta E - U_{77} & \\ & & & & & & & \Delta E - U_{77} \end{vmatrix} = 0$$

Não

Como $U_{33} = U_{55} = U_{77}$ tendríamos 6 raíces: $\Delta E = U_{33} = \frac{59}{243}\frac{e^2 Z}{a_0}$ →

Las otras dos serían:

$$(\Delta E - U_{11})^2 = U_{12}^2 \therefore \Delta E = U_{11} \pm U_{12} = \left(\frac{17}{81} \pm \frac{16}{729}\right)\frac{e^2 Z}{a_0}$$

Crítica: Casi seguramente el segundo criterio usado para anular integrales no es cierto pues en la primera integración se ha elegido como eje polar un eje que es móvil respecto de la segunda y en cambio debemos expresar todas las funciones de onda respecto a un mismo eje.
Por el mismo motivo, es posible que los elementos aquí calculados son sólo correctos cuando todas las autofunciones son esféricas ~~armónicas~~ simétricas. Es decir posiblemente estén bien calculados $U_{11} = U_{22}$ y $U_{12} = U_{21}$. Posiblemente los demás elementos estén mal calculados y haya algunas integrales más que no sean nulas. Parecería que el determinante correcto ~~sea~~ fuera de la forma:

$$\begin{vmatrix} \Delta E - U_{11} & U_{12} & & & & & & \\ U_{12} & \Delta E - U_{11} & & & & & & \\ & & \Delta E - U_{33} & U_{34} & & & & \\ & & U_{34} & \Delta E - U_{33} & & & & \\ & & & & \Delta E - U_{55} & U_{56} & & \\ & & & & U_{56} & \Delta E - U_{55} & & \\ & & & & & & \Delta E - U_{77} & U_{78} \\ & & & & & & U_{78} & \Delta E - U_{77} \end{vmatrix} = 0$$

acho é certo.

1st States of He

15,2p SYM
15,2p ANTI-SYM
3 times degenerate
$U_{33} \pm U_{12}$
15,2s SYM
15,2s ANTI-SYM
$U_{11} \pm U_{12}$
$(1s)^2$ ~~Ground~~
Ground state
$(1s)^2$

Tem $\Delta E = U_{11} \pm U_{12}$

~~Haas~~ $U_{34} = U_{56} = U_{78}$ ∴ ~~Haas~~ e $\Delta E = U_{33} \pm U_{34}$ tres veces degenerada.

en que los U_{33}, U_{55}, U_{77} serán en general diferentes de modo que los 8 estados degenerados se separarían por la interacción electrónica.

Sin embargo, no he podido aún demostrar nada de esto. Creo que la mayor parte de las integrales que hay que calcular pueden resolverse como un problema ~~de~~ de determinación de la energía potencial entre dos distribuciones ~~de~~ de carga de simetría cilíndrica. ¿Hay algún método más fácil? Não

Daniel Amati

2) Hallar los niveles energéticos del oscilador cuyo pot

$V(x) = \frac{1}{2} m\omega_0^2 x^2(1+\varepsilon x)$ por el método de perturbac

Si u_n y $E_n^{(0)}$ son las autofunciones y autovalores del oscilador armón

$$u_n(x) = N_n H_n(\alpha x)\, e^{-\frac{1}{2}\alpha^2 x^2} \qquad \alpha^4 = \frac{m^2\omega_0^2}{\hbar^2}$$

$$N_n = \left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2} 2^n n!}\right)^{1/2} \qquad E_n^{(0)} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0$$

$$e^{-s^2+2s\xi} = \sum_0^\infty \frac{H_n(\xi)}{n!} s^n$$

El potencial de perturbación es $V = \frac{1}{2} m\omega_0^2 \varepsilon x^3$

Hallaremos los V_{nm}

$$V_{nm} = \frac{1}{2} m\omega_0^2\varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} u_n(x)\, x^3\, u_m(x)\, dx = \frac{1}{2}\frac{m\omega_0^2 \varepsilon N_n^* N_m}{\alpha^4}\int_{-\infty}^{+\infty} \xi^3 H_n(\xi) H_m(\xi)\, e^{-\xi^2}$$

Llamaremos $V'_{nm} = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^3 H_n(\xi) H_m(\xi)\, e^{-\xi^2}\, d\xi$

Multiplicando dos funciones generadoras tendremos

$$e^{-s^2+2s\xi}\, e^{-t^2+2t\xi} = \sum_{n=0}^\infty\sum_{m=0}^\infty \frac{H_n(\xi) H_m(\xi)}{n!\, m!} s^n t^m$$

Multiplicando por $\xi^3 e^{-\xi^2}$ e integrando

$$\sum_{n=0}^\infty\sum_{m=0}^\infty \frac{s^n t^m}{n!\, m!} V'_{nm} = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(s^2+t^2)}\, e^{2(s+t)\xi}\, e^{-\xi^2}\xi^3\, d\xi = e^{2st}\int e^{-[\xi-(s+t)]^2}\xi^3\, d\xi =$$

$$= e^{2st}\int e^{-v^2}(v+(s+t))^3\, dv = e^{2st}\left[(s+t)^3\sqrt{\pi} + \frac{3}{2}(s+t)\sqrt{\pi}\right] = \sqrt{\pi}\, e^{2st}(s+t)\left[(s+t)^2+\frac{3}{2}\right]$$

$$\cancel{\boxed{= \sum_{n=0}^\infty\sum_{m=0}^\infty \frac{s^n t^m}{n!\, m!} V'_{nm}}}$$

Donde se ha hecho $v = \xi - (s+t)$ y se ha desarrollado $(v+(s+t))^3$ teniendo además $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-v^2}dv = \sqrt{\pi}$; $\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-v^2}v^2\, dv = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$

Por otro lado ~~pue~~ se tiene (ver Schiff, pág 65)

$$\sqrt{\pi}(s+t)\, e^{2st} = \sqrt{\pi}\sum_{n=0}^\infty \frac{2^n}{n!}\left(s^{n+1}t^n + s^n t^{n+1}\right) \therefore$$

$$\sqrt{\pi}\, e^{2st}(s+t)\left[\frac{3}{2} + s^2+t^2+2st\right] = \sqrt{\pi}\sum_{n=0}^\infty \frac{2^n}{n!}\left[\frac{3}{2} s^{n+1}t^n + \frac{3}{2} s^n t^{n+1} + s^{n+3}t^n + 3 s^{n+2}t^{n+1} + \right.$$

$$\left. s^{n+1}t^{n+2} + s^n t^{n+3}\right] = \sum_{n=0}^\infty\sum_{m=0}^\infty \frac{s^n t^m}{n!\, m!} V_{nm}$$

...ando los coeficientes de ~~...~~ $s^n t^m$

$$\left\{\begin{array}{l}
\cancel{\text{Si } m=n+1 \; ; \; (s^n t^{n+1}) \Rightarrow \frac{n!(n+1)!\, 2^n}{n!} \sqrt{\pi}\,[} \\
\text{Si } m = n+1 \; ; \; (s^n t^{n+1}) \Rightarrow n!(n+1)!\, \sqrt{\pi}\left[\frac{2^n}{n!}\frac{3}{2} + \frac{2^{n-1}}{(n-1)!}3\right] = \sqrt{\pi}\, 3.\, 2^{n-1}(n+1)(n+1)! \\
\text{Si } m+1 = n \; ; \; (s^{m+1} t^m) \Rightarrow (m+1)!\, m!\, \sqrt{\pi}\left[\frac{2^m}{m!}\frac{3}{2} + \frac{2^{m-1}}{m-1}3\right] \\
\text{Si } m = n+3 \; ; \; (s^n t^{n+3}) \Rightarrow \cancel{n!}(n+3)!\, \sqrt{\pi}\, \frac{2^n}{\cancel{n!}} \\
\text{Si } n = m+3 \quad (s^{m+3} t^m) \Rightarrow (m+3)!\, \cancel{m!}\, \sqrt{\pi}\, \frac{2^m}{\cancel{m!}} \\
0 \text{ en los demás casos}
\end{array}\right.$$

... resumidas cuentas

$$V = \left\| \begin{matrix}
0 & V_{12} & 0 & V_{14} & 0 & 0 & \cdots \\
V_{12} & 0 & V_{23} & 0 & V_{25} & 0 & \cdots \\
0 & V_{23} & 0 & V_{34} & 0 & \ddots & \cdots \\
V_{14} & 0 & V_{34} & 0 & V_{45} & 0 & \cdots \\
0 & V_{25} & 0 & V_{45} & 0 & \ddots & \cdots \\
0 & 0 & V_{36} & 0 & V_{56} & 0 & \cdots \\
0 & 0 & 0 & \ddots & 0 & \ddots & \cdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots &
\end{matrix} \right\|$$

...de
$$\left\{\begin{array}{l}
V_{n,n+1} = V_{n+1,n} = \sqrt{\pi}\, 3.\, 2^{n-1}(n+1)(n+1)! \\
V_{n,n+3} = V_{n+3,n} = \sqrt{\pi}\, 2^n.\, (n+3)! \\
V_{n,m} = 0 \text{ en caso contrario}
\end{array}\right.$$

Según la fórmula de perturbaciones del 1ero y segundo orden

$$E_n^{(2)} = E_n^{(0)} + U_{nn} + \sum_{n\neq m} \frac{U_{mn} U_{nm}}{E_n - E_m}$$

