Estructura de la Materia

Parcial de Mayo de 2017

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
FACULTAD DE CIENCIAS FISICAS

5 de Mayo de 2017

Examen Parcial de Estructura de la Materia

Nombre y Apellidos:

Firma y DNI:

El examen consta de teoría y problemas, pero esta todo junto. Por favor, justifique las respuestas, excepto cuando sean de elección múltiple. Los problemas sí necesitan respuestas justificadas, como siempre. Algunas ayudas están al final de los enunciados.

1. [30 puntos] a) La vida media típica de un atomo excitado es del orden de $10^{-1}, 10^{-8}, 10^{-13}, 10^{-23}$ segundos. Sol:

   b) La velocidad de un electrón en el átomo de hidrógeno es del orden de $0.01\%, 0.1\%, 1\%, 10\%$ la velocidad de la luz. Si no lo sabe, haga un cálculo rápido.

   Sol:

   c) Se calcula el término de Darwin para un átomo hidrogenoideo de número atómico menor que 10. ¿De qué átomo se trata y en qué estado se encuentra el electrón si el resultado es de 0.034777 eV ? Ayuda: $E1 = -13.60569253$ eV

2. [40 puntos] Cite las reglas de selección de las transiciones dipolares eléctricas y demuestre una de ellas (la que le resulte más fácil).

3. [30 puntos] En el estado fundamental de un átomo hidrogenoideo de número atómico Z, ¿a qué distancia es más probable encontrar el electrón?

4. [20 puntos] Enuncie la *regla de los intervalos de Landé* del acoplamiento spin-órbita.

5. [Problema1: 30+30+50] a) Una partícula en un potencial central tiene momento angular orbital $l = 2$ y spin $s = 3/2$. 1) Escriba los posibles valores de j. 2) Haga un diagrama de los niveles de energía si se considera la interaccion spin-órbita, indicando en el diagrama el estado (use notación espectroscópica), la energía del nivel y la degeneración. Dato: La interacción spin-órbita tiene Hamiltoniano $H_{so} = a\,\mathbf{LS}$ donde a es una constante. 3) ¿Qué efecto tiene esta interacción sobre el *centro de gravedad* del multiplete?

   b) Un átomo de hidrógeno se encuentra inicialmente en un estado excitado $n = 4, l = 2$. Decae al estado fundamental mediante una secuencia de transiciones dipolares eléctricas permitidas. ¿Cuántos pasos se necesitan? Escribir *dos* de esas secuencias.

   c) Considere el mismo átomo del apartado anterior. No puede desexcitarse por transiciones dipolares eléctricas desde el estado $42m$ al 100, pero quizás pueda hacerlo por transiciones cuadrupolares. Para que estas sean posibles hay que estudiar los elementos de matriz $\langle 42m|Q_{ij}|100\rangle$, donde $Q_{ij} = e(3\,r_i r_j - \delta_{ij} r^2)$, con e la carga del electrón. **Sin** considerar las partes radiales de las funciones de onda, sólo las partes angulares, las que van con los armónicos esféricos, encuentre algún i, j tal que

   $$\langle 42m|Q_{ij}|100\rangle \neq 0$$

   (con un caso basta, pero tendrá que hacer laa integrales angulares y ver que no se anulan). Claramente $r_1 = x, r_2 = y, r_3 = z$.

6. [Problema2: 50 puntos] El estado fundamental de un átomo de helio es no degenerado como bien sabemos. Pero para este ejercicio vamos a considerar un hipotético helio en el que los dos electrones son substituidos por dos partículas idénticas de spin 1 y carga negativa. No hay interacción entre los spines de las hipotéticas partículas. ¿Cuál es la degeneración del estado fundamental de este novedoso helio?

