

EXÁMENES DE OTROS AÑOS



FISICA CUANTICA, TERCERO CIENCIAS FISICAS, ENERO 2018.

**Advertencia:** Los disparates y el forzar erróneamente una demostración llevan puntuación negativa

- 1.- a) Demostrar que si  $l+m$  es impar entonces  $Y_l^m(\pi/2, \varphi) = 0$ . Utilizar la propiedad de paridad de los armónico esféricos ante la inversión.  
 b) ¿Son ciertas las siguientes relaciones de ortonormalidad referidas a las funciones radiales de los estados estacionarios ligados del átomo hidrogenoide?

$$\int_0^{\infty} R_{n'l}(r) R_{n'l'}(r) r^2 dr = \delta_{ll'}$$

$$\int_0^{\infty} R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) r^2 dr = \delta_{ll'}$$

$$\int_0^{\infty} R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) r^2 dr = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \rightarrow \text{¿No?}$$

4 puntos

- 2.- Un sistema cuántico tiene solo dos estados estacionarios  $|1\rangle$  y  $|2\rangle$  normalizados. El sistema tiene además otros 3 observables  $P$ ,  $Q$  y  $R$ . Determinar el mayor numero posible de autovalores de  $P$ ,  $Q$  y  $R$ , basándose en los siguientes conjuntos de datos experimentales. (Atención: hay un conjunto de datos que es imposible)
- $\langle 1|P|1\rangle = 1/2$ ,  $\langle 1|P^2|1\rangle = 1/4$
  - $\langle 1|Q|1\rangle = 1/2$ ,  $\langle 1|Q^2|1\rangle = 1/6$
  - $\langle 1|R|1\rangle = 1$ ,  $\langle 1|R^2|1\rangle = 5/4$ ,  $\langle 1|R^3|1\rangle = 7/4$

2 puntos

3.- Una partícula de masa  $m$  se encuentra sometida a un potencial de oscilador armónico 3D isótropo de frecuencia  $\omega$ .

- Escribir el hamiltoniano usando coordenadas cartesianas. Dar los valores de las 4 energías más bajas y sus grados de degeneración. Deducir la paridad de los estados estacionarios ante una inversión ( $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ ).
- Dar la forma de los estados estacionarios usando coordenadas esféricas. Escribir la ecuación diferencial que debe satisfacer la parte radial.
- Teniendo en cuenta la paridad de los armónicos esféricos deducir los valores posibles del número cuántico acimutal  $l$  en cada uno de los 4 niveles del apartado (a). La degeneración de dichos niveles es solo esencial o hay también degeneración accidental?

4 puntos



EXERCIO 2018

a) a)  $l+m$  impar  $Y_l^m(\frac{\pi}{2}, \varphi) = 0$ . Paridad de armónicos ante inversión.

$$Y_l^m = N_{lm} \cdot P_l^m(\cos\theta) \cdot e^{im\varphi}$$

Está claro que aunque  $l+m$  sea impar  $e^{im\varphi}$  y  $N_{lm}$  no se anulan.

Para  $Y_l^m(\frac{\pi}{2}, \varphi) = 0$  lo que debe anularse es el polinomio de Legendre

$$P_l^m = \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (1-x^2)^l \quad \left. \vphantom{P_l^m} \right\} P_l^m = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} x^l = 0$$

$$x = \cos\theta \rightarrow \cos\frac{\pi}{2} = 0$$

siempre  $l+m \neq 0 \rightarrow$  lo cual en este caso se cumple

Vemos claramente que  $Y_l^m(\frac{\pi}{2}, \varphi) = 0$ . Ahora, utilizaremos la

propiedad de la paridad. En esféricas, una función es par

si  $f(r, \pi-\theta, \varphi+\pi) = f(r, \theta, \varphi)$  y es impar si  $f(r, \pi-\theta, \varphi+\pi) = -f(r, \theta, \varphi)$

$Y_l^m(\theta, \varphi) = (-1)^l Y_l^m(\pi-\theta, \varphi+\pi) \rightarrow$  paridad de los armónicos esféricos ante la inversión.

$$Y_l^m(\frac{\pi}{2}, \varphi) = (-1)^l Y_l^m(\frac{\pi}{2}, \varphi+\pi)$$

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = f(\theta) e^{im\varphi}$$

$$Y_l^m(\theta, \varphi+\pi) = f(\theta) e^{im(\varphi+\pi)} = (-1)^m f(\theta) e^{im\varphi} = (-1)^m Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$$Y_l^m(\frac{\pi}{2}, \varphi) = (-1)^l (-1)^m Y_l^m(\frac{\pi}{2}, \varphi) = (-1)^{l+m} Y_l^m(\frac{\pi}{2}, \varphi)$$

Como  $l+m$  es impar  $\rightarrow (-1)^{l+m} = -1$

$$Y_l^m(\frac{\pi}{2}, \varphi) = -Y_l^m(\frac{\pi}{2}, \varphi) \Rightarrow \boxed{Y_l^m(\frac{\pi}{2}, \varphi) = 0}$$

b) Est. estacionarios ligados de  $\psi$

$$\int_{-\infty}^{\infty} R_n(r) R_{n'}(r) r^2 dr = \delta_{nn'}$$

$$R_{nl} = N_{nl} \left( \frac{a_0}{2} \right)^{-3/2} \left( \frac{2Zr}{na_0} \right)^l e^{-Zr/na_0} \left[ \frac{2Zr}{na_0} \right]_{n-l}^{2l+1}$$

$$R_{nl} \cdot R_{n'l} = N_{nl} N_{n'l} \left( \frac{a_0}{2} \right)^{-3} \cdot \left( \frac{2Zr}{a_0} \right)^{2l} \frac{1}{n^n n'^n} e^{-\frac{Zr}{a_0} \left( \frac{1}{n} + \frac{1}{n'} \right)} \left[ \frac{2Zr}{na_0} \right]_{n-l}^{2l+1}$$

Para una función de onda que describe un estado concreto, los estados estacionarios siempre pueden tomarse ortogonales entre sí si el hamiltoniano es discreto. Lo que aquí ocurre, los valores propios de  $H$  son  $-\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$ , es decir, los estados estacionarios correspondientes a distintos  $n$  son ortogonales entre sí.

La relación es cierta.

$$\int_0^\infty R_{nl} R_{n'l} r^2 dr = \delta_{ll'}$$

Al cambiar el número cuántico azimutal  $l$   $R_{nl}$  y  $R_{n'l}$  hacen referencia a sistemas con potenciales efectivos diferentes, por lo que las funciones de estos 2 sist. no tienen porque ser ortogonales.

$$\int_0^\infty R_{nl} R_{n'l} r^2 dr = \delta_{ll'} \delta_{nn'}$$

De nuevo, al cambiar  $l$  estamos refiriéndonos a dos sistemas diferentes porque estamos cambiando el potencial, por lo que esta relación de ortogonalidad no se cumple.