Por lo pronto $U_{nn} = 0$ cosa previsible ya que $H_n(x)$ tiene la paridad de n ∴ $H_n^2(x)$ es siempre par y con ello $\int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(\xi)\, \xi^3 e^{-\xi^2} d\xi = 0$.

$$\sum \frac{U_{mn}^2}{E_n - E_m} = \left(\frac{1}{2}\frac{m\omega_0^2 \varepsilon}{\alpha^4}\right)^2 \sum_{m\neq n} \frac{(N_n N_m V_{mn})^2}{E_n - E_m} = \left(\frac{1}{2}\frac{m\omega_0^2\varepsilon}{\alpha^4}\right)^2 \left[\frac{(N_n N_{n+1} V_{n,n+1})^2}{E_n - E_{n+1}} + \frac{(N_n N_{n-1} V_{n-1,n})^2}{E_n - E_{n-1}} + \right.$$

$$\left. \frac{(N_n N_{n+3}\; V_{n,n+3})^2}{E_n - E_{n+3}} + \frac{(N_n N_{n-3}\; V_{n-3,n})^2}{E_n - E_{n-3}}\right] = \left(\frac{1}{2}\frac{m\omega_0^2\varepsilon}{\alpha^4}\right)^2 \left[\frac{\alpha^2 \pi . 9 . 2^{2n-2}(n+1)^2((n+1)!)^2}{\pi 2^{2n+1} n!(n+1)!\; (E_n - E_{n+1})} + \right.$$

$$\left. \frac{\alpha^2 \pi . 9\, 2^{2n-4} n^2 (n!)^2}{\pi\, 2^{2n-1} n!(n-1)!(E_n - E_{n-1})} + \frac{\alpha^2 \pi 2^{2n}((n+3)!)^2}{\pi\, 2^{2n+3} n!(n+3)!(E_n - E_{n+3})} + \frac{\alpha^2 \pi 2^{2n-6}(n!)^2}{\pi\, 2^{2n-3} n!(n-3)!(E_n - E_{n-3})}\right] =$$

$$\left(\frac{m\omega_0^2\varepsilon}{\alpha^4}\right)^2 \frac{\alpha^2}{2^3}\left[\frac{9(n+1)^3}{\cancel{8}\hbar\omega_0} - \frac{9n^3}{\cancel{8}\hbar\omega_0} + \frac{(n+3)(n+2)(n+1)}{3\hbar\omega_0} - \frac{n(n-1)(n-2)}{3\hbar\omega_0}\right] =$$

$$\frac{1}{2}\frac{\hbar^2\varepsilon^2}{m^4 \ldots}\left[9(n+1)^3 - 9n^3 + \frac{(n+3)(n+2)(n+1)}{3} - \frac{n(n-1)(n-2)}{3}\right]$$

Amati

siendo $\left(\frac{a}{a_0}\right) = 2{,}66 \cdot 10^{5}$

Entonces haciendo $Z=1$

$$U_{11_s} = \frac{4e^2a^2}{10a_0^3} = R \cdot \frac{1}{5}\left(\frac{a}{a_0}\right)^2 = R \cdot 1{,}42 \cdot 10^{-10} \therefore \left(\frac{\Delta E_1}{E_1}\right)_s = 1{,}42 \cdot 10^{-10}$$

$$(U_{22})_s = R\,\frac{1}{10}\left(\frac{a}{a_0}\right)^2 = R \cdot 0{,}71 \cdot 10^{-10} = \frac{R}{4} \cdot 2{,}84 \cdot 10^{-10} \therefore \left(\frac{\Delta E_2}{E_2}\right)_s = 2{,}84 \cdot 10^{-10}$$

$$(U_{22})_p = \frac{R}{4} \cdot \frac{1}{140}\left(\frac{a}{a_0}\right)^4 = \frac{R}{4} \cdot 0{,}35_7 \cdot 10^{-20} \therefore \frac{(\Delta E_2)_p}{E_2} = 0{,}35_7 \cdot 10^{-20}$$

En general para calcular $(\Delta E_{nn})_l$ habrá que evaluar

$$(U_{nn})_l = -\left(\frac{2Z}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!\, e^2 Z}{2n\left[(n+l)!\right]^3} \int_0^a \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho)\left(r - \frac{3}{2a}r^2 + \frac{r^4}{2a^3}\right) dr$$

donde $\rho = \frac{2Zr}{na_0}$ siendo todas las integrales inmediatas

por ser L un polinomio en r.

Había dicho que se podía utilizar este método de perturbaciones que no considera estados degenerados.

Sin embargo la perturbación separa la degeneración en l (dejando la degeneración en m), lo que sucede es que no hay interacción de un estado degenerado en la variación de energía del otro. (o sea en el desarrollo de la $\psi(x)$ de cualquier estado podemos considerar inexistentes los estados degenerados con él)

3)

3) Efecto Stark para el átomo de H para el primer estado degenerado

$U = e\,\vec{E}.\vec{z}$ si elegimos $\vec{z}$ en la dirección de E

$U = eEz = eEr\cos\theta$

Hay 4 autof. degeneradas
1) $\psi_{2,0,0}$
2) $\psi_{2,1,-1}$
3) $\psi_{2,1,0}$
4) $\psi_{2,1,1}$

Los valores de ΔE estan dados por $|\Delta E\,\delta_{ij} - U_{ij}| = 0$

$$U_{ij} = \int R_n^l R_{n'}^{l'} r^3 dr . \iint Y^*_{lm} \cos\theta\, Y_{l'm'}\, d\cos\theta\, d\varphi$$

Por lo pronto vemos que para que $U_{ij} \neq 0$ $m = m'$ ∴

$$\iint Y^*_{lm} \cos\theta\, Y_{l'm'}\, d\cos\theta\, d\varphi = N_{lm} N_{l'm} \int_{-1}^{+1} P_l^m(\cos\theta) \cos\theta\, P_{l'}^m(\cos\theta)\, d\cos\theta$$

pero los $P_l^m(\cos\theta)$ tienen la paridad $l-|m|$ en $\cos\theta$ ∴

$P_l^m P_{l'}^m$ tendrá la paridad $l+l'$ luego para que la integral no se anule $l+l'$ debe ser impar ~~∴ en este caso tenemos $l=0$~~ $l'=1$

El único elemento de matriz U_{ij} que cumple esas condiciones es el U_{13} y el det. se ve reducido a

$$\begin{vmatrix} \Delta E & 0 & U_{13} & 0 \\ 0 & \Delta E & 0 & 0 \\ U_{13} & 0 & \Delta E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \Delta E \end{vmatrix} = (\Delta E)^4 - (\Delta E)^2 U_{13}^2 = 0 \quad ∴ \quad \Delta E \begin{cases} = 0 \\ = 0 \\ = U_{13} \\ = -U_{13} \end{cases}$$

Esto significa que el nivel ~~línea~~ se desdobla en 3, permaneciendo degenerado uno de ellos.

Reemplazando valores

$$U_{13} = eE\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^3 \frac{Z}{a_0\sqrt{3}} \int_0^\infty \left(2 - \frac{Zr}{a_0}\right) r^4 e^{-\frac{Zr}{a_0}} dr . \frac{\sqrt{3}}{2} \int_{-1}^{+1} w^2 dw$$

$$\int_{-1}^{+1} w^2 dw = \frac{2}{3}$$

$$\int_0^\infty r^n e^{-\beta r} = \frac{n!}{\beta^{n+1}} \quad ∴ \int_0^\infty 2 r^4 e^{-\frac{Zr}{a_0}} dr - \int_0^\infty \frac{Z r^5}{a_0} e^{-\frac{Zr}{a_0}} = 2.4!\left(\frac{a_0}{Z}\right)^5 - \frac{Z}{a_0} 5!\left(\frac{a_0}{Z}\right)^6 = -\left(\frac{a_0}{Z}\right)^5 4!\,3$$

$$U_{13} = -eE\left(\frac{Z}{2a_0}\right)^3 \frac{Z}{a_0\sqrt{3}} \left(\frac{a_0}{Z}\right)^5 4!\,3 . \frac{\sqrt{3}}{2} . \frac{2}{3} = \boxed{-\frac{e a_0}{Z} 3E = U_{13}} \quad ∴ \quad \Delta E \begin{cases} 0 \\ 0 \\ -3ea_0E \\ +3ea_0E \end{cases}$$

Siendo $\psi = \sum^4 c_i \psi_i$ los c_i se determinan por $\Delta E c_i = \sum^4 U_{i}$...

puede verse fácilmente que para

$\Delta E = 0$ $\quad c_1 = c_3 = 0$ $\quad c_2$ y c_4 arbitrarios ∴ $\psi = c_4$...