Usted puede necesitar (o no) alguno de los siguientes datos:

En la siguiente lista de armónicos esféricos, θ, φ son los ángulos polar y azimutal, respectivamente, de las coordenadas esféricas. Asterisco significa el complejo conjugado. Las funciones de onda radiales son las del hidrógeno.

$$Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, \quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta, \quad Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{i\varphi}, \quad Y_1^{-1} = -Y_1^{1*},$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}}\left(\frac{3}{2}\cos^2\theta - \frac{1}{2}\right), \quad Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{i\varphi}, \quad Y_2^{-1} = -Y_2^{1*},$$

$$Y_2^2 = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta\, e^{2i\varphi}, \quad Y_2^{-2} = Y_2^{2*}.$$

$$L_+ Y_l^m = \sqrt{l(l+1) - m(m+1)}\,\hbar\, Y_l^{m+1}, \quad L_- Y_l^m = \sqrt{l(l+1) + m(-m+1)}\,\hbar\, Y_l^{m-1}.$$

$$R_{10} = 2\,a_0^{-3/2}\exp(-r/a_0),$$

$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}}\,a_0^{-3/2}\left(1 - \frac{r}{2a_0}\right)\exp(-r/2a_0), \quad R_{21} = \frac{1}{\sqrt{24}}\,a_0^{-3/2}\frac{r}{a_0}\exp(-r/2a_0),$$

$$R_{30} = \frac{2}{\sqrt{27}}\,a_0^{-3/2}\left(1 - \frac{2r}{3a_0} + \frac{2}{27}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2\right)\exp(-r/3a_0)$$

Estructura de la Materia. Mayo 2017. Examen parcial

① Sol: 10^{-8} s.

a) [lo vimos en clase cuando hicimos un ejercicio calculando la vida media de los estados $n=2$ del hidrógeno. El enunciado está en la hoja de problemas. Era un problema sacado del libro de Griffiths, pg 315. $\tau = 1.60\times10^{-9}$ s, excepto para $|200\rangle$ que tiene $\tau=\infty$
]

b) $1\% = 0.01$ de la velocidad de la luz.
lo vimos cuando hicimos correcciones relativistas a la velocidad del e^- en el átomo de hidrógeno.

$$\left\langle \frac{p^2}{2m_e}\right\rangle_{nl} \sim \frac{1}{2} m_e v^2 \sim -\frac{E_1}{n^2} \sim \frac{1}{2} m_e c^2 \alpha^2$$

take $n=1$

Take ∘, ∘ : $m_e v^2 \sim c^2 \alpha^2 m_e$ or $v = \alpha c = 0.0073\,c$
$\sim 0.01c$

$[\alpha \simeq \frac{1}{137} \sim \frac{1}{100} = 10^{-2}$ too$]$

c) clearly the state has $l=0$, otherwise $\langle H_{Darwin}\rangle = 0$.
For hydrogen,

$$\langle H_{Darwin}\rangle_{n0} = -\frac{E_n \alpha^2}{n} = -\frac{E_1}{n^3}\alpha^2,$$

$\uparrow l=0$

$$E_1 = -\frac{1}{2} m_e c^2 \alpha^2$$

For H-like: $\alpha \to Z\alpha$, and

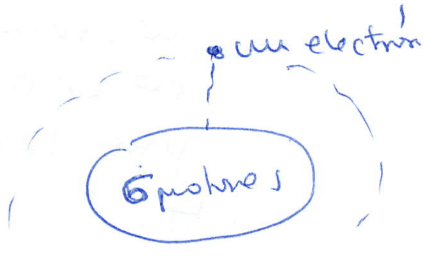
$$\langle H_{Darwin}\rangle_{n0} = -\frac{E_1}{n^3}\alpha^2 Z^4$$

Notice that $-E_1\alpha^2 \simeq 0.0007245$, so

$$\frac{0.034777}{0.0007245} \simeq 48. = \frac{Z^4}{n^3}$$

We know that (it is said in the exam) $1 \le Z \le 10$, so a reasonable estimate says that

Z	n	Z^4/n^3
6	3	48



It is a Carbon, $n=3$, $l=0$.

---

(2) visto en clase.
La distancia más probable de encontrar al electrón en el estado fundamental del hidrógeno es a_0, el radio de Bohr, por lo tanto de un H-like es $\frac{a_0}{Z}$.

