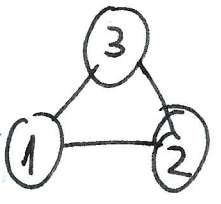


Dinámica

④ Molécula cúbica tratómica



$|\psi_m\rangle$: estado de un electrón localizado en el átomo m
 $m=1, 2, 3$. $\langle \psi_m | \psi_m \rangle = \delta_{mm}$

• Si despreciamos la posibilidad de que el e^- salte de un átomo a otro $|\psi_m\rangle$ es autoestado de \hat{H} con autovalor E_0 .

• Se define el op. de transición R según: $R|\psi_m\rangle = |\psi_{m+1}\rangle$ donde

$R|\psi_3\rangle = |\psi_1\rangle$ (utilizando \cdot e. $3+1 \equiv 1$)

a) Calcular los autovalores y autoestados de \hat{R} .

Se puede hacer de dos formas \rightarrow diagonalizar R en forma matricial

$R|\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle, R|\psi_2\rangle = |\psi_3\rangle, R|\psi_3\rangle = |\psi_1\rangle$

$R = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ en la base $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle\}$

Otra forma:

$R^3|\psi_m\rangle = R^2|\psi_{m+1}\rangle = R|\psi_{m+2}\rangle = |\psi_{m+3}\rangle = |\psi_m\rangle \forall m$

$\Rightarrow \hat{R}^3 = \mathbb{I} \Rightarrow$ Si λ es autovalor de \hat{R} , entonces $\lambda^3 = 1$

Teorema de De Moivre

Si tenemos dos no complejos no nulos:

$\left\{ \begin{aligned} z &= |z|e^{i \arg(z)}; w = |w|e^{i \arg(w)} \\ \arg(zw) &= \arg(z) + \arg(w) + 2k\pi, \end{aligned} \right\}$

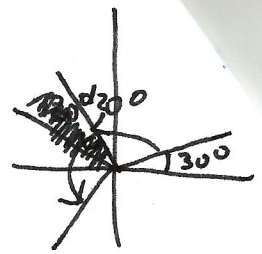
$\Rightarrow \arg(z^m) = m \arg(z) + 2k\pi$, $k \in \mathbb{Z}, m \in \mathbb{Z}$

$\arg(\lambda^3) = 3 \arg(\lambda) + 2\tilde{k}\pi \Rightarrow \arg(\lambda) = \frac{2}{3}k\pi \rightarrow k=0, 1, 2$

Para lo tanto

$$\lambda_1 = 1; \quad \lambda_2 = e^{i \cdot \frac{2}{3}\pi} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-1 + \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} i \right]$$

$$\lambda_3 = e^{i \cdot \frac{4}{3}\pi} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-1 - \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} i \right]$$



$$\lambda_2 \lambda_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-1 + \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} i \right] \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} \left[-1 - \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} i \right] = \frac{1}{2} + \frac{3}{2} = 2$$

Las autoestructuras son

$$|\lambda_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle)$$

$$|\lambda_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (\lambda_3 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle)$$

$$|\lambda_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (\lambda_2 |\psi_1\rangle + \lambda_3 |\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle)$$

$$R|\lambda_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [\lambda_3 |\psi_2\rangle + \lambda_2 |\psi_3\rangle + |\psi_1\rangle]$$

$$= \frac{\lambda_2}{\sqrt{3}} [\lambda_3 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle]$$

$$\lambda_3 \lambda_2 = 1 \Rightarrow \frac{\lambda_2}{\sqrt{3}} = \frac{1}{\sqrt{3}}$$

$$\lambda_2^2 = \lambda_3$$

¿De dónde salen?