$\Delta E = U_{13} = -3ea_0E$ $\quad c_3 = c_1$ $\quad c_2 = c_4 = 0$

$\Delta E = -U_{13} = 3ea_0E$ $\quad c_3 = -c_1$ $\quad c_2 = c_4 = 0$

Daniel Amati

La última fórmula es válida si $n \geq 3$

Si $n < 3$ hay que eliminar el último sumando dentro del paréntesis (lo mismo para la siguiente fórmula de E_n)

En resumidas cuentas

$$\boxed{E_n^{(2)} = \left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0 - \frac{1}{32}\frac{\hbar^2\varepsilon^2}{m^2}\left[9(n+1)^3 - 9n^3 + \frac{(n+3)(n+2)(n+1)}{3} - \frac{n(n-1)(n-2)}{3}\right] = 30(n^2+n+11/30)}$$

En particular $E_0^{(2)} = \frac{1}{2}\hbar\omega_0 - \frac{11}{32}\frac{\hbar^2\varepsilon^2}{m^2}$ El término de perturbación depende ~~solamente~~ de la masa de la partícula solamente, y no de la frecuencia

Puede verse que el término de perturbación está afectado por un factor muy pequeño (de segundo orden en ε), pero para grandes valores de n el término de perturbación crece como n^2 mientras que el término no perturbado crece como n. De allí la influencia sobre los niveles energéticos de la perturbación es tanto mayor cuanto más elevada sea la energía del nivel no perturbado

$$\frac{E_n^{(2)} - E_n^{(0)}}{E_n^{(0)}} = -\frac{1}{32}\frac{\hbar\varepsilon^2}{m\omega_0}\left[\frac{9(n+1)^3 - 9n^3 + \frac{(n+3)(n+2)(n+1)}{3} - \frac{n(n-1)(n-2)}{3}}{n+\frac{1}{2}}\right]$$

para n grande $\frac{E_n^{(2)} - E_n^{(0)}}{E_n^{(0)}} \to -\frac{\hbar\varepsilon^2}{m\omega_0}\frac{7}{8}n \approx -\frac{E_n^{(0)}}{K}\frac{7}{16}\varepsilon^2$ donde $F = -Kx$ es la fuerza excitadora del oscilador armónico ($K = m\omega_0^2$)

para $n = 0$ $\frac{E_n^{(2)} - E_n^{(0)}}{E_n^{(0)}} = -\frac{\hbar\varepsilon^2}{m\omega_0}\frac{11}{16}$

Otra propiedad interesante puede ser obtenida para n grande.

Por el principio de correspondencia, en el límite clásico (n grande) $E_n^{(0)} \to \frac{a\,\omega_0^2 m}{2}$ (energía total de un oscilador armón. clásico de amplitud a) ∴

$$\frac{E_n^{(2)} - E_n^{(0)}}{E_n^{(0)}} \to -\frac{E_n^{(0)}}{\frac{m\omega_0^2}{2}}\frac{7}{16}\varepsilon^2 \to -\frac{7}{16}a\varepsilon^2$$

Esto significa que en el límite clásico el error relativo cometido al medir la energía del oscilador dado por $V(x) = \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2(1+\varepsilon x)$ como oscilador armónico es proporcional a la amplitud de este y no depende ni de la masa ni de la fuerza elástica del mismo

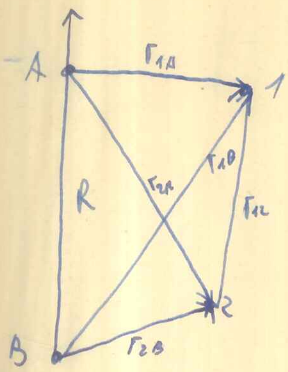
Posiblemente todos estos razonamientos para grandes valores de n carezcan de sentido por ser insuficiente el método de perturbaciones hasta el segundo orden.

4)

No terminado

Amati

Calcular la energía de la molécula neutra de H en el estado fundamental



Supondremos constante la distancia entre los dos núcleos

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{e^2}{r_{1A}} - \frac{e^2}{r_{2B}} - \frac{e^2}{r_{1B}} - \frac{e^2}{r_{2A}} + \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}}$$

Calcularé las energías a partir de

$$|E I_{ij} - H_{ij}| = 0$$

$$I_{ij} = \int \psi_i^* \psi_j \, dvol \neq \delta_{ij} \, ; \quad H_{ij} = \int \psi_i^* H \psi_j \, dvol$$

Usaré $\psi_1 = \varphi_{1s}(r_{A1})\,\varphi_{1s}(r_{B2})$; $\psi_2 = \varphi_{1s}(r_{A2})\,\varphi_{1s}(r_{B1})$

Obviamente $H_{11} = H_{22}$ $\quad H_{12} = H_{21}$

$$H_{11} = \int \psi_1^* \Big(\underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_1^2 - \frac{e^2}{r_{1A}} - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2^2 - \frac{e^2}{r_{2B}}} - \frac{e^2}{r_{1B}} - \frac{e^2}{r_{2A}} + \frac{e^2}{R} + \frac{e^2}{r_{12}} \Big) \varphi_{1s}(r_{1A})\,\varphi_{1s}(r_{2B})\, dvol$$

$$= \int |\psi_1|^2 \, 2E_0 \, dvol + e^2 \Big\{ \int \varphi_{1s}^2(r_{1A})\,\varphi_{1s}^2(r_{2B}) \Big(-\frac{1}{r_{1B}} - \frac{1}{r_{2A}} + \frac{1}{R} + \frac{1}{r_{12}} \Big) dvol = 2E_0 + e^2 \{ -I_1 - I_2 + I_3 + I_4 \}$$

$\hookrightarrow 2E_0$

En general $dvol = d^3 r_1 \, d^3 r_2 = r_{1A}^2 \, dr_{1A} \, d\cos\theta_1 \, d\varphi_1 \, r_{2B}^2 \, dr_{2B} \, d\cos\theta_2 \, d\varphi_2$

pero $r_{1A}^2 \, dr_{1A} \, d\cos\theta_1 = dr_{1A} \, dr_{1B} \, \frac{r_{1A} r_{1B}}{R}$ ya que $r_{1B}^2 = r_{1A}^2 + R^2 - 2 r_{1A} R \cos\theta$

la integral sobre r_{1B} va de $|r_{1A} - R|$ hasta $|r_{1A} + R|$

$$I_1 = -\int \frac{\varphi_{1s}^2(r_{1A})\,\varphi_{1s}^2(r_{2B})}{r_{1B}} dvol = \frac{2\pi}{R} \int_0^\infty \int_{|r_{1A}-R|}^{r_{1A}+R} \varphi_{1s}^2(r_{1A})\,\varphi_{1s}^2(r_{2B})\, r_{1A} \, dr_{1A} \, dr_{1B} \, r_{2B}^2 \, dr_{2B} \, d\cos\theta_2 \, d\varphi_2$$

Pero $\varphi_{1s}(r) = \left(\frac{1}{4\pi a_0^3}\right)^{1/2} 2 e^{-\frac{r}{a_0}}$ independiente de θ y φ

$$\int_0^\infty f(r_{1A}) \int_{|r_{1A}-R|}^{r_{1A}+R} dr_{1B} \, dr_{1A} = \int_0^\infty f(r_{1A}) \big((r_{1A} + R) - |r_{1A} - R| \big) dr_{1A} = 2\int_0^R f(r_{1A})\, r_{1A} \, dr_{1A} + 2R \int_R^\infty f(r_{1A}) \, dr_{1A}$$

$$\therefore I_1 = \frac{4\pi}{R} \left[\int_0^R \varphi_{1s}^2(r_{1A})\, r_{1A}^2 \, dr_{1A} + R \int_R^\infty \varphi_{1s}^2(r_{1A})\, r_{1A} \, dr_{1A} \right] \cdot \int_0^\infty \varphi_{1s}^2(r_{2B})\, r_{2B}^2 \, dr_{2B} \, d\cos\theta_2 \, d\varphi_2$$

La última integral es 1 por normalización de φ_{1s} $\therefore$

$$I_1 = \frac{4\pi}{R}\left(\int_0^R \varphi_{1s}^2(r)\, r^2 dr + R\int_R^\infty \varphi_{1s}^2(r)\, r\, dr\right) = \frac{4\pi}{R a_0^3}\left(\int_0^R e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 dr + R\int_R^\infty e^{-\frac{2r}{a_0}} r\, dr\right) =$$

$$= \frac{4}{R a_0^3}\left(\frac{a_0^3}{4}\left(1 - e^{-\frac{2R}{a_0}}\right) - \frac{R a_0}{2} e^{-\frac{2R}{a_0}}(R + a_0) + e^{-\frac{2R}{a_0}} R\left(\frac{R a_0}{2} + \frac{a_0^2}{4}\right)\right) = \frac{1}{R}\left(1 - \left(1 + \frac{R}{a_0}\right) e^{-\frac{2R}{a_0}}\right)$$

Por simetría $I_2 = \int \frac{\varphi_{1s}^2(r_{1A})\, \varphi_{1s}^2(r_{2B})}{r_{2A}}\, d\text{vol} = \int \frac{\varphi_{1s}^2(r_{1A})\, \varphi_{1s}^2(r_{2B})}{r_{1B}}\, d\text{vol} = I_1$

$$I_3 = \frac{1}{R}\int \varphi_{1s}^2(r_{1A})\, \varphi_{1s}^2(r_{2B})\, d\text{vol} = \frac{1}{R}$$

Para I_4 (hay que considerar que siendo $r_{12} = |\vec{r}_1 + R + \vec{r}_2|$) y $\vec{r}_1 \begin{cases} r_1 \cos\theta_1 \\ r_1 \operatorname{sen}\theta_1 \cos\varphi_1 \\ r_1 \operatorname{sen}\theta_1 \operatorname{sen}\varphi_1 \end{cases}$; $\vec{R} = \begin{cases} R \\ 0 \\ 0 \end{cases}$