To remember:

$$a_0 = \frac{\hbar c}{m_e c^2 \alpha} \xrightarrow[\text{if } \alpha \to Z\alpha]{} \frac{\hbar c}{m_e c^2 Z \alpha} = \frac{a_0}{Z}$$

Proof: Hydrogen ground state: ψ_{100}

$$\psi_{100} = R_{10} Y_0^0 = R_{10} \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

R_{10} = books = ayuda de examen $= 2 a_0^{-3/2} e^{-r/a_0}$

a_0 = Bohr radius

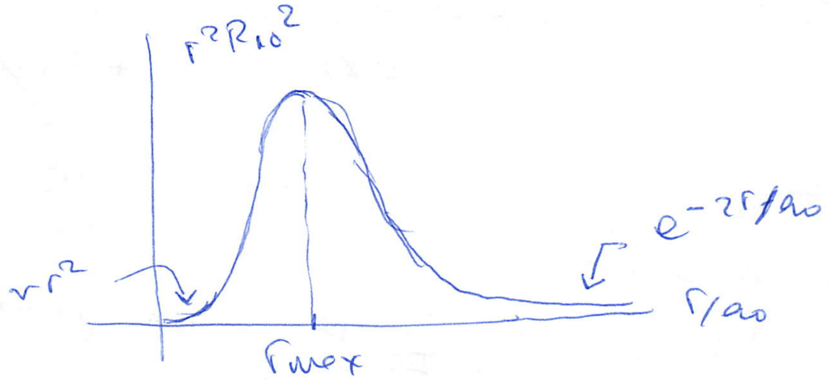
As we know,

$$1 = \langle \psi_{100} | \psi_{100} \rangle = \underbrace{\int_0^{\pi} d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \, \sin\theta \, (\overbrace{Y_0^0}^{1/4\pi})^2}_{\text{this is 1}} \int_0^{\infty} dr \, r^2 R_{10}^2$$

(or a constant different from zero. no need to know which one)

$$= \int_0^{\infty} dr \, r^2 R_{10}^2$$

The probability of finding the electron in the interval $[r, r+dr]$ is $r^2 R_{10}^2$. This has to have a maximum value for some r because the picture is



$f(r) = r^2 R_{10}^2$

$f'(r) = 2r R_{10}^2 + 2r^2 R_{10} R_{10}'$, $' \equiv \frac{d}{dr}$

$= \underbrace{2r R_{10}}_{\text{never zero for finite } r} \underbrace{(R_{10} + r R_{10}')}_{\text{this has to be a zero.}}$

never zero for finite r ($r=0$ excluded; it is the nucleus)

but $R_{10} = C_i e^{-r/a_0}$, C_i constant

$R_{10}' = C_i e^{-r/a_0}\left(-\frac{1}{a_0}\right)$

$R_{10} + r R_{10}' = C_i e^{-r/a_0}\left(1 - \frac{r}{a_0}\right)$ → it is zero when $r = a_0$.

conclusion: $r_{max} = a_0$ if $Z = 1$

$r_{max} = \frac{a_0}{Z}$

Error común: algunos alumnos (algunos, claro está) calculan $\langle r \rangle_{10} = \frac{3}{2}\frac{a_0}{Z}$. otros $\langle \frac{1}{r} \rangle_{10} = \frac{Z}{a_0}$, luego hacen $\frac{1}{\langle \frac{1}{r} \rangle} = \frac{a_0}{Z}$; ninguno de los dos: el valor medio no es el valor más probable, OJO!! Así que no calcule $\langle \cdot \rangle$ de nada. Que no es eso.

④ clase. La regla de los intervalos de Landé es sobre estados contiguos de energía, consecutivos. Añade la palabra contiguo o consecutivo. Y l y s son fijos. Recuerda que los que hacer

$$\dots + \cancel{l(l+1)} - \cancel{s(s+1)} = (\dots + (\cancel{l(l+1)} - \cancel{s(s+1)}))$$

---

⑤ ① $H_{SO} = a \cdot \vec{L} \cdot \vec{S}$

↑ fija, constante. La misma para todo el término. (no se toca...)