2)  $|1\rangle$   $|2\rangle \rightarrow$  normalizados

P, Q, R

$\Delta P \geq 0$  si P es un observable físico (  $\Delta P$  no puede ser un num complejo)

a)  $\langle 1|P|1\rangle = 1/2$      $\langle 1|P^2|1\rangle = 1/4$

Valor medio de un observable:  $\langle \psi|A|\psi\rangle$

$\langle 1|P|1\rangle = \langle P \rangle = 1/2$      $\langle 1|P^2|1\rangle = \langle P^2 \rangle = 1/4$

$(\Delta P)^2 = \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2 = \frac{1}{4} - \left(\frac{1}{2}\right)^2 = 0 \quad \checkmark$

$\langle 1|Q|1\rangle = \frac{1}{2}$      $\langle 1|Q^2|1\rangle = 1/6$      $\langle 1|R|1\rangle = 1$      $\langle 1|R^2|1\rangle = 5/4$

$(\Delta Q)^2 = \frac{1}{6} - \left(\frac{1}{2}\right)^2 < 0 \quad \times$

$(\Delta R)^2 = \frac{25}{16} - 1 > 0 \quad \checkmark$

$|1\rangle$  y  $|2\rangle$  son estados estacionarios  $\rightarrow$  est. estacionarios de H, no de P y Q.

$\bar{P} = \begin{bmatrix} \langle 1|P|1\rangle & \langle 1|P|2\rangle \\ \langle 2|P|1\rangle & \langle 2|P|2\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/2 & a \\ a^* & b \end{bmatrix}$      $a = \langle 1|P|2\rangle \in \mathbb{C}$   
 $b = \langle 2|P|2\rangle \in \mathbb{R}$

$\bar{P}^2 = \begin{bmatrix} \langle 1|P^2|1\rangle & \langle 1|P^2|2\rangle \\ \langle 2|P^2|1\rangle & \langle 2|P^2|2\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle 1|P|1\rangle & \langle 1|P|2\rangle \\ \langle 2|P|1\rangle & \langle 2|P|2\rangle \end{bmatrix}^2 \Rightarrow$

$\begin{bmatrix} 1/4 & \langle 1|P^2|2\rangle \\ \langle 2|P^2|1\rangle & \langle 2|P^2|2\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} + |a|^2 & \frac{a}{2}(1+b) \\ \frac{a^*}{2}(1+b) & |a|^2 + b^2 \end{bmatrix} \Rightarrow \frac{1}{4} = \frac{1}{4} + |a|^2 \Rightarrow \boxed{a=0}$

$\bar{P}$  es una matriz diagonal  $\begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}$  en la base  $|1\rangle$   $|2\rangle \rightarrow |1\rangle$  y  $|2\rangle$

estados estacionarios de P. El autovalor asociado a  $|1\rangle$  es  $1/2$

$\bar{R} = \begin{pmatrix} 1 & a \\ a^* & b \end{pmatrix}$      $\bar{R}^2 = \begin{pmatrix} 3/4 & c \\ c^* & a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1+|a|^2 & a(1+b) \\ a^*(1+b) & |a|^2 + b^2 \end{pmatrix}$

$\frac{3}{4} = |a|^2 + 1 \rightarrow |a| = 1/2$      $\bar{R}^3 = R \cdot R^2$     Podemos sacar cuanto vale b:  $b=1$

$\begin{pmatrix} 3/4 & c \\ c^* & a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ca^* + 3/4 & \frac{3a}{4} + bc \\ da^* + c^* & ac^* + bd \end{pmatrix}$

$\bar{R} = \begin{bmatrix} 1 & 1/2 e^{i\delta} \\ \frac{1}{2} e^{-i\delta} & 1 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{vmatrix} 1-\lambda & 1/2 e^{i\delta} \\ 1/2 e^{-i\delta} & 1-\lambda \end{vmatrix} = (1-\lambda)^2 - \frac{1}{4} = 0 \rightarrow$

$\lambda_1 = 3/2$   
 $\lambda_2 = 1/2$

$\bar{R}$  en la base de sus estados propios  $\bar{R} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

Sus valores propios son  $\boxed{\lambda_1 = 3/2 \quad \text{y} \quad \lambda_2 = 1/2}$

3) Para una dimensión:

$$H = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + \frac{p^2}{2m}$$

$$H \psi_0 = (0 + \frac{1}{2}) \hbar \omega \psi_0 \quad 0 = n$$

$$H \psi_n = (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega \psi_n$$

$$\psi_n = C_n H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) e^{-m\omega x^2 / 2\hbar}$$

$$E_n \quad 3D: \quad \psi_{n_x, n_y, n_z} = \overbrace{C_{n_x} C_{n_y} C_{n_z}}^{C_n} H_{n_x} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) H_{n_y} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} y \right) H_{n_z} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} z \right) e^{-\frac{i\omega}{2\hbar} (x^2 + y^2 + z^2)}$$

$$E = (n_x + \frac{1}{2} + n_y + \frac{1}{2} + n_z + \frac{1}{2}) \hbar \omega$$

$$E_{n_x, n_y, n_z} = (n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}) \hbar \omega$$

$$E_0 = \frac{3}{2} \hbar \omega \quad g = 1$$

$$E_1 = \frac{5}{2} \hbar \omega \quad g = 3$$

$$E_2 = \frac{7}{2} \hbar \omega \quad n_x = 1 \quad n_y = 1 \quad n_x = 1 \quad n_z = 1 \quad n_y = 1 \quad n_z = 1 \quad g = 6$$

$$E_3 = \frac{9}{2} \hbar \omega \quad g = 10 \quad n_x = 2 \quad n_y = 0 \quad n_y = 2 \quad n_z = 2$$

$$r = (x, y, z) \rightarrow -r = (-x, -y, -z)$$

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}(-r) = C_n \cdot H_{n_x} \left( -\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) H_{n_y} \left( -\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} y \right) H_{n_z} \left( -\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} z \right) e^{-\frac{i\omega}{2\hbar} r^2}$$

La paridad viene determinada por los polinomios de Hermite.