$\vec{r}_2 \begin{cases} r_2 \cos\theta_2 \\ r_2 \operatorname{sen}\theta_2 \cos\varphi_2 \\ r_2 \operatorname{sen}\theta_2 \operatorname{sen}\varphi_2 \end{cases}$

$$r_{12} = \sqrt{(r_2\cos\theta_2 + R - r_1\cos\theta_1)^2 + (r_2 \operatorname{sen}\theta_2 \cos\varphi_2 - r_1 \operatorname{sen}\theta_1 \cos\varphi_1)^2 + (r_2 \operatorname{sen}\theta_2 \operatorname{sen}\varphi_2 - r_1 \operatorname{sen}\theta_1 \operatorname{sen}\varphi_1)^2}$$

$I_4 = ?$

4) *Achar as equações do movimento* Alberto Sirlin

$$L = -mc^2\sqrt{1-v^2/c^2} - e\varphi(x,y,z)$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot x}\right) = \frac{\partial L}{\partial x}\,; \quad v^2 = \dot x^2 + \dot y^2 + \dot z^2\,; \quad \frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot x}\right) = \frac{d}{dt}\left(\frac{2mc^2\,\dot x/c^2}{2\sqrt{1-v^2/c^2}}\right) = \frac{d}{dt}\left(\frac{m\dot x}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\right)$$

$$\frac{\partial L}{\partial x} = -e\frac{\partial \varphi}{\partial x}$$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{m\dot x}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\right) = -e\frac{\partial\varphi}{\partial x}\,;$$ Identicamente para as outras coordenadas ∴

$$\boxed{\frac{d}{dt}\left(\frac{m\vec v}{\sqrt{1-v^2/c^2}}\right) = -e\nabla\varphi}$$

---

6) *Calcular a ação ~~clasica~~ classica do oscilador armonico*

$$L = \frac{m}{2}\left(\dot x^2 - w^2x^2\right) \quad \text{com as condições} \quad \begin{cases} x(0) = x_1 \\ x(T) = x_2 \end{cases}$$

As equações do movimento são:

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot x}\right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \;\therefore\; m\ddot x + m\omega^2 x = 0 \;\therefore\; x = a\cos(\omega t+\delta)$$

$$(0) = a\cos\delta = x_1$$

$$(T) = a\cos(\omega T+\delta) = a\cos\omega T\cos\delta - a\,\mathrm{sen}\,\omega T\,\mathrm{sen}\,\delta = x_1\cos\omega T - a\,\mathrm{sen}\,\omega T\,\mathrm{sen}\,\delta = x_2 \;\therefore$$

$$\begin{cases} a\cos\delta = x_1 \\ a\,\mathrm{sen}\,\delta = \dfrac{(x_1\cos\omega T - x_2)}{\mathrm{sen}\,\omega T} \end{cases} \;\therefore\; \begin{cases} a^2 = \dfrac{(x_1\cos\omega T - x_2)^2}{\mathrm{sen}^2\omega T} + x_1^2 = \dfrac{x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2\cos\omega T}{\mathrm{sen}^2\omega T} \\ \mathrm{tg}\,\delta = \dfrac{(x_1\cos\omega T - x_2)}{x_1\,\mathrm{sen}\,\omega T} \end{cases}$$

$$S_{cl} = \int_0^T L\,dt = \frac{m}{2}\int_0^T\left[a^2w^2\,\mathrm{sen}^2(\omega t+\delta) - a^2\omega^2\cos^2(\omega t+\delta)\right]dt = -\frac{ma^2\omega^2}{2}\int_0^T\cos 2(\omega t+\delta)\,dt =$$

$$= -\frac{ma^2\omega}{4}\left[\mathrm{sen}\,2(\omega T+\delta) - \mathrm{sen}\,2\delta\right] = -\frac{ma^2\omega}{4}\left[\mathrm{sen}\,2\omega T\cos 2\delta + \mathrm{sen}\,2\delta\,(\cos 2\omega T - 1)\right];$$

$$\cos 2\delta = 2\cos^2\delta - 1 = \frac{2}{1+\mathrm{tg}^2\delta} - 1 = \frac{1-\mathrm{tg}^2\delta}{1+\mathrm{tg}^2\delta} = \frac{x_1^2\,\mathrm{sen}^2\omega T - (x_1\cos\omega T - x_2)^2}{x_1^2\,\mathrm{sen}^2\omega T + (x_1\cos\omega T - x_2)^2} = \frac{x_1^2\,\mathrm{sen}^2\omega T - (x_1\cos\omega T - x_2)^2}{x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2\cos\omega T}$$

$$\mathrm{sen}\,2\delta = 2\,\mathrm{sen}\,\delta\cos\delta = \frac{2\,\mathrm{tg}\,\delta}{1+\mathrm{tg}^2\delta} = \frac{2x_1\,\mathrm{sen}\,\omega T\,(x_1\cos\omega T - x_2)}{x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2\cos\omega T}$$

$$S_{cl} = -\frac{m\omega\,\cancel{(x_1^2+x_2^2-2x_1x_2\cos\omega T)}}{4\,\mathrm{sen}^2\omega T}\left[\frac{\{x_1^2\,\mathrm{sen}^2\omega T - (x_1\cos\omega T - x_2)^2\}}{\cancel{x_1^2+x_2^2-2x_1x_2\cos\omega T}}\,\mathrm{sen}\,2\omega T + \frac{2x_1\,\mathrm{sen}\,\omega T\,(x_1\cos\omega T - x_2)(\cos 2\omega T - 1)}{\cancel{x_1^2+x_2^2-2x_1x_2\cos\omega T}}\right]$$

$$= -\frac{m\omega}{4\,\mathrm{sen}^2\omega T}\Big[\left(-x_1^2\cos 2\omega T - x_2^2 + 2x_1x_2\cos\omega T\right)\mathrm{sen}\,2\omega T + 2x_1\,\mathrm{sen}\,\omega T\,(x_1\cos\omega T\cos 2\omega T - x_1\cos\omega T - x_2\cos 2\omega T + x_2)$$

$$= +\frac{m\omega}{2\,\mathrm{sen}\,\omega T}\Big[\left(\cancel{x_1^2\cos 2\omega T} + x_2^2 - 2x_1x_2\cos\omega T\right)\cos\omega T - \cancel{x_1^2\cos\omega T\cos 2\omega T} + x_1^2\cos\omega T + x_1x_2\cos 2\omega T - x_1x_2\Big]$$

$$\frac{m\omega}{2\,\mathrm{sen}\,\omega T}\left[(x_1^2+x_2^2)\cos\omega T - x_1x_2\left(1 - \cos 2\omega T + 2\cos^2\omega T\right)\right] = \boxed{\frac{m\omega}{2\,\mathrm{sen}\,\omega T}\left[(x_1^2+x_2^2)\cos\omega T - 2x_1x_2\right] = S_{cl}}$$

Cálculo de $\int_0^\infty e^{-x} \ln x . \ln(1+\xi x) . dx$

1°. Desarrollamos $\ln(1+\xi x)$ en serie:

$$I = \xi \int_0^\infty e^{-x} \ln x . x\,dx - \frac{\xi^2}{2} \int_0^\infty e^{-x} \ln x . x^2\,dx + \dots$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n \xi^n}{n} \int_0^\infty e^{-x} \ln x . x^n\,dx.$$

2° Para calcular $I_n \equiv \int_0^\infty e^{-x} \ln x . x^n\,dx$ no podemos partir de

$$I_0 = \int_0^\infty e^{-x} \ln x\,dx = -0,577215\ldots \equiv -A$$

(const. de Euler)

Partimos, en cambio, de

$$I_0 = f(s) = \int_0^\infty e^{-sx} \ln x\,dx = -\frac{1}{s}\left(A + \ln s \right)$$

$(Rs > 0)$

y al final hacemos $s \to 1$.

Recordando el teorema

$$\mathcal{L}\{x^n F(x)\} = (-1)^n \frac{d^n}{ds} f(s),$$

obtenemos

$$I_1 = -\frac{df}{ds} = \frac{1-(A+\ln s)}{s^2} = \frac{1}{s^2} + \frac{1}{s} f(s). \qquad 1 - A$$

$$I_2 = +\frac{d^2f}{ds^2} - \quad = \frac{3}{s^3} + \frac{2}{s^2} f(s) \qquad 3 - 2!A$$

$$I_3 = -\frac{d^3f}{ds^3} \quad = \frac{11}{s^4} + \frac{6}{s^3} f(s) \qquad 11 - 3!A$$

$$I_4 = \frac{d^4f}{ds^4} \quad = \frac{50}{s^5} + \frac{24}{s^4} f(s) \qquad 50 - 4!A$$

$$I_5 = -\frac{d^5f}{ds^5} \quad = \frac{274}{s^6} + \frac{120}{s^5} f(s) \qquad 274 - 5!A$$

$$I_6 \quad = \frac{1764}{s^7} + \frac{720}{s^6} f(s) \qquad 1764 - 6!A.$$

(Encontrar la expresión general. El 1er término es

$$\left\{ \left[\; ? \; \right](n-1) + (n-2)! \right\} n \quad + (n-1)! \;)$$

3°

$$I = \xi(1-A) - \frac{\xi^2}{2}(3-2!A) + \frac{\xi^3}{3}(11-3!A) - \frac{\xi^4}{4}(50-4!A) + \cdots$$

$$= \xi - 3\frac{\xi^2}{2} + 11\frac{\xi^3}{3} - 50\frac{\xi^4}{4} + \cdots$$

$$- A\left\{\xi - \xi^2 + 2!\xi^3 - 3!\xi^4 + \cdots\right\}$$

Calcular la modificación de los niveles del H al considerar el núcleo como una carga uniforme distribuida en 1 esfera de radio $a = \frac{1}{2}\frac{e^2}{mc^2}A^{1/3}$ Utilizar perturbaciones de 1er orden y los niveles 1s, 2p, 2s.