[Hemos visto en clase que para el hidrógeno depende de n, l, vale. Aquí se toma así.
, $\frac{dV}{dr}$,
]

a) $l=2$, $s=3/2$

Possible values of j: $\frac{7}{2}, \frac{5}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}$.

counting states: $l=2$ are 5 states, $s=\frac{3}{2}$ are 4 states $\}$ $5\times4=20$

Same number is obtained with

$j=\frac{7}{2}$ — 8 states
$j=\frac{5}{2}$ — 6
$j=\frac{3}{2}$ — 4
$j=\frac{1}{2}$ — 2

$\}$ $8+6+4+2=20$

$20=20$: están todos !!

b) Define $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

$$\vec{J}^2 = (\vec{L}+\vec{S})^2 = \vec{L}^2 + \vec{S}^2 + 2\,\vec{L}\cdot\vec{S},$$

$\vec{L}$ and $\vec{S}$ commute : so $\underline{\underline{2}}$

then

$$\vec{L}\cdot\vec{S} = \frac{1}{2}\left(\vec{J}^2 - \vec{L}^2 - \vec{S}^2\right),$$

$$\langle l s j | \vec{L}\cdot\vec{S} | l s j \rangle = \frac{\hbar^2}{2}\left(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right)$$

convenient choice of basis

Due to spin-orbit coupling the splitting energy levels are

$$\Delta E_{so} \equiv \langle H_{so} \rangle_{lsj} = a \langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle_{lsj}$$

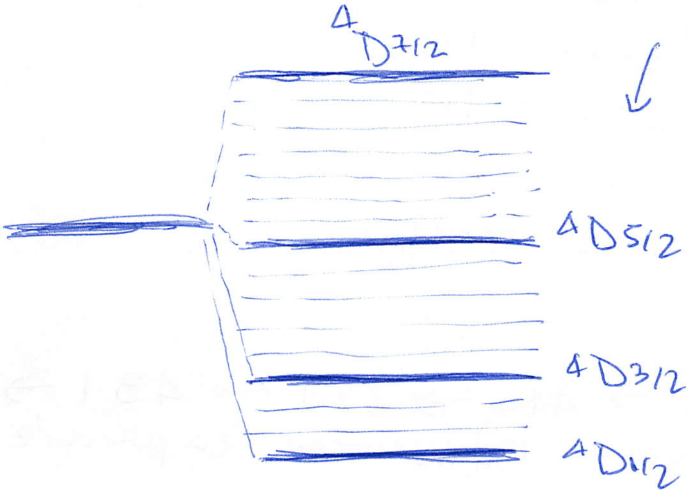
$$= \frac{a\hbar^2}{2} \left(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) \right).$$

In the term , $l=2$, $s=3/2$ we have:

j	$7/2$	$5/2$	$3/2$	$1/2$
$\frac{\Delta E_{so}}{a\hbar^2}$	3	$-\frac{1}{2}$	-3	$-\frac{9}{2}$
number of states that share the same energy	8	6	4	2
spectroscopic notation	$^4D_{7/2}$	$^4D_{5/2}$	$^4D_{3/2}$	$^4D_{1/2}$

$4 = 2s+1$; $\to j$

Splitting of energy levels: (take $a>0$)



constrained scale: each step is $\frac{a\hbar^2}{2}$.

c) The "energy" center of gravity does not change:

$$\sum_{\text{all states}} \text{state} \times \text{energy} = 0$$

$$= a\hbar^2 \left[8 \times 3 - 6 \times \frac{1}{2} - 4 \times 3 - 2 \times \frac{9}{2} \right] = 0$$

$24 - 3 - 12 - 9 = 0$

number of states that have energy $3a\hbar^2$

5 2 $n=4 \quad l=2$

The atom decays ($\equiv$ changes $\underline{n}$) by spontaneous emission. Since

$$l_{final}=0 \quad , \quad l_{initial}=2$$

lo mínimo, se entiende...