La paridad de cada polinomio es  $H_i$   $i = x, y, z$ , por tanto,

la paridad será  $n_x \cdot n_y \cdot n_z$  (que es lo mismo que  $n_x + n_y + n_z$ )

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

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

$$\psi_{n_x, n_y, n_z} = C_n H_{n_x} \left( +\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} r \sin \theta \cos \phi \right) H_{n_y} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} r \sin \theta \sin \phi \right) \cdot H_{n_z} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} r \cos \theta \right) e^{-\frac{i\omega}{2\hbar} r^2}$$

Los  $n$  cuánticos que seguimos recitando son  $n_x, n_y$  y  $n_z$

$$H = \frac{1}{2} m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r \frac{d}{dr} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\phi^2} \right)$$

$$\psi(r, \theta, \phi) = R(r) \cdot Y(\theta, \phi)$$

$$H\psi = E\psi$$

$$\frac{1}{2} m\omega^2 r^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{1}{4} \left( \frac{1}{\sin\theta} + \dots \right) = E$$

$$\frac{1}{2} m\omega^2 r^4 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{4} (\dots) - E r^2 = 0$$

$$\rightarrow \frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{d\psi}{d\theta} \right) + \frac{d^2\psi}{dr^2} = \frac{-2\psi}{r^2}$$

Lo ec. que debe satisfacer ser

$$\lambda = l(l+1)$$

$$\frac{1}{2} m\omega^2 r^4 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r \frac{dR}{dr} \right) + E r^2 = \lambda$$

Como el potencial que está sometido es un potencial central:

$$-\frac{\hbar^2}{2m r^2} \frac{d}{dr} \left( r \frac{dR}{dr} \right) + \left( \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m r^2} \right) R = E R$$

c) En el nivel de más baja energía:  $n=0$

Los armónicos esféricos tienen paridad

$$Y_l^m(\theta, \phi) = N \cdot \underset{\substack{\uparrow \\ \text{paridad } l-m}}{P_l^m(\cos\theta)} \cdot e^{im\phi}$$

$$Y_l^m(\pi-\theta, \phi+\pi) = N \cdot P_l^m(-\cos\theta) e^{im\phi} e^{im\pi} = N(-1)^m P_l^m(-\cos\theta) = N(-1)^m (-1)^{l-m} P_l^m(\cos\theta) =$$

$$\cos(\pi-\theta) = -\cos\theta \parallel = N(-1)^l P_l(\cos\theta) = (-1)^l Y_l^m$$

Los armónicos esféricos tienen paridad  $l$

El nivel de energía  $n=0$  es par  $\rightarrow l$  debe ser par

Para ver si hay degeneración accidental hay que

comprobar si para obtener un valor de energía hacen falta

distintos  $l$

$n=0$	$E = 3/2 \hbar\omega$	$l=0$	$l \text{ par}$
$n=1$	$E = 5/2 \hbar\omega$	$l \text{ impar}$	$l=1$



La degeneración accidental es debido a los diferentes valores de  $l$  que puede tomar  $l$  para una mismo  $n$ . La deg esencial es debido a los diferentes valores de  $m$  para una misma  $l$

$$g_n = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) \rightarrow \text{suma de accidental + esencial}$$

$n=2$   $l$  debe ser par :  $g = \sum_{l=0}^? 2l+1$

$g=6$  Si  $l=2 \rightarrow 2 \cdot 2 + 1 = 5 \rightarrow$  no llegamos a la degeneración, nos falta otro valor de  $l$

$$\boxed{l=2 \quad 0 \quad l=0} \quad \text{DEG ACCIDENTAL}$$

$n=3$   $l$  impar  
 $g=10$

$$10 = \underbrace{2 \cdot 3 + 1}_{l=3} + \underbrace{2 \cdot 1 + 1}_{l=1} = 6 + 1 + 2 + 1$$

$$\boxed{l=3 \quad l=1} \quad \text{DEG ACCIDENTAL.}$$

OCTUBRE 2016

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha^2 (z+\beta)^2} dz = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}$$

1)  $\psi(x) = \left( \frac{\gamma^2}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\frac{\gamma^2 x^2}{2}}$  → estado estacionario

$$E = \frac{\hbar^2 \gamma^2}{2m} \quad \exists V(x)$$

a) Calcular  $\langle x \rangle$ ,  $\langle p \rangle$  y  $\langle V \rangle$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{\gamma^2}{\pi}} e^{-\gamma^2 x^2} x dx = \sqrt{\frac{\gamma^2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma^2 x^2} x dx =$$

$$x^2 = u \quad 2x dx = du \Rightarrow x dx = \frac{du}{2}$$

$$= \sqrt{\frac{\gamma^2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma^2 u} \frac{du}{2} = \sqrt{\frac{\gamma^2}{2\pi}} \left( -\frac{1}{\gamma^2} \right) (e^{-\gamma^2 u}) \Big|_{-\infty}^{\infty} = 0$$

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{d\psi}{dx} dx = \left( \frac{\gamma^2}{\pi} \right)^{1/2} \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma^2 x^2/2} \cdot \frac{-2\gamma^2 x}{2} e^{-\gamma^2 x^2/2} dx =$$

$$= -\sqrt{\frac{\gamma^2}{\pi}} \frac{\hbar}{i} \gamma^2 \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\gamma^2 x^2} dx = 0$$

$$\langle V \rangle \rightarrow \langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle V \rangle$$

Como nos encontramos en un estado estacionario  $\langle E \rangle = E = \frac{\hbar^2 \gamma^2}{2m}$

$$\langle V \rangle = E - \langle T \rangle = E - \frac{\langle p^2 \rangle}{2m}$$

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} -\psi^* \hbar^2 \frac{d^2 \psi}{dx^2} dx = \hbar^2 \sqrt{\frac{\gamma^2}{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma^2 x^2/2} \cdot \left( \gamma^2 e^{-\gamma^2 x^2/2} + \gamma^4 x^2 e^{-\gamma^2 x^2/2} \right) dx =$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{d\psi}{dx} &= -\gamma^2 x e^{-\gamma^2 x^2/2} & \frac{d^2 \psi}{dx^2} &= -\gamma^2 \left( e^{-\gamma^2 x^2/2} + x \cdot (-\gamma^2) x e^{-\gamma^2 x^2/2} \right) \\ &= -\gamma^2 e^{-\gamma^2 x^2/2} + \gamma^4 x^2 e^{-\gamma^2 x^2/2} \end{aligned} \right.$$

$$= \sqrt{\frac{\gamma^2 \hbar^4}{\pi}} \left( \gamma^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma^2 x^2} dx + \gamma^2 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\gamma^2 x^2/2} dx \right) = \sqrt{\frac{\gamma^2 \hbar^4}{\pi}} \left( \sqrt{\pi} + \gamma^4 \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\gamma^2 x^2/2} dx \right)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-\frac{\delta^2 x^2}{2}} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2\delta^3} \quad *$$

$$\frac{2}{2} - \frac{2}{2} =$$

$$\langle p^2 \rangle = \frac{\delta \hbar^2}{\sqrt{\pi}} \left( \delta \sqrt{\pi} + \frac{\sqrt{\pi} \delta}{2x} \right) = \frac{\delta \hbar^2}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{2\delta \sqrt{\pi} + \sqrt{\pi} \delta}{2} \right) = \frac{\hbar^2}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{3\delta \sqrt{\pi}}{2} \right) = \frac{3}{2} \hbar^2 \delta^2$$

$$\langle U \rangle = \frac{\hbar^2 \delta^2}{2m} - \frac{3}{2} \frac{\hbar^2 \delta^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \delta^2}{2m} \rightarrow \text{DEBERÍA DAR } \frac{\hbar^2 \delta^2}{4m}$$