Si $r>a$: $V = -\frac{e^2 Z}{r}$; si $r \not> a$ $V = -\frac{1}{2}\frac{e^2 Z}{a}\left(3-\frac{r^2}{a^2}\right)$ ∴

$$U = \begin{cases} \frac{e^2 Z}{r} - \frac{1}{2}\frac{e^2 Z}{a}\left(3-\frac{r^2}{a^2}\right) & \text{si } r<a \\ 0 & \text{si } r>a \end{cases}$$

$$E_n = E_{n_0} + U_{nn} = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} + U_{nn}$$

Por lo pronto vemos que por ser la perturbación puramente radial es posible aplicar la teoría de perturbaciones para estados no degenerados (al 1er orden). Esto es debido a que en el desarrollo $\varphi_n = \sum a_{n_i}\varphi_{n_i}$ para la función de onda de uno de los estados degenerados perturbado (p.ej. el 2,p,0) los a_n correspondientes a las funciones de ondas φ_n de los otros estados degenerados (p.ej. los ~~...~~ 2,p,−1, ~~y~~ 2,p,1 y 2s) se anulan. Esto es inmediato a partir de $a_n = \frac{U_{no}}{E-E_n}a_0$ (aquí el estado 0 sería el 2,p,0 p.ej.) y con $n \begin{cases} 2,p,-1 \\ 2,p,1 \\ 2s \end{cases}$, y viendo que U_{no} se anula por la ~~...~~ integración sobre la parte angular, no afectada por la perturbación. $\varphi_{n,l,m} = R_{nl}Y_{lm}$

$$(U_{nn})_l = \int \varphi_n^* U \varphi_n \, dw = \int_0^\infty R_{nl}^*(r)\, U R_{nl}(r) r^2 dr$$ y en este caso

$$(U_{nn})_l = \int_0^a (R_{nl}(r))^2 U(r) r^2 dr = e^2 Z \int_0^a R_{nl}^2(r)\left\{\frac{1}{r} - \frac{1}{2a}\left(3-\frac{r^2}{a^2}\right)\right\} r^2 dr = e^2 Z \int_0^a R_{nl}^2\left\{r - \frac{3r^2}{2a} + \frac{r^4}{2a^3}\right\} dr$$

Siendo

$$R_{1s}(r) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} 2\, e^{-\frac{Zr}{a_0}} \; ; \; R_{2s} = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\left(2-\frac{Zr}{a_0}\right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$$

$$R_{2p} = \left(\frac{Z}{2a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0\sqrt{3}}\, e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$$

y $\int_0^a e^{-\beta r} dr = -\frac{1}{\beta}\left(e^{-\beta a}-1\right)$ y $\int_0^a r^n e^{-\beta r} dr = (-1)^{n+1} \frac{\partial^n}{\partial \beta^n}\left(\frac{1}{\beta}\left(e^{-\beta a}-1\right)\right)$

O también $\int_0^a x^n e^{-\beta x}\,dx = -e^{-\beta x}\sum_{\nu=0}^{n}\frac{n!}{(n-\nu)!}\frac{x^{n-\nu}}{\beta^{\nu+1}}\Big|_0^a = -\left(e^{-\beta a}\sum_0^n \frac{n!}{(n-\nu)!}\frac{a^{n-\nu}}{\beta^{\nu+1}} - \frac{n!}{\beta^{n+1}}\right)$

$$\int_0^a x e^{-\beta x}dx = \frac{1}{\beta^2}\left(1-e^{-\beta a}\right) - \frac{a e^{-\beta a}}{\beta} \approx \frac{a^2}{2}$$ (Desarrollando los exp. ya que β es del orden 10^7 y a de 10^{-13})

$$\int_0^a x^2 e^{-\beta x}dx = \frac{2}{\beta^3}\left(1-e^{-\beta a}\right) - \frac{a e^{-\beta a}}{\beta}\left(a+\frac{2}{\beta}\right) \approx +\frac{1}{3}a^3$$

$$\int_0^a x^3 e^{-\beta x}dx = \frac{6}{\beta^4}\left(1-e^{-\beta a}\right) - \frac{a}{\beta}e^{-\beta a}\left(a^2+\frac{3a}{\beta}+\frac{6}{\beta^2}\right) = \frac{1}{4}a^4$$

$$\int_0^a x^4 e^{-\beta x}dx = \frac{4!}{\beta^5}\left(1-e^{-\beta a}\right) - \frac{a}{\beta}e^{-\beta a}\left(a^3+\frac{4a^2}{\beta}+4.3\frac{a}{\beta^2}+\frac{4!}{\beta^3}\right)$$

$$\int_0^a x^5 e^{-\beta x}dx = \frac{5!}{\beta^6}\left(1-e^{-\beta a}\right) - \frac{a}{\beta}e^{-\beta a}\left(a^4+\frac{5a^3}{\beta}+\frac{5.4a^2}{\beta^2}+\frac{5.4.3a}{\beta^3}+\frac{5!}{\beta^4}\right)$$

$$\int_0^a x^n e^{-\beta x}dx = \frac{n!}{\beta^{n+1}}\left(1-e^{-\beta a}\right) - \frac{a}{\beta}e^{-\beta a}\left(a^{n-1}+\frac{n a^{n-2}}{\beta}+n.(n-1)\frac{a^{n-3}}{\beta^2}+\cdots+\frac{n!}{\beta^{n-1}}\right)$$

$$(U_{11})_s = e^2 Z\,4\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3\int e^{-\frac{2Zr}{a_0}}\left(r-\frac{3}{2}\frac{r^2}{a}+\frac{r^4}{2a^3}\right)dr = \frac{4e^2Z^4}{a_0^3}\left\{\frac{a_0^2}{2Z}\right.$$

En general $\int_0^a r^n e^{-\beta x} = \frac{1}{n+1}a^{n+1}$ ya que $e^{-\beta x} = (1-\beta x)\approx 1$ ya que $\beta x < \beta a \approx 10^{-5}$

$$U_{11_s} = e^2 Z\,4\left(\frac{Z}{a_0}\right)^3\int_0^a e^{-\frac{2Zr}{a_0}}\left(r-\frac{3}{2}\frac{r^2}{a}+\frac{r^4}{2a^3}\right)dr = \frac{4Z^4e^2}{a_0^3}\left(\frac{a^2}{2}-\frac{1}{2}a^2+\frac{a^2}{10}\right) = \frac{4Z^4e^2a^2}{10a_0^3}$$

$$(U_{22})_s = \frac{e^2Z^4}{(2a_0)^3}\int_0^a e^{-\frac{2Zr}{a_0}}\left(r-\frac{3}{2}\frac{r^2}{a}+\frac{r^4}{2a^3}\right)\left(4+\frac{Z^2r^2}{a_0^2}-\frac{4Zr}{a_0}\right)dr = \frac{e^2Z^4}{(2a_0)^3}\int_0^a e^{-\frac{2Zr}{a_0}}\left\{4r-\left(\frac{4Z}{a_0}+\frac{6}{a}\right)r^2+\right.$$

$$\left.+\left(\frac{Z^2}{a_0^2}+\frac{6Z}{aa_0}\right)r^3+\left(\frac{2}{a^3}-\frac{3}{2}\frac{Z^2}{aa_0^2}\right)r^4-\frac{2Z}{a^3a_0}r^5+\frac{Z^2}{2a^3a_0^2}r^6\right\}dr =$$

$$= \frac{e^2Z^4}{(2a_0)^3}\left\{2a^2-\left(\frac{4Z}{a_0}+\frac{6}{a}\right)\frac{a^3}{3}+\left(\frac{Z^2}{a_0^2}+\frac{6Z}{aa_0}\right)\frac{a^4}{4}+\left(\frac{2}{a^3}-\frac{3Z^2}{2aa_0^2}\right)\frac{a^5}{5}-\frac{2Z}{a^3a_0}\frac{a^6}{6}+\frac{Z^2}{2a^3a_0^2}\frac{a^7}{7}\right\}\approx\frac{e^2Z^4a^2}{20a_0^3}$$

$$(U_{22})_p = \frac{e^2Z^6}{24a_0^5}\int_0^a e^{-\frac{Zr}{a_0}}r^2\left(r-\frac{3}{2}\frac{r^2}{a}+\frac{r^4}{2a^3}\right)dr = \frac{e^2Z^6}{24a_0^5}\left(\frac{1}{4}a^4-\frac{3}{10}a^4+\frac{1}{14}a^4\right) = \frac{e^2Z^6a^4}{1120a_0^5}$$