(final state is the ground state $n=1, l=0$, initial state is $n=4, l=2$) are necessary two steps considering that

$$\Delta l = \pm 1 \quad \text{(dipoler electric transitions)}$$

only. Examples are (I write two sequences)

$$42m \xrightarrow{} 31m' \longrightarrow 100$$

one step   another step

or

$$42m \longrightarrow 21m' \longrightarrow 100 .$$

With $\Delta m = 0, \pm 1$ more explicitly (not necessary though)

$$420 \rightarrow 210 \rightarrow 100$$
$$421 \rightarrow 211 \rightarrow 100$$
$$422 \rightarrow 211 - 100$$
$$42\text{-}1 \rightarrow 210 \rightarrow 100$$
$$420 \rightarrow 310 \rightarrow 100$$
$$\vdots \qquad \vdots \qquad \vdots$$

[$420 \rightarrow 310 \rightarrow 421 \rightarrow 410 \rightarrow 321 \rightarrow 431 \rightarrow \ldots$
Esto no es decaer. Es marear la perdiz.]

---

5 3 To decay from $42m \rightarrow 100$ in one step is not allowed by electric dipoler transitions. How about quadrupoler transitions? Will be allowed if

$$\langle 42m | Q_{ij} | 100 \rangle \neq 0$$

for some $i,j = 1,2,3$ and $m = 2,1,0,-1,-2$.

Here, $\quad Q_{ij} = 3 r_i r_j - \delta_{ij} r^2$

Note first that

$$\langle 42m | r^2 | 100 \rangle = 0 \quad \text{for } \underline{\text{all } m},$$

so we need to consider only the first part, $3 r_i r_j$ of Q_{ij}. Indeed,

$$\langle 42m | r^2 | 100 \rangle = \underbrace{\int_0^\infty dr \ldots r^2}_{\text{radial part}} \underbrace{\int d\Omega \, (Y_2^m)^* \, Y_0^0 \, d\Omega}_{\text{this is a } 0} \equiv 0$$

$Y_2 \perp Y_0$

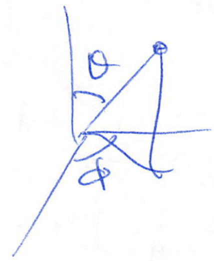
(no es paridad: es porque se compensan)

↑ eso es paridad tb pero alrededor de otro punto.

$$\langle 42m | r_i r_j | 100 \rangle = \ldots$$

r_1, r_2, r_3 are x, y, z

$x = r \sin\theta \cos\phi$
$y = r \sin\theta \sin\phi$
$z = r \cos\theta$



We try some cases. First $m=0$ and $Q_{33} = z^2$ (why? Because the azimuthal angle ϕ is missing and $\int_0^{2\pi} e^{i\phi} d\phi$, $\int_0^{2\pi} \cos\phi$, $\int_0^{2\pi} \sin\phi, \ldots$ are all zero) and the integral $\langle 420 | z^2 | 100 \rangle$ contains a radial part that does not vanish and

$$\left[\begin{array}{l} Y_2^0 \sim 3\cos^2\theta - 1 \\ z^2 \sim \cos^2\theta \\ Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \end{array} \right]$$

del Jacobiano

$$\int_0^\pi d\theta \, (3\cos^2\theta - 1) \cos^2\theta \cdot \sin\theta$$

no $\int_{-\pi}^{\pi}$

$$= \int_0^\pi d\theta \, (3\cos^4\theta - \cos^2\theta) \sin\theta$$

$$= \left[-\frac{3}{5}\cos^5\theta + \frac{1}{3}\cos^3\theta \right]_0^\pi$$

$$= -\frac{3}{5}[-1-1] + \frac{1}{3}[-1-1] = \frac{6}{5} - \frac{2}{3} = \frac{8}{15}$$

not zero. [Bingo!!]