OTRA FORMA

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left( \frac{\delta^2}{\sqrt{\pi}} \right)^{1/4} (\delta^4 x^2 - \delta^2) e^{-\frac{\delta^2 x^2}{2}} + V \cdot e^{-\frac{\delta^2 x^2}{2}} = \frac{\hbar^2 \delta^2}{2m} e^{-\frac{\delta^2 x^2}{2}}$$

$$V = \frac{\hbar^2 \delta^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{2m} \delta^4 x^2 - \frac{\hbar^2 \delta^2}{2m} \rightarrow V = \frac{\hbar^2 \delta^4}{2m} x^2$$

Este potencial es del tipo  $V = ax^n \rightarrow$  se puede aplicar el TME de Virial en 1D para hallar  $\langle U \rangle$  con  $n=2$

$$2\langle T \rangle = n\langle U \rangle = 2\langle U \rangle \rightarrow \langle T \rangle = \langle U \rangle$$

$$\langle E \rangle = \langle T \rangle + \langle U \rangle = 2\langle U \rangle \rightarrow \langle U \rangle = \frac{1}{2} \langle E \rangle$$

Como  $E = \text{cte}$

$$\langle U \rangle = \frac{\hbar^2 \delta^2}{4m}$$

b) Calcular la densidad de probabilidad de momento

$$d = |g(\omega)|^2$$

$$g(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) e^{-i\omega x} dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\delta^2}{\sqrt{\pi}} \right)^{1/4} e^{-\frac{\delta^2 x^2}{2}} e^{-i\omega x} dx$$

$$|g(\omega)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 |e^{-i\hbar x}|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x)|^2 dx = \left(\frac{\gamma^2}{\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma^2 x^2} dx =$$

$$= \left(\frac{\gamma^2}{\pi}\right)^{1/2} \cdot \frac{\pi}{\gamma} = \frac{\gamma}{\pi} \frac{\pi}{\gamma} = \cancel{\gamma} \frac{\pi}{\pi} = \cancel{\gamma} \text{ NO SE PUEDE HACER ASI!}$$

$$g(\omega) = \left(\frac{\gamma^2}{\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\gamma^2 x^2/2} e^{-i\hbar x} dx = \frac{\pi}{\gamma} e^{-(\hbar)^2/4\gamma^2} = \frac{\pi}{\gamma} e^{-\hbar^2/4\gamma^2} \left(\frac{\gamma^2}{\pi}\right)^{1/4}$$

$$\boxed{|g(\omega)|^2 = \frac{\pi}{\gamma} \frac{\gamma^2}{\pi} e^{-\hbar^2/2\gamma^2} = \gamma \pi e^{-\hbar^2/2\gamma^2}}$$

o 2) Demostrar que  $\langle \hat{p} \rangle = 0$  para un estado estacionario ligado.

Usar ec. de mov. de observables y  $t^{me} \in \text{Heisenst.}$

$T^{me}$  Heisenst.:  $\frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} = + \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle$        $\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = - \left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle$

En 3D:

$$\frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle$$

$$\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = - \langle \nabla V \rangle$$

$\langle \hat{p} \rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla$  → la expresión para  $\hat{p}$  no depende explícitamente del tiempo, por lo que:

$$\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle$$

En un estado estacionario ligado  $H\psi = E\psi$   $E$  definida

$$\frac{\hat{p}^2 \psi}{2m} + V\psi = E\psi$$

$$\frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} = \frac{-i\hbar}{i\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{x}] \rangle$$

$$\langle [\hat{H}, \hat{x}] \rangle = \langle \psi | [\hat{H}, \hat{x}] | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{H}\hat{x}\psi - \hat{x}\hat{H}\psi \rangle = \langle \psi | \hat{H}\hat{x}\psi \rangle - \langle \psi | \hat{x}\hat{H}\psi \rangle$$

$$\langle \psi, x H \psi \rangle = \langle x \psi, H \psi \rangle = \langle x \psi, E \psi \rangle = E \langle x \psi, \psi \rangle = E \langle x \rangle$$

↑  
x y H hermiticos

$$\langle \psi, H x \psi \rangle = \langle H \psi, x \psi \rangle = \langle E \psi, x \psi \rangle = \langle E, x \psi \rangle = E \langle x \rangle$$

$$E \langle x \rangle - E \langle x \rangle = 0$$

$\langle [H, x] \rangle = 0$  en un estado estacionario

$$\frac{d \langle \hat{p} \rangle}{dt} = \frac{1}{m} \langle \hat{p} \rangle = 0 \rightarrow \boxed{\langle \hat{p} \rangle = 0}$$

Discutir la hermiticidad de  $D = \frac{d}{dx}$       $D^2 = \frac{d^2}{dx^2}$

$$\langle \psi, D \psi \rangle = \langle \psi, \frac{\partial \psi}{\partial x} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx$$

$$\langle D \psi, \psi \rangle = \langle \frac{\partial \psi}{\partial x}, \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^* \psi dx$$

$$\langle \psi, D \psi \rangle - \langle D \psi, \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx - \int_{-\infty}^{\infty} \left( \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^* \psi dx =$$

$$\langle \psi, \psi \rangle =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \psi \right) dx \neq 0 \quad \left( \text{sele cero si se sumasen} \rightarrow \text{analogue con } \hat{p} \right)$$

Para  $D^2 \rightarrow D^2 = -\frac{1}{\hbar^2} \hat{p}^2$  donde sabemos que  $\hat{p}^2$  si es

hermitico:

luego  $D^2$  si es hermitico.

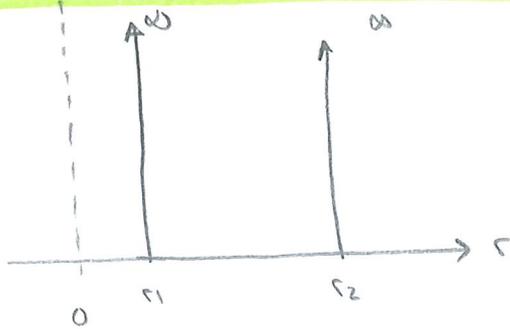
Feb 2004)

1) Energía del estado fundamental de partícula de masa  $m$

remitida al potencial central:

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{para } r_1 \leq r \leq r_2 \\ \infty & \text{para el resto} \end{cases}$$

Para el estado fundamental  $l=0$



Es un pozo de potencial en la variable  $r$ , que se resuelve de la misma forma que el pozo finito en 1D visto en potenciales 1D

La ecuación que debe satisfacerse en la zona  $r_1 \leq r \leq r_2$  es:

$$-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) = ER$$

Cambio de variable  $y = rR$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} y'' = E y \rightarrow k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \rightarrow y = Ae^{ikr} + Be^{-ikr}$$

Condiciones de contorno:  $y(r_1) = 0$   $y(r_2) = 0$

$$y(r_1) = Ae^{ikr_1} + Be^{-ikr_1} = 0$$

$$y(r_2) = Ae^{ikr_2} + Be^{-ikr_2} = 0$$

$$\begin{vmatrix} e^{ikr_1} & e^{-ikr_1} \\ e^{ikr_2} & e^{-ikr_2} \end{vmatrix} = 0$$

$$e^{ik(r_1-r_2)} - e^{-ik(r_1-r_2)} = 2i \sin(k(r_1-r_2)) = 0$$

$$k(r_1-r_2) = n\pi \rightarrow k = \frac{n\pi}{r_1-r_2} \rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2 \pi^2}{(r_1-r_2)^2} \rightarrow E_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m(r_1-r_2)^2}$$

$$Ae^{2ikr_1} = B \rightarrow y = Ae^{ikr} + Ae^{2ikr_1} e^{-ikr} = Ae^{ikr_1} \left( e^{ik(r-r_1)} + e^{ik(2r_1-r)} \right)$$

$$y = Ae^{ikr_1} \cos(k(r-r_1)) \rightarrow y = Ae^{ikr_1} \cos\left(\frac{n\pi}{r_1-r_2}(r-r_1)\right)$$

Si pidiere los estados estacionarios había que tener en cuenta los armónicos esféricos también, que no cambian.