Solamos que $R|\lambda_j\rangle = \lambda_j |\lambda_j\rangle$, ni expresamos esto en la base $\{|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle, |\psi_3\rangle\}$:

$$R|\psi_m\rangle = |\psi_{m+1}\rangle$$

$$R \sum_m |\psi_m\rangle \langle \psi_m | \lambda_j \rangle = \sum_m \lambda_j |\psi_m\rangle \langle \psi_m | \lambda_j \rangle \Rightarrow$$

$$R \psi_{m+1} | \lambda_j \rangle = \lambda_j \langle \psi_m | \lambda_j \rangle \Rightarrow \frac{1}{\lambda_j} \langle \psi_{m+1} | \lambda_j \rangle = \langle \psi_m | \lambda_j \rangle$$

FÓRMULA RECURRENTE

$$\langle \psi_1 | \lambda_j \rangle = \frac{1}{\lambda_j} \langle \psi_3 | \lambda_j \rangle \stackrel{N}{=} \frac{N}{\lambda_j} \stackrel{R}{=} \frac{1}{\lambda_j} N \lambda_j^2 = N \lambda_j$$

$$\langle \psi_3 | \lambda_j \rangle = \frac{1}{\lambda_j} \langle \psi_2 | \lambda_j \rangle \stackrel{N}{=} N$$

$$\langle \psi_2 | \lambda_j \rangle = \frac{1}{\lambda_j} \langle \psi_1 | \lambda_j \rangle \stackrel{R N \lambda_j}{=} N \lambda_j$$

$$|\gamma\rangle = N \left[\lambda_1^2 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle \right]$$

27/4
②

Como $|\lambda_j| = 1 \Rightarrow \langle \lambda_j | \lambda_j \rangle = 1 \Leftrightarrow N^2 = \frac{1}{\sqrt{3}}$

$$\therefore |\lambda_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle \right]$$

$$|\lambda_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[\lambda_3 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle \right] \quad \checkmark$$

$$|\lambda_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[\lambda_2 |\psi_1\rangle + \lambda_3 |\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle \right]$$

Notar que como H_0 es diagonal, entonces $\{|\lambda_j\rangle\}$ son los autoestados de \hat{H}_0 .

b) Se agrega al hamiltoniano el término suplementario \hat{W} tal que:

$$W|\psi_m\rangle = -\underbrace{V_0}_{>0} (|\psi_{m-1}\rangle + |\psi_{m+1}\rangle) \quad (\text{permite que el } e^- \text{ pueda saltar de un átomo a otro})$$

Notar que $[H, R] = 0$ (donde $H = H_0 + W$)

Determinar los autoestados de \hat{H} . ¿Está diagonalizado el estado fundamental?

Hay que pensar de resolver esto \rightarrow ① Notarí mucho en los $\{|\psi_m\rangle\}$ soluciones:

$$HR - R H \rightarrow \text{MOLESTO EN } 3 \times 3.$$

Emplear los operadores H y R como ket-bra \rightarrow menor molesto.

Uso defensivo de R :

$$HR|\psi_m\rangle = \underbrace{H}_H|\psi_{m+1}\rangle = E_0|\psi_{m+1}\rangle - V_0[|\psi_m\rangle + |\psi_{m+2}\rangle]$$

$H_0 + W$

$$RH|\psi_m\rangle = R(E_0|\psi_m\rangle - V_0(|\psi_{m-1}\rangle + |\psi_{m+1}\rangle)) = HR|\psi_m\rangle$$

$$\Rightarrow (HR - RH)|\psi_m\rangle = [H, R]|\psi_m\rangle = 0 \quad \forall m \Rightarrow [H, R] = 0$$

④ Otra forma:

$$R^+ = \sum_j \lambda_j^* |\lambda_j\rangle \langle \lambda_j|$$

$$R = \sum_j \lambda_j |\lambda_j\rangle \langle \lambda_j|$$

como $|\lambda_j|^2 = 1 \Rightarrow RR^+ = I$

(Tiene sentido $\langle \psi_m | \psi_m \rangle = 1 =$
 $= \langle \psi_m | R^+ R | \psi_m \rangle$
 $\langle \psi_{m+1} | \psi_{m+1} \rangle$)

$$\Rightarrow \boxed{R^+ = R^{-1}}$$

$$\therefore W|\psi_m\rangle = -V_0 \left(\underbrace{R|\psi_m\rangle}_{|\psi_{m+1}\rangle} + \underbrace{R^+|\psi_{m+1}\rangle}_{|\psi_{m-1}\rangle} \right) \Rightarrow \boxed{\hat{W} = -V_0(\hat{R} + \hat{R}^+)} \quad *$$