$$\frac{m\,\beta_0}{\sqrt{1-\beta_0^2}} - \frac{m\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} - \frac{m}{\sqrt{1-\beta_0^2}} + \frac{m}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

$$\frac{m}{\sqrt{1-\beta_0^2}} - \frac{m}{\sqrt{1-\beta}} = k$$

$$\frac{m(\beta_0-1)}{\sqrt{1-\beta_0^2}} - \frac{m(\beta-1)}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

$$= \frac{m(\beta_0-1)(\cancel{1+\beta_0})}{1-\frac{\beta_0^2}{2}}$$

$$\frac{k\sqrt{1-\beta_0^2}\sqrt{1-\beta^2}}{2} =$$

$$\frac{m\beta_0}{\sqrt{1-\beta_0^2}} - \frac{m\beta}{\sqrt{1-\beta^2}} - k = \frac{k}{2}\sqrt{1-\beta_0^2}\sqrt{1-$$

$$E^2 = c^m\sqrt{p^2+m_0^2c}$$

$$E^n = c^m\sqrt{\left[p^2+m_0^2c^{\cancel{4}}\right]}$$

$$e^{\frac{i(\vec{q}\cdot\vec{r})}{\hbar}}$$

$$q = \frac{\bar{p}_0}{c} - \frac{\bar{p}}{c} - \bar{k}$$

$$\cancel{q \sim \hbar}$$

$$\cancel{r \sim \frac{\hbar}{q}}$$

$$\frac{m\frac{v_0}{c}}{\sqrt{1-\left(\frac{v_0}{c}\right)^2}} - \frac{m\frac{v}{c}}{\sqrt{1-}}$$

$$\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 0.5$$

$$cP = \cancel{v}E$$

$$P = CE$$

$$P = EV$$

$$P = EC$$

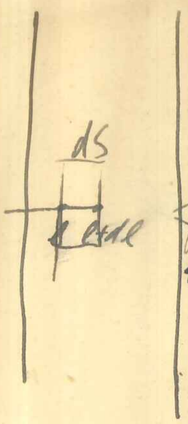
$$\cancel{CP}$$

$$f(x)\,dx$$

$$x = a\cdot y$$

$$\boxed{f(ay)\,a\,dy}$$

TRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS



Supongamos que la partícula sufre un sólo scatt. en... l + dl. Si n es el núm. de átomos por cm³: en el volumen ~~dS~~ dl (algun 1 cm² de superf) habrá dS n ~~dS~~ dl átomos. ; por otra parte hay una peso de materia =

$n\,dl\,\cancel{dS}\,m_A = dx$, m_A = masa del átomo.

$n\,dl = \dfrac{dx\,dS}{m_A}$; Luego hay $\dfrac{dx\,dS}{m_A}$ átomos o sea

$\dfrac{dS\,dx\,N}{A}$; pues $N m_A = A$ = 1 mol

~~Luego para un sólo scattering tendremos~~

Luego la probabilidad para que una partícula haya sido desviada entre l y l+dl al ángulo cónico dω será suponiendo contribuc. Columbiana de los átomos:

$$\frac{4dS\,N\,dx}{A}\left(\frac{m^2 Z^2 e^4}{4P^2 \operatorname{sen}^2 \frac{\vartheta}{2}}\right)^2 ;$$ supon. que ϑ es muy pequeño:

$$\frac{4N\,dx}{A}\,\frac{m^2 Z^2 e^4}{P^4\,\vartheta^4} ;$$ para tener probabilidad por cm² dividimos por dS

$$\frac{e^2}{r_e} = m_e c^2 \therefore e^4 = r_e^2 (m_e c^2)^2$$

$$\frac{4N\,dx}{A}\,\frac{m^2 Z^2 e^4}{P^4\,\vartheta^4} ;$$

$$\frac{4N\,dx}{A}\,\frac{Z^2\,r_e^2 (m_e c^2)^2}{v^2 P^2}\,\frac{1}{\vartheta^4} = \frac{4N\,dx}{A}\,Z^2 r_e^2 \left(\frac{m_e c}{P\beta}\right)^2 \frac{1}{\vartheta^4}$$

$$\overline{\vartheta^2_{Av}} = \int_0^{\Delta z} dx \int \frac{4N}{A} Z^2 r_e^2 \left(\frac{m_e c}{P\beta}\right)^2 \frac{\vartheta^2}{\vartheta^4}\,d\omega = \frac{8\pi N}{A}\Delta z\,Z^2 r_e^2 \left(\frac{m_e c}{P\beta}\right)^2 \int_{\vartheta_1}^{\vartheta_2} \frac{1}{\vartheta}\,d\vartheta$$

$$= \frac{8\pi\,\cancel{\Delta z}\,N Z^2}{A}\,r_e^2 \left(\frac{m_e c}{P\beta}\right)^2 \int_{\vartheta_1}^{\vartheta_2} \frac{1}{\vartheta}\,d\vartheta =$$

$$\boxed{\frac{8\pi\,dx\,N Z^2}{A}\,r_e^2 \left(\frac{m_e c}{P\beta}\right)^2 \ln \frac{\vartheta_2}{\vartheta_1}}$$

$$\frac{8\pi N dx}{A} m^2 Z^2 e^4 \underbrace{\int_{\Theta_2}^{\pi/2} \frac{\vartheta^3 \, d\vartheta}{\left\{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + p^2 \vartheta^2\right\}^2}}_{I}$$

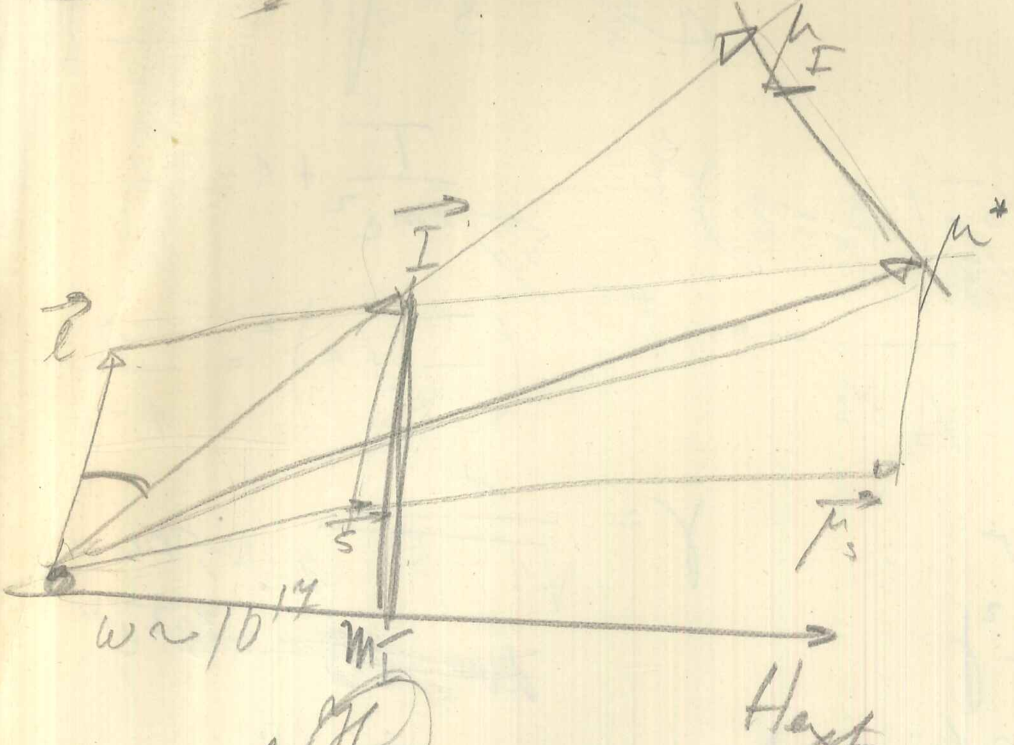
$$\frac{d(\vartheta^2)}{2} = \vartheta \, d\vartheta$$

$$I = \int_0^{\pi/2} \frac{\vartheta^2 \, \vartheta \, d\vartheta}{\left\{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + p^2 \vartheta^2\right\}^2} = \frac{1}{2} \int_0^{\pi^2/4} \frac{\vartheta^2 \, d(\vartheta^2)}{\left\{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + p^2 \vartheta^2\right\}^2}$$

$$= \frac{1}{2} \int_0^{\pi^2/4} \frac{x \, dx}{\left\{\left(\frac{h}{a}\right)^2 + p^2 x\right\}^2}$$