Feb 2004 2)

1) Sistema cuántico con tres estados ortogonales indep:  $(d_1, d_2, d_3)$  que son autoestados de  $W$  con el mismo valor  $w_0$

$A$  y  $B$  son dos dos observables que vienen representados por:

$$A = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad B = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1-i & 0 \\ 1+i & 0 & 1-i \\ 0 & 1+i & 0 \end{pmatrix}$$

$$H = W + \frac{\alpha}{\beta} B \quad \alpha \in \mathbb{R}$$

En  $t=0$  medimos  $B$  y encontramos su máximo autovalor. En un instante posterior, ¿qué resultados se podrían obtener de la medida de  $B$ ?

Después de haber medido  $B$  en el instante  $t=0$ , como hemos obtenido su máximo autovalor, la función de onda cambia instantáneamente al estado asociado al o.p de  $B$ . Diagonalicemos  $B$

$$\det \begin{vmatrix} -2 & \frac{\hbar}{2}(1-i) & 0 \\ \frac{\hbar}{2}(1+i) & -2 & (1+i)\frac{\hbar}{2} \\ 0 & (1+i)\frac{\hbar}{2} & -2 \end{vmatrix} = -2^3 + \frac{2\hbar^2}{2} + \frac{2\hbar^2}{2} = -2^3 + 2\hbar^2 = 0$$

$$\lambda(1 - 2^2 + \hbar^2) = 0 \quad \begin{cases} \lambda = 0 \\ \lambda^2 = \hbar^2 \end{cases} \quad \begin{cases} \lambda = \hbar \\ \lambda = -\hbar \end{cases}$$

Su máximo valor propio es  $\hbar$ . Hallemos su vector propio

$$-\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} -\hbar & \frac{\hbar}{2}(1-i) & 0 \\ \frac{\hbar}{2}(1+i) & -\hbar & (1+i)\frac{\hbar}{2} \\ 0 & (1+i)\frac{\hbar}{2} & -\hbar \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0 \quad \frac{\sqrt{2}}{2} \cdot \frac{2}{\sqrt{2}}$$

$$-\hbar x + \frac{\hbar}{2}(1-i)y = 0 \rightarrow x = \frac{1-i}{2}y$$

$$(1+i)\frac{\hbar}{2}y^2 - \hbar z = 0 \rightarrow \frac{y}{2} + \frac{i}{2}y - 2z = 0 \rightarrow y \left( \frac{1+i}{2} \right) = 2z \rightarrow y = \frac{2}{1+i}z$$

$$\boxed{y = \frac{2}{1+i} \frac{-i+1}{-i+1} z = \frac{2(1-i)}{2} z = (1-i)z}$$

$$\boxed{x = -iz}$$

Justo después de la medida el sistema cambia a

$$\psi = -i\phi_1 + \frac{1-i}{\sqrt{2}}\phi_2 + \phi_3$$

$$H = \begin{pmatrix} \omega_0 & 0 & 0 \\ 0 & \omega_0 & 0 \\ 0 & 0 & \omega_0 \end{pmatrix} + \frac{\alpha}{\beta} \cdot B$$

$$H = \begin{pmatrix} \omega_0 + \frac{\hbar\alpha}{2\beta}(1-i) & 0 & 0 \\ \frac{\hbar\alpha}{2\beta}(1+i) & \omega_0 & 0 \\ 0 & \frac{\hbar\alpha}{2}(1+i)\frac{\alpha}{\beta} & \omega_0 \end{pmatrix}$$

Valores propios  $\begin{cases} \lambda_1 = \omega_0 \\ \lambda_2 = \omega_0 - \sqrt{2 \cdot \frac{\hbar\alpha}{\beta}(1-i)(1+i)\frac{\hbar\alpha}{\beta}} = \omega_0 - \frac{2\hbar\alpha}{2\beta} = \omega_0 - \frac{\hbar\alpha}{\beta} \\ \lambda_3 = \omega_0 + \frac{\hbar\alpha}{\beta} \end{cases}$

$$v_1 = i\phi_1 + \phi_3 \rightarrow \chi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (i\phi_1 + \phi_3)$$

$$v_2 = \frac{1-i}{\sqrt{2}}\phi_1 + \frac{1+i}{\sqrt{2}}\phi_2 + \phi_3 \rightarrow \chi_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \left( -i\phi_1 - \frac{1+i}{\sqrt{2}}\phi_2 + \phi_3 \right)$$

$$v_3 = -i\phi_1 + \frac{1+i}{\sqrt{2}}\phi_2 + \phi_3 \rightarrow \chi_3 = \frac{1}{\sqrt{3}} \left( -i\phi_1 + \frac{1+i}{\sqrt{2}}\phi_2 + \phi_3 \right)$$

Los resultados que podemos obtener de B son siempre sus valores propios: 0,  $\hbar$  y  $-\hbar$

$$\psi(x,0) = \chi_3 \rightarrow \psi(x,t) = \chi_3 e^{-i\omega_0 t / \hbar} e^{-\hbar t / \hbar}$$

Como  $\psi(x,t)$  es un estado propio de B multiplicado por una exponencial, las probabilidades son:

$$P(0) = 0 \quad P(\hbar) = 1 \quad P(-\hbar) = 0$$

b) Si se mide la energía, ¿qué resultados y con qué prob se obtendrán?