De esta expresión y de mostrar cómo opera \hat{R} , es obvio que $[H, R] = [H_0 + W, R] = 0$

Como H y R conmuta comparte uno los de autovalores en común. De $*$ se traza un que ésta es $\{|\lambda_1\rangle, |\lambda_2\rangle, |\lambda_3\rangle\}$

$$\hat{H}|\lambda_j\rangle = (H_0 + W)|\lambda_j\rangle = (E_0 - V_0(\lambda_j + \lambda_j^*))|\lambda_j\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{E_j = E_0 - 2V_0 \text{Re}(\lambda_j)}$$

muchs energías.

estado fundamental \rightarrow Es el de menor energía - i.e. el ψ tal que

maximiza $Re(\lambda_j) \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} |\lambda_1\rangle \text{ es el estado fundamental} \\ \text{con energía } E_1 = E_0 - 2V \end{array} \right.$

$|\lambda_2\rangle$ y $|\lambda_3\rangle$ están degenerados y tienen energía $E_0 + V_0$

$\frac{E_0 + V = E_0}{\text{Estado EXCITADO}} \quad |\lambda_1\rangle, |\lambda_2\rangle$

$\frac{E_0 - 2V = E_{fund}}{\text{Estado superio mín}} \Rightarrow \left(\frac{1}{\sqrt{3}} (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle) \right)$
 El estado fundamental no está localizado.

© Inicialmente el e^- está en el átomo 1: $|\psi_0\rangle = |\psi_1\rangle$

Hallar ~~$P(\psi_1 | \psi_0)$~~ la probabilidad de que el e^- está en

~~átomo~~ en átomo m a $t \geq 0$, i.e. $P(\psi_m | \psi(t))$

$$|\psi(t)\rangle = U(t) |\psi_0\rangle = U(t) \sum_j \underbrace{\langle \lambda_j | \psi_0 \rangle}_{|\psi_1\rangle} |\lambda_j\rangle =$$

$$= \frac{U(t)}{\sqrt{3}} \left[\frac{1}{\sqrt{3}} |\lambda_1\rangle + \frac{\lambda_3}{\sqrt{3}} |\lambda_2\rangle + \frac{\lambda_2}{\sqrt{3}} |\lambda_3\rangle \right]$$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \left[e^{-i \frac{E_1}{\hbar} t} |\lambda_1\rangle + \frac{\lambda_3}{\sqrt{3}} e^{-i \frac{E_0}{\hbar} t} |\lambda_2\rangle + \frac{\lambda_2}{\sqrt{3}} e^{-i \frac{E_0}{\hbar} t} |\lambda_3\rangle \right]$$

Hay que resolver como en casa:

$$P(\psi_0 | \psi(t)) = |\langle \psi_0 | \psi(t) \rangle|^2 = \left| \frac{1}{3} e^{-i \frac{E_0 + 2V}{\hbar} t} + \frac{2}{3} e^{-i \frac{E_0 + V}{\hbar} t} \right|^2$$

$$= \left| \frac{1}{3} e^{-i \frac{E_0 + V}{\hbar} t} \left(e^{+i \frac{3Vt}{\hbar}} + 2 \right) \right|^2$$

Q hago lo exponencial
 completo o uso lo que ~~está~~ arriba
 de columnas: que $|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |\lambda_1\rangle + \frac{\lambda_3}{\sqrt{3}} |\lambda_2\rangle + \frac{\lambda_2}{\sqrt{3}} |\lambda_3\rangle$

$$= \frac{1}{9} \left| e^{+i \frac{3Vt}{\hbar}} + 2 \right|^2 = \frac{1}{9} \left(e^{+i \frac{3Vt}{\hbar}} + 2 \right) \left(e^{-i \frac{3Vt}{\hbar}} + 2 \right)$$

$$= \frac{1}{9} \left(5 + 4 \cos \left(\frac{3Vt}{\hbar} \right) \right) = \frac{5}{9} + \frac{4}{9} \cos \left(\frac{3Vt}{\hbar} \right)$$

¡Fluctúa con los demás átomos!