$\vec{\mu}_s = k\vec{s}$ 5.6. proton

$2.8 = \frac{k}{2}$ $k = -3.8$ para neutron



$$w = g\frac{e\mathcal{H}}{2Mc} \leq 10^9$$

2.8

-1.9

$$w = \frac{g\,e\,\mathcal{H}}{2Mc} \qquad \mu = g\frac{e\hbar}{2mc}I$$

$\mu_{obs} = \mu^* \cdot H_e = \mu_l\,\vec{l}\cdot H_e$ | $\mu_s = ks$ | $\mu_l =$

$$\mu_{obs} = \mu_I\frac{m_I}{I} = \mu_I\frac{m_I}{\sqrt{I(I+1)}} \qquad l^2 = I^2 + s^2 - 2sI\cos$$

$$\mu_I = \mu_l\cos(\vec{l}\,\vec{I}) + \mu_s\cos(s,I)$$

$$s^2 = l^2 + I^2 - 2\,lI\cos l.I$$

$$\cos lI = \frac{l^2 + I^2 - s^2}{2\,l\,I} \qquad \cos(s,I) = \frac{I^2 + s^2 - l^2}{2\,s\,I}$$

$$\frac{c_1 (A-z)^{5/3}}{A^{2/3}} + \frac{c_1 z^{5/3}}{A^{2/3}}$$

$$-1+\beta^2 = \frac{-}{\left(\frac{T}{mc^2}+1\right)^2}$$

$$\beta^2 = \sqrt{1 - \frac{1}{\left(\frac{T}{mc^2}+1\right)^2}}$$

$$\frac{- c_1 \frac{5}{3}(A-z)^{2/3}}{A^{2/3}} + 5/$$

$$\frac{T}{mc^2}+1 = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

$$\left(\frac{T}{mc^2}+1\right)^2 = \frac{1}{1-\beta^2}$$

$p = m\gamma v$

$E = mc^2\gamma$

$T = mc^2(\gamma - 1)$

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$$

$$\frac{0.385 \text{ Mev}}{mc^2\beta^3 c^2} = dt$$

$\cancel{dv = 10}$

$$v = \frac{10}{t}$$

$$\frac{3.28 \times 5}{110 \times 0.383 \times c} = dt$$

$$dv = -\frac{(10)^2}{t^2}\frac{dt}{10} =$$

$$\frac{3.28 \times 5}{110 \times 0.383 \times 3 \times 10^8} \quad 1.29$$

$$= -\frac{v^2\,dt}{10} = dv$$

$$dT = \mp mc^2 \frac{d\gamma}{dv}\,dv$$

$$= \frac{-mc^2 v^2 dt}{10\,c} \; \frac{\frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}}}{(1-\beta^2)}$$

$$\beta = \sqrt{1 - \frac{1}{\left(\frac{T}{mc^2}+1\right)^2}}$$

$$dT = -\frac{m v^3\,dt}{10} \; \frac{}{(1-\beta^2)^{3/2}}$$

$mc^2 = 110$ Mev.

$(1-\beta^2)^{3/2} = 0.3 \times 28$

$$E = \cancel{c\sqrt{p^2+m^2c^2}}$$

$$E^2 = \cancel{c^2 p^2} + m^2c^4$$

$$\boxed{\beta = 0.725}$$

$\beta^2 = 0.524$

$(1-\beta^2) = 0.476$

$$\frac{50}{110} = 0.455$$

$1 - 0.476$

0.524

Amati

$$H_{21} = \int \Psi_2^* H \Psi_1 \, dval = 2E_0 \underbrace{\cancel{\int \Psi_2^* \Psi_1 \, dval}}_{I_0} + e^2 \underbrace{\int \varphi_{1s}(r_{A2}) \varphi_{1s}(r_{B1}) \varphi_{1s}(r_{A1}) \varphi_{1s}(r_{B2}) \left(-\frac{1}{r_{1B}} - \frac{1}{r_{2A}} + \frac{1}{R} + \frac{1}{r_{12}}\right) d\ldots}_{I_1 \; I_2}$$

$$I_1' = \iiiint \varphi_{1s}(r_{A2}) \varphi_{1s}(r_{B1}) \varphi_{1s}(r_{A1}) \varphi_{1s}(r_{B2}) \frac{1}{r_{B1}} (2\pi)^2 \frac{r_{1A} r_{1B} r_{2A} r_{2B}}{R^2} dr_{1A} dr_{1B} dr_{2A} dr_{2B}$$

Las integraciones sobre dr_{1B} y dr_{2A} van de $|r_{1A} - R|$ a $(r_{1A} + R)$ y $|r_{2B} - R|$ a $(r_{2B} + R)$ respectivamente. ∴

$$I_1' = \frac{4\pi^2}{R^2} \left\{ \int_0^\infty r_{1A} \varphi_{1s}(r_{1A}) \left(\int_{|r_{1A}-R|}^{r_{1A}+R} \varphi_{1s}(r_{1B}) dr_{1B} \right) dr_{1A} \right\} \cdot \left\{ \int_0^\infty r_{2B} \varphi_{1s}(r_{2B}) \left(\int_{|r_{2B}-R|}^{r_{2B}+R} \varphi_{1s}(r_{2A}) r_{2A} dr_{2A} \right) dr_{2B} \right\} =$$

$$\frac{16}{R^2 a_0^6} \left\{ \int_0^\infty r_{1A} e^{-\frac{r_{1A}}{a_0}} \left(\int_{|r_{1A}-R|}^{r_{1A}+R} e^{-\frac{r_{1B}}{a_0}} dr_{1B} \right) dr_{1A} \right\} \cdot \left\{ \int_0^\infty r_{2B} e^{-\frac{r_{2B}}{a_0}} \left(\int_{|r_{2B}-R|}^{r_{2B}+R} e^{-\frac{r_{2A}}{a_0}} r_{2A} dr_{2A} \right) dr_{2B} \right\}$$

$$\int_{|r_{1A}-R|}^{r_{1A}+R} e^{-\frac{r_{1B}}{a_0}} dr_{1B} = \frac{a_0}{\cancel{\beta}} \left(e^{-\frac{|r_{1A}-R|}{a_0}} - e^{-\frac{(r_{1A}+R)}{a_0}} \right) \qquad \cancel{\beta = \frac{1}{a_0}}$$

$$\int_{|r_{2B}-R|}^{r_{2B}+R} r_{2A} e^{-\frac{r_{2A}}{a_0}} dr_{2A} = \frac{a_0}{\cancel{\beta}} \left[e^{-\frac{\beta}{a_0}|r_{2B}-R|} \left(|R - r_{2B}| + \frac{a_0}{\cancel{\beta}} \right) - e^{-\frac{\beta}{a_0}(r_{2B}+R)} \left(R + r_{2B} + \frac{a_0}{\cancel{\beta}} \right) \right] \therefore$$

$$\int_0^\infty r_{1A} e^{-\frac{r_{1A}}{a_0}} \int_{|\;|}^{(\;)} e^{-\frac{r_{1B}}{a_0}} dr_{1B} \, dr_{1A} = -a_0 e^{-\frac{R}{a_0}} \int_0^\infty r_{1A} e^{-\frac{2r_{1A}}{a_0}} dr_{1A} + e^{-\frac{R}{a_0}} a_0 \int_0^R r_{1A} dr_{1A} + \int_0^\infty a_0 e^{\frac{R}{a_0}} \int_R^\infty e^{-\frac{2r_{1A}}{a_0}} r_{1A} dr_{1A} =$$

$$\cancel{= e^{-\frac{R}{a_0}} a_0 \frac{R^2}{2} + a_0 \int_0^\infty r_{1A} e^{-2r_{1A}}}$$

$$= -a_0 e^{-\frac{R}{a_0}} \left(\frac{a_0^2}{4} \right) + e^{-\frac{R}{a_0}} a_0 \frac{R^2}{2} + a_0 e^{\frac{R}{a_0}} \left(-\frac{a_0}{2} e^{-\frac{2R}{a_0}} (R + a_0) + e^{-\frac{2R}{a_0}} \left(\frac{R a_0}{2} + \frac{a_0^2}{4} \right) \right) =$$

$$a_0 e^{-R/a_0} \left(-\frac{a_0^2}{4} + \frac{R^2}{2} - \frac{a_0^2}{2} + \frac{a_0^2}{4} \right) = \frac{a_0}{2} e^{-R/a_0} (R^2 - a_0^2)$$

De manera análoga se resuelve la $\int_0^\infty r_{2B} e^{-\frac{r_{2B}}{a_0}} \left(\int e^{-\frac{r_{2A}}{a_0}} r_{2A} dr_{2A} \right) dr_{2B}$ y con ello se obtiene I_1'. Por simetría $I_2' = I_1'$ ~~y por~~

~~ortogonalidad de las autof~~

Por otro lado es inmed. recalcar $\int \Psi_2^* H \Psi_1 \, dval = \frac{1}{R^2} \left[\int \varphi_{1s}(r) \, r \, dr \left(\int_{|R-r|}^{R+r} \varphi_{1s}(x) \, x \, d\ldots \right) \right.$

con lo cual se resuelve I^0 e I_3.