Solo se podría obtener  $E_3$  con una probabilidad de 1.

c) Hallar los valores medios de A y de B

$$\langle A \rangle = \langle \psi, A\psi \rangle = \langle \psi^* | A | \psi \rangle$$

↑

en la base de los  $\psi_{k,i}$

$$\psi(t, r) = \frac{1}{\sqrt{3}} \left( -i, \frac{1+i}{\sqrt{2}}, 1 \right) e^{i(\omega_0 + \frac{\hbar k^2}{2m}) \frac{t}{\hbar}}$$

$$\frac{e^{-i(\omega_0 + \frac{\hbar k^2}{2m}) \frac{t}{\hbar}}}{\sqrt{3}} \cdot \begin{pmatrix} +i & \frac{1-i}{\sqrt{2}} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \hbar\sqrt{2} & 0 \\ \hbar\sqrt{2} & 0 & \hbar\sqrt{2} \\ 0 & \hbar\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i \\ 1+i/\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \frac{e^{i(\omega_0 + \frac{\hbar k^2}{2m}) \frac{t}{\hbar}}}{\sqrt{3}} =$$

$$= \frac{1}{3} \cdot \left( \frac{1-i}{2} \hbar \quad \frac{\hbar}{\sqrt{2}} + \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \quad \left( \frac{1-i}{2} \hbar \right) \right) \begin{pmatrix} -i \\ \frac{1+i}{\sqrt{2}} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{3} \cdot \left( -\frac{i-1}{2} \hbar + \frac{(1+i)}{2} (\hbar + \hbar) + \frac{1-i}{2} \hbar \right)$$

$$= \frac{1}{6} \left( -\hbar(1+i) + \hbar(1+i)^2 + \hbar(1-i) \right) = \frac{1}{6} \left( -2i\hbar + \hbar^2 - \hbar + 2i\hbar \right) = \boxed{0 = \langle A \rangle}$$

$$\langle B \rangle = \langle \psi, B\psi \rangle = \frac{\hbar}{2} \frac{1}{3} \begin{pmatrix} i & \frac{1-i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1-i & 0 \\ 1+i & 0 & 1-i \\ 0 & 1+i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -i \\ 1+i/\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{\hbar}{6} \left( \frac{(1-i)(1+i)}{\sqrt{2}} + \frac{i(1-i) + (1+i)}{\sqrt{2}} \quad \frac{(1-i)^2}{\sqrt{2}} \right) \begin{pmatrix} -i \\ 1+i/\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{\hbar}{6} \left( \frac{-2i}{\sqrt{2}} + \frac{2}{\sqrt{2}} (1+i)^2 + \frac{(1-i)^2}{\sqrt{2}} \right) = \frac{\hbar}{6} \left( \frac{-2i}{\sqrt{2}} + \frac{2}{\sqrt{2}} - \frac{2i}{\sqrt{2}} + \frac{4}{\sqrt{2}} - \frac{2i}{\sqrt{2}} \right) = 0$$

$\langle B \rangle = 0$  → ya lo sabemos porque es una cte del mov.

2) Pdo de potencial esféricamente simétrico.

$$\psi(x, y, z) = C(x^2 + y^2 + z^2) e^{-\alpha r^2}$$

¿P de que al medir  $L^2$  se obtenga 0? ¿ $6\hbar^2$ ? ¿al hacer la medida de  $L^2$  resulta  $6\hbar^2$ , ¿qué valores y con qué probabilidades podrá obtenerse  $Lz$ ?

$$\begin{aligned} x &= r \sin\theta \cos\phi & xy + y^2 + z^2 &= r^2 \sin^2\theta \sin\theta \cos\phi + r^2 \cos\theta \sin\theta \sin\theta \cos\phi + r^2 \cos^2\theta \sin\theta \cos\phi = \\ y &= r \sin\theta \sin\phi & &= r^2 \left( \sin^2\theta \frac{e^{i\phi} - e^{-i\phi}}{2i} \cdot \frac{e^{i\phi} - e^{-i\phi}}{2} + \cos\theta \sin\theta \frac{e^{i\phi} - e^{-i\phi}}{2i} \right. \\ z &= r \cos\theta & & \left. + \cos\theta \sin\theta \frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2} \right) = \end{aligned}$$

$$= r^2 \left[ \frac{\sin^2\theta}{4i} (e^{2i\phi} - 1 - e^{-2i\phi}) + \frac{\cos\theta \sin\theta}{2i} (e^{i\phi} - e^{-i\phi}) + \frac{\cos\theta \sin\theta}{2} (e^{i\phi} + e^{-i\phi}) \right] =$$

$$= r^2 \left[ \frac{1}{4i} \sin^2\theta e^{2i\phi} - \frac{1}{4i} \sin^2\theta e^{-2i\phi} + \cos\theta \sin\theta e^{i\phi} \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2i} \right) + \cos\theta \sin\theta e^{-i\phi} \left( -\frac{1}{2} + \frac{1}{2i} \right) \right] =$$

$$= r^2 \left[ \frac{1}{4i} \sqrt{\frac{32\pi}{15}} Y_2^2 - \frac{1}{4i} \sqrt{\frac{32\pi}{15}} Y_2^{-2} + \frac{(1+i)}{2i} \sqrt{\frac{8\pi}{15}} Y_2^1 + \frac{(1-i)}{2i} \sqrt{\frac{8\pi}{15}} Y_2^{-1} \right] = r^2 f(\theta, \phi)$$

Nombre de la parte angular:

$$\frac{32\pi}{15 \cdot 16} + \frac{32\pi}{15 \cdot 16} + \frac{8\pi}{15 \cdot 2} + \frac{8\pi}{15 \cdot 2} = \frac{4}{5} \pi \rightarrow N = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}$$

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cdot f(\theta, \phi) \cdot g(r) \quad g(r) = C \cdot r^2 e^{-\alpha r^2}$$

Solo tenemos los armónicos esféricos correspondientes a  $l=2$ , por lo que el único valor de  $L^2$  que podemos obtener será

$$\hbar^2 l(l+1) \xrightarrow{l=2} \hbar^2 2(2+1) = 6\hbar^2 \rightarrow P(L^2=0) = 0 \quad P(L^2=6\hbar^2) = 1.$$

Al hacer la medida de  $L^2$  resulta  $6\hbar^2 \rightarrow$  cambiamos a la func.

propia de ese dicho valor:  $\psi(r, \theta, \phi) = h(r) \cdot \sum_{m=-2}^{m=2} C_m Y_2^m(\theta, \phi) \rightarrow$  debe estar normalizado.

$$\psi(r, \theta, \varphi) = C \cdot \left( \frac{1}{4i} \sqrt{\frac{32\pi}{15}} y_2^2 - \frac{1}{4i} \sqrt{\frac{32\pi}{15}} y_2^{-2} - \frac{i+1}{2i} \sqrt{\frac{8\pi}{15}} y_2^1 + \frac{i-1}{2i} \sqrt{\frac{8\pi}{15}} y_2^{-1} \right)$$

$$|C|^2 \left( \frac{32\pi}{16 \cdot 15} + \frac{32\pi}{16 \cdot 15} + \frac{8\pi}{15} + \frac{8\pi}{15} \right) = 1 \rightarrow |C|^2 = \frac{3}{4\pi} \rightarrow C = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} e^{i\delta}$$

Los valores de  $m$  que podemos medir serán  $m = \pm 1$  y  $m = \pm 2$

$$P(m=2) = P(m=-2) = 1/10$$

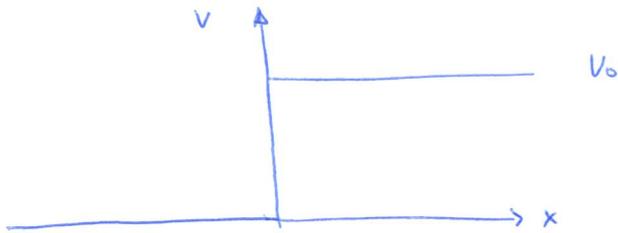
$$P(m=1) = P(m=-1) = 2/5$$

Para  $L_z$  podemos medir  $\pm \hbar$  con una probabilidad de  $2/5$

y  $\pm 2\hbar$  con probabilidad de  $1/10$ .