Then,

$$\langle 420 | Q_{33} | 100 \rangle \neq 0$$

other cases that do not vanish are

in $(Y_2^2)^*$

$$\int d\Omega \, (Y_2^2)^* x^2 Y_0^0 = \dots \underbrace{\int_0^{2\pi} d\phi \, e^{-2i\phi} \cos^2\phi}_{} \; \underbrace{\int_0^{\pi} d\theta \, \sin^2\theta \, \sin^2\theta \, \sin\theta}_{}$$

$x = r\sin\theta\cos\phi$ in x^2 in x^2

$$\int_0^{\pi} d\theta \, \sin^5\theta = \frac{16}{15}$$

immediate (5)
$\sin^5\theta = (1-\cos^2\theta)^4 \sin\theta$

$$\int_0^{2\pi} d\phi \, e^{-i2\phi} \left(\frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2} \right)^2$$

$$= \frac{1}{4} \int_0^{2\pi} d\phi \left(1 + e^{-4i\phi} + 2e^{-2i\phi} \right)$$

$$= \frac{1}{4} \left[2\pi + 0 + 0 \right]$$

conclusion: $\langle 422 | \underbrace{x^2}_{Q_{11}} | 100 \rangle \neq 0$; also $\langle 422 | \underbrace{y^2}_{Q_{22}} | 100 \rangle \neq 0$

More

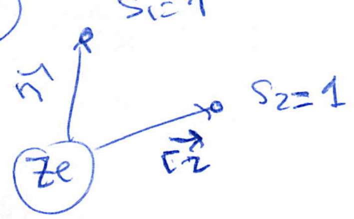
$\langle 421 | xz | 100 \rangle \neq 0$, $\langle 421 | yz | 100 \rangle \neq 0$

but $\langle 420 | xy | 100 \rangle = 0$ (due to ϕ: $\sin\phi\cos\phi \sim \sin 2\phi$

and $\langle 421 | x^2 | 100 \rangle = 0 = \langle 421 | y^2 | 100 \rangle = \langle 421 | z^2 | 100 \rangle$

---

(6)



$Z = 2$

These particles are bosons. (s = integer)
The wave function has to be symmetric,

$$\underbrace{S_1 = 1 \qquad S_2 = 1}_{}$$

$$S_{12} = 2, 1, 0$$

5 states, 3, 1

9 states: m_{s1} $\begin{matrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{matrix}$ $\times$ m_{s2} $\begin{matrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{matrix}$

lo que pide el ejercicio: 9

→ or more

Symmetric wavefunction have $S+1 = 6$ states.

Bosons = [can be two particles in the same states ...]

$\psi = \psi_{100}(\vec{r}_1)\,\psi_{100}(\vec{r}_2)$

[S, ms]: notation →

[2,2]
[2,1]
[2,0] $S_{12}=2$; $m_{S12} = -2,-1,0,1,2$ 5 states
[2 -1]
[2 -2]

[0 0] $S_{12}=0$; $m_{S12}=0$ 1 state.

where

See how the states are symmetric: [. .] = | . . ⟩

$S_{12}\ m_{S12}$ = $S_1\ m_{S1}$ ⊗ $S_2\ m_{S2}$

$[2\,2] = [1\,1] \otimes [1\,1]$

$[2\,1] = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[[1\,1]\otimes[1\,0] + [1\,0]\otimes[1\,1]\Big]$

reconstruyo los estados porque me salen a coste 0.

$[2\,0] = \frac{1}{\sqrt{6}}[1,1]\otimes[1,-1] + \sqrt{\frac{2}{3}}[1,0]\otimes[1,0] + \frac{1}{\sqrt{6}}[1,-1]\otimes[1\,1]$

$[2\,{-1}] = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big[[1\,{-1}]\otimes[1\,0] + [1\,0]\otimes[1\,{-1}]\Big]$

$[2\,{-2}] = [1\,{-1}]\otimes[1\,{-1}]$

$[0\,0] = \frac{1}{\sqrt{3}}[1\,1]\otimes[1\,{-1}] - \frac{1}{\sqrt{3}}[1\,0]\otimes[1\,0] + \frac{1}{\sqrt{3}}[1\,{-1}]\otimes[1\,1]$

obtained with Clebsch-Gordan tables

read in this way

$S_1 \times S_2$: 1×1

m_{S1}	m_{S2}	S_{12} = 0, m_{S12} = 0
1	-1	1/3
0	0	-1/3
-1	1	1/3