[illegible]

$$ikB'e^{-ikx}\left[e^{ikx} - Ae^{-ikx}\right] + ik\left[e^{ikx} + Ae^{-ikx}\right]B'e^{-ikx} =$$

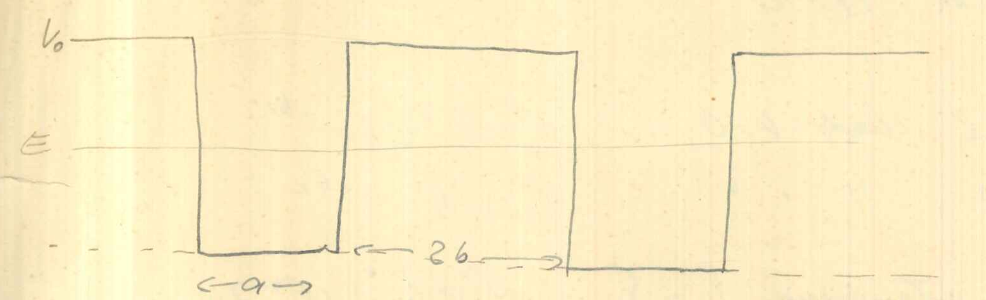
$$= ik\left[e^{-ikx} + A'e^{ikx}\right]Be^{ikx} + ikBe^{ikx}\left[e^{-ikx} - A'e^{ikx}\right] \therefore$$

$$B' - \cancel{AB'e^{-2ikx}} + B' + \cancel{AB'e^{-2ikx}} = B + \cancel{A'Be^{2ikx}} + B - \cancel{BA'e^{2ikx}}$$

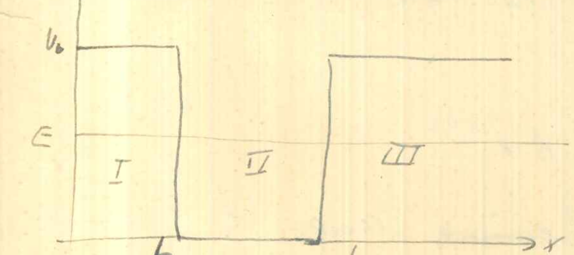
$$\therefore B' = B \quad \therefore \quad \tau_l = |B|^2 = |B'|^2 = \tau_r$$ y con ello $\tau_l = \tau_r$

25

3º)



Si elegimos el centro de coordenadas en el centro de 2b tendremos $V(x) = V(-x)$ y sabemos por lo tanto que las autofunciones correspondientes a autovalores no degenerados son pares o impares. Si el autovalor fuese degenerado siempre es posible obtener, mediante combinaciones lineales, autofunciones pares o impares. Buscaremos entonces autofunciones definidas para $x > 0$ con condiciones apropiadas en el origen para ser extendidas a $x < 0$ en forma par o impar.



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi$$

Llamando $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$, $K = \frac{2m}{\hbar^2}(E-V)$

$\psi_I = A\,\mathrm{senh}\,Kx + B\cosh Kx$

$\psi_{II} = C\cos(kx+\delta)$

$\psi_{III} = De^{-Kx}$

Haciendo $B = 0$ obtendremos la solución impar del problema original y haciendo $A = 0$ la par

Condición de contin. en b

$$\cancel{K\,\mathrm{tgh}\,Kb} \quad -k\,\mathrm{tg}(kb+\delta) = \begin{cases} K\,\mathrm{tgh}\,Kb & \text{si } \psi \text{ es par} \\ K\coth Kb & \text{si } \psi \text{ es impar} \end{cases}$$

Condición de contin. en a+b

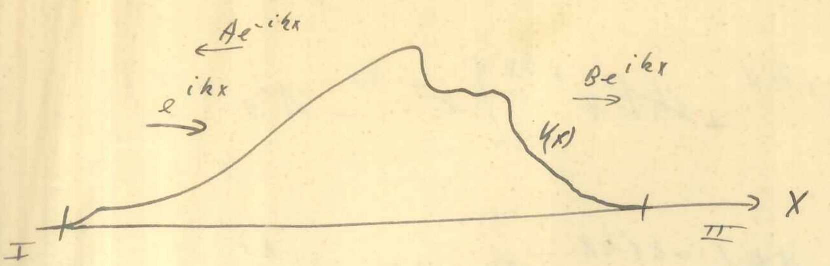
$$-k\,\mathrm{tg}(k(a+b)+\delta) = -K$$

El resto de este problema será entregado próximamente.

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS

Daniel Amati

Prob. 2)



Partículas incidentes de izq. a derecha

$r_\ell = |A|^2 \quad \tau_\ell = |B|^2$

1°) Probar $r_\ell + \tau_\ell = 1$

2°) Si hacemos incidir partículas de derecha a izquierda (coef. de refl. r_r y de transm. τ_r), probar $\tau_\ell = \tau_r$

1°) En la región I, donde $V=0$, $\psi_I = e^{ikx} + Ae^{-ikx}$

en la " II, " " " $\psi_{II} = Be^{+ikx}$

Por ser un problema estacionario $S_I = S_{II}$ ∴ $\psi_I \frac{d\psi_I^*}{dx} - \psi_I^* \frac{d\psi_I}{dx} = \psi_{II}\frac{d\psi_{II}^*}{dx} - \psi_{II}^*\frac{d\psi_{II}}{dx}$

∴ $-ik(e^{ikx} + Ae^{-ikx})(e^{-ikx} - A^*e^{ikx}) - ik(e^{-ikx} + A^*e^{+ikx})(e^{ikx} - Ae^{-ikx}) =$

$= -ikBe^{ikx}B^*e^{-ikx} - ikB^*e^{-ikx}Be^{ikx}$ ∴

$1 - |A|^2 + \cancel{Ae^{-2ikx}} - \cancel{A^*e^{2ikx}} + 1 - |A|^2 + \cancel{A^*e^{2ikx}} - \cancel{Ae^{-2ikx}} = 2|B|^2$

∴ $1 - |A|^2 = |B|^2$ ∴ $\boxed{r_\ell + \tau_\ell = 1}$; Evidentemente con método igual $\boxed{r_r + \tau_r = 1}$

2°) Si ψ' representa la función de onda para la incidencia de partículas de derecha a izquierda: $\psi_I' = B'e^{-ikx}$

$\psi_{II}' = e^{-ikx} + A'e^{ikx}$

Por otro lado ψ y ψ' son dos soluciones de la misma ecuac. de Schroedinger

$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + (V-E)\psi = 0 \quad ; \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi'}{dx^2} + (V-E)\psi' = 0$

Multiplicando la primera por ψ' y la segunda por ψ y restando

$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi'\frac{d^2\psi}{dx^2} - \psi\frac{d^2\psi'}{dx^2}\right] = 0$ luego

$\psi'\frac{d^2\psi}{dx^2} - \psi\frac{d^2\psi'}{dx^2} = \frac{d}{dx}\left[\psi'\frac{d\psi}{dx} - \psi\frac{d\psi'}{dx}\right] = 0$

Luego $\psi'\frac{d\psi}{dx} - \psi\frac{d\psi'}{dx}$ es una expresión que no depende de x y por ello el valor de ella calculado en la región I debe ser igual al valor calculado en II

Reemplazando los valores de ψ y ψ'

Daniel

③ Achar as equações do movimento

$$L = \frac{m\vec{v}^2}{2} + \frac{e}{c}\vec{v}\cdot\vec{A}_{(xyzt)} - e\varphi_{(xyzt)}$$

$$L = \frac{m}{2}(v_x^2+v_y^2+v_z^2) + \frac{e}{c}(v_xA_x+v_yA_y+v_zA_z) - e\varphi$$

$$\frac{\partial L}{\partial v_x} = mv_x + \frac{e}{c}A_x \quad ; \quad \frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial v_x} = m\ddot{x} + \frac{e}{c}\frac{dA_x}{dt} = m\ddot{x} + \frac{e}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t} + \frac{e}{c}\vec{v}\cdot\nabla A_x$$

$$\frac{\partial L}{\partial x} = \frac{e}{c}\left(v_x\frac{\partial A_x}{\partial x} + v_y\frac{\partial A_y}{\partial x} + v_z\frac{\partial A_z}{\partial x}\right) - e\frac{\partial\varphi}{\partial x} \quad \therefore$$

$$m\ddot{x} = -e\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x} + \frac{1}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t}\right) + \frac{e}{c}\left[v_y\left(\frac{\partial A_y}{\partial x} - \frac{\partial A_x}{\partial y}\right) - v_z\left(\frac{\partial A_x}{\partial z} - \frac{\partial A_z}{\partial x}\right)\right] =$$

$$= -e\left(\frac{\partial\varphi}{\partial x} + \frac{1}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t}\right) + \frac{e}{c}\left[v_y(\nabla\times A)_z - v_z(\nabla\times A)_y\right] = -e\left(\nabla\varphi + \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}\right)_x + \frac{e}{c}\left[\vec{v}\times\ldots\right]_x$$

$$\therefore \boxed{m\ddot{\vec{r}} = e\left(\vec{E} + \frac{\vec{v}}{c}\times\vec{B}\right)} \quad \text{do} \quad \vec{E} = -\nabla\varphi - \frac{1}{c}\frac{\partial\vec{A}}{\partial t}; \quad \vec{B} = \nabla\times\vec{A}$$

———— x ————

⑤ Calcular a ação clássica da part. livre

$$L = \frac{m\dot{x}^2}{2} \quad \text{com as condições} \quad \begin{cases} x_1 \longrightarrow x_2 \\ 0 \longrightarrow T \end{cases}$$

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = m\ddot{x} = 0 \quad \therefore \quad x = at + b \quad \begin{cases} x_1 = b \\ x_2 = aT + x_1 \therefore a = \frac{x_2 - x_1}{T} \end{cases}$$

$$S_{cl} = \frac{m}{2}\int_0^T \dot{x}^2 dt = \frac{m}{2}a^2T = \frac{m}{2}\frac{(x_2-x_1)^2}{T}$$

———— x ————