## PARCIAL 2019

1) Dado un potencial escalón de potencial  $V_0$ , comparar los factores de reflexión y transmisión en la energía para scattering de partículas de izquierda a derecha y de derecha a izquierda.



• Comenzamos con el scattering de izquierda a derecha:

CASO 1: energía menor que el potencial

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Al resolver la ec. de Schrödinger independiente del tiempo para este potencial e imponer la continuidad de nuestra función de onda en  $x=0$  se obtiene que:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + \frac{k-i\kappa}{k+i\kappa} e^{-ikx} \cdot A & x < 0 \\ A \cdot \frac{2\kappa}{k+i\kappa} e^{-\kappa x} & x > 0 \end{cases}$$

Como podemos observar, para  $x > 0$  no hay propagación del paquete de ondas, solamente hay un decaimiento exponencial. Por tanto, al llegar al escalón, todo el paquete de ondas incidente es reflejado:  $R=1$   $T=0$

CASO 2: energía mayor que el potencial. La correspondencia con todas las ecuaciones del caso anterior se da por  $i\kappa \rightarrow k'$ , donde

$$k' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} \quad \text{De esta forma:}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + \frac{k-k'}{k+k'} A e^{-ikx} & x < 0 \\ A \frac{2k}{k+k'} e^{ik'x} & x > 0 \end{cases}$$

Los paquetes de ondas incidente, reflejado y transmitido son, respectivamente:

$$\psi_i(x) = A e^{ikx}$$

$$R = \left| \frac{J_r}{J_i} \right| \quad T = \left| \frac{J_t}{J_i} \right|$$

$$\psi_r(x) = \frac{k-k'}{k+k'} e^{-ikx} \cdot A$$

$$J = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$$

$$\psi_t(x) = \frac{2k}{k+k'} e^{ik'x} \cdot A$$

$$J_i = \frac{\hbar}{2mi} (|A|^2 e^{-ikx} \cdot ik e^{ikx} - |A|^2 e^{ikx} \cdot (-ik) e^{-ikx}) =$$

$$= \frac{\hbar}{2mi} |A|^2 \cdot 2ik = \frac{\hbar k}{m} |A|^2$$

$$J_r = \frac{\hbar}{2mi} \left( \left( \frac{k-k'}{k+k'} \right)^2 |A|^2 \cdot 2ik \right) = \frac{\hbar k}{m} |A|^2 \left( \frac{k-k'}{k+k'} \right)^2$$

$$J_t = \frac{\hbar}{2mi} \left( \left( \frac{2k}{k+k'} \right)^2 |A|^2 \cdot 2ik' \right) = \frac{\hbar k'}{m} \left( \frac{2k}{k+k'} \right)^2 |A|^2$$

$$R_1 = \left( \frac{k-k'}{k+k'} \right)^2 \quad T_1 = \frac{k'}{k} \left( \frac{2k}{k+k'} \right)^2$$

Scattering de derecha a izquierda:

CASO 1. Energía menor que  $V_0$



$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx} & x < 0 \\ C e^{\alpha x} + D e^{-\alpha x} & x > 0 \end{cases}$$

Como  $e^{\alpha x}$  diverge,  $C$  debería ser cero. Este scattering de partículas no es

posible y resulta que, debido a que su energía es menor que  $V_0$ , el paquete nunca llega a propagarse y solo se atenúa, por lo que no tiene sentido hablar ni de  $R$  ni de  $T$ .

CASO 2: energía mayor que  $V_0$  Los exponenciales reales no sirven para componer paquetes de ondas.

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx} & x > 0 \end{cases}$$

↳ este es el incidente.

Como solo nos interesa el scattering de derecha a izquierda  $A=0$

$\psi(x=0) \rightarrow$  continuo. y  $\psi'(x=0)$  también

$$B = C + D$$

$$-ikB = ikC - ikD \rightarrow -ikC - ikD = ikC - ikD \rightarrow C(-k - k') = D(k - k')$$

$$D = \frac{k' + k}{k' - k} C$$

$$B = \frac{k' - k + k + k'}{k' - k} C = \frac{2k'}{k' - k} C$$

$$|J_r| \propto |C|^2 \quad |J_t| \propto |B|^2 \quad |J_i| \propto |D|^2$$

$$R = \left| \frac{J_r}{J_i} \right|$$

$$R_2 = \left( \frac{k' - k}{k + k'} \right)^2 \quad T_2 = \frac{k'}{k} \left( \frac{2k}{k + k'} \right)^2$$

Si lo comparamos con el scattering de izquierda a derecha:

$$\frac{R_1}{R_2} = \frac{(k - k')^2}{(k + k')^2} \cdot \frac{(k + k')^2}{(k' - k)^2} = 1 \rightarrow \text{Son iguales}$$

$$\frac{T_1}{T_2} = \frac{k'}{k} \cdot \left( \frac{2k}{k + k'} \right)^2 \cdot \frac{k}{k'} \cdot \left( \frac{k' - k}{2k} \right)^2 = 1 \rightarrow \text{Son iguales.}$$

2) Razonar si las siguientes cuestiones son verdaderas o falsas

a) La función de onda  $\psi = Ae^{-x^2/2a^2}$  es una función aceptable para una partícula sometida a un pozo finito de potencial.

Para un pozo finito de potencial las únicas condiciones que debe cumplir una función de onda es que sea normalizable, continua y monovaluada, con derivada continua y monovaluada también. Al ser la función una exponencial, es obvio que las dos últimas condiciones se cumplen.

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} |\psi|^2 = 0 \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} |\psi|^2 = 0$$

La afirmación es verdadera.

b) Se tiene un oscilador 3D isotrópico. La función de onda correspondiente al espacio de los estados de energía  $E = \frac{7}{2} \hbar \omega$  tiene paridad definida.

Como la energía está totalmente definida, será un estado estacionario del oscilador. Los est. est. de un oscilador armónico 3D son:

$$\psi_n(x, y, z) = C n_x n_y n_z H_{n_x} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) H_{n_y} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} y \right) \cdot H_{n_z} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} z \right)$$

La paridad de estas funciones es  $n_x + n_y + n_z = n$ . Como la energía

de un oscilador de este tipo es  $E = (n + \frac{3}{2}) \hbar \omega$   $\rightarrow n = 3$ .

La función de onda tiene paridad definida. De hecho, es impar ( $n$  impar)

c) Se tiene un operador definido de la siguiente forma:

$$H = A^* A \quad H \psi_\mu = \mu \psi_\mu \quad \text{y} \quad H \text{ hermitico. Entonces } \mu \geq 0 \text{ y } \mu = 0, 1, 2, \dots$$

$A$  y  $A^*$  son otros dos operadores tal que  $\text{adj}(A) = A^*$

$(A\phi_\mu, A\phi_\mu) \geq 0$  debido a que  $(A\phi_\mu, A\phi_\mu) = \|A\phi_\mu\|^2 \geq 0$

$$(A\phi_\mu, A\phi_\mu) = (A^+ A \phi_\mu, \phi_\mu) = (M\phi_\mu, \phi_\mu) = (\mu\phi_\mu, \phi_\mu) = \mu \|\phi_\mu\|^2 \geq 0$$

Como  $\|\phi_\mu\|^2 \geq 0$  siempre  $\rightarrow \boxed{\mu \geq 0}$

Supongamos que  $A = \hat{x}$  y como  $\hat{x}$  es hermitico:  $A^+ = \hat{x}$

$$M = \hat{x}^2$$

$$M\phi_\mu = \mu\phi_\mu \rightarrow \hat{x}^2 \phi_\mu = \hat{x}(\hat{x}\phi_\mu) = \mu\phi_\mu$$

Los valores propios del operador posición son todos los num. reales

$$\hat{x}(\hat{x}\phi_\mu) = \hat{x}(\alpha\phi_\mu) = \alpha(\hat{x}\phi_\mu) = \alpha^2\phi_\mu = \mu\phi_\mu$$

$\mu = \alpha^2$  y como  $\alpha \in \mathbb{R}$  entonces  $\mu \in \mathbb{R}$  y no tiene por qué ser

un núm. real:  $\boxed{\mu \neq 0, 1, 2, \dots}$

d) Si la matriz asociada a un operador  $\hat{A}$  verifica que

$$A_{ji} = A_{ij}^*, \text{ entonces } \hat{A} \text{ es hermitico NOTACIÓN DIRAC}$$

Tomemos una base en la que escriba la matriz  $A \rightarrow \{|d_i\rangle\}$

Cualquier ket  $|\psi\rangle$  podrá escribirse en función de los  $|d_i\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum_i C_i |d_i\rangle \quad |x\rangle = \sum_j D_j |d_j\rangle \quad \text{los } |d_i\rangle \text{ cumplirán: } \sum_i |d_i\rangle \langle d_i| = 11$$

Relación de completitud  $\nearrow$

$$\langle \psi | A | x \rangle = \langle \psi | \sum_i |d_i\rangle \langle d_i| A | \sum_j |d_j\rangle \langle d_j| x \rangle =$$

$$= \sum_i \sum_j \underbrace{\langle \psi | d_i \rangle}_{C_i^*} \underbrace{\langle d_i | A | d_j \rangle}_{\text{Elemento de matriz } A_{ij}} \underbrace{\langle d_j | x \rangle}_{D_j} = \sum_{ij} C_i^* \cdot A_{ij} \cdot D_j$$

$\left. \begin{aligned} & \text{Si } A_{ij} = A_{ji}^* \rightarrow \\ & \langle \psi | A | x \rangle = \langle A \psi | x \rangle \\ & \text{y } \hat{A} \text{ es} \\ & \text{hermitico.} \end{aligned} \right\}$

$$\langle A \psi | x \rangle = \langle \psi | A^+ | x \rangle^* = \langle \psi | A^+ | x \rangle^* = \sum_{ij} D_j^* A_{ji}^* C_i^*$$

c) En los estados estacionarios ligados  $\bar{J} = 0$

En un estado estacionario  $\psi$  la densidad de probabilidad  $p(r, t) = |\psi|^2$  es ct en el tiempo.

Por la ley de conservación de prob:

$$\frac{dP}{dt} = -\nabla \cdot \vec{J} \rightarrow \nabla \cdot \vec{J} = 0 \rightarrow \vec{J} = \text{cte}$$

↑  
estacionario

Además, los estados estacionarios ligados siempre  $\psi$  pueden tomar reales p.q. la ec. de lo que se deduce es real

$$\bar{J} = \frac{\hbar}{2mc} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) \stackrel{\psi = \psi^*}{=} 0$$

FEB 2006

1) a) Si  $\hat{A}$  conmuta con  $L_x$  y  $L_y$ , también conmuta con  $L_z$  y con  $L^2$

$$L_x = \frac{1}{2} (L_+ + L_-)$$

$$L_y = \frac{1}{2i} (L_+ - L_-)$$

$L^2$  conmuta con  $L_x$  y con  $L_y$ , por lo que se puede encontrar una base de autofunciones comunes a estos tres, es decir, alguna base de  $L^2$  debe ser común a  $L_x$  y a  $L_y$ .

Con  $\hat{A}$  ocurre lo mismo, es decir, toda base de  $A$  debe ser común a  $L_x$  y a  $L_y$

En coordenadas cartesianas, el eje  $z$  no tiene dirección privilegiada  $\rightarrow$  las autofunciones de  $L_x$  y  $L_y$  deben serlo también de  $L_z \rightarrow$

$\hat{A}$  conmuta con  $L_z$  y por tanto también con  $L^2$

$$[L_x, L_y] = L_z \rightarrow L_x L_y - L_y L_x = L_z$$

$$[\hat{A}, L_z] = [A, L_x L_y] - [A, L_y L_x] = L_x [A, L_y] + L_y [A, L_x] - [A, L_y] L_x - [A, L_x] L_y$$

$$= L_x [A, L_y] = 0$$

$$[A, L^2] = [A, L_x^2] + [A, L_y^2] + [A, L_z^2] = 2[A, L_x^2] + 2[A, L_y^2] + 2[A, L_z^2] = 0$$

b)  $R_{n, l=n-1} = N r^{n-1} e^{-\rho \ln a_0}$  Sucesivos radios de los orbitales de

Bolau  $\rightarrow$  múltiplos de  $a_0$

$$|R_{n, l=n-1}|^2 = N^2 r^{2(n-1)} e^{-2\rho \ln a_0}$$

$$\frac{d|R|^2}{dr} = N^2 (2(n-1) r^{2n-3} e^{-2\rho \ln a_0} + r^{2(n-1)} \cdot \frac{-2\rho}{a_0} e^{-2\rho \ln a_0}) = 0$$

$$2(n-1) r^{2n-3} = \frac{2\rho}{a_0} r^{2n-2}$$

$$n(n-1) a_0 = r_{\max}$$

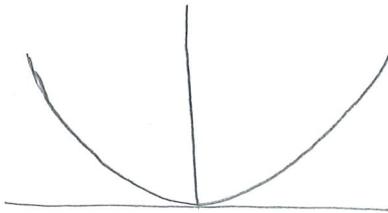
SEPT 2002

2) Considera  $V(x) = V_0 \left( \cosh\left(\frac{x}{a}\right) - 1 \right)$

a) Aproximar a un potencial armónico.

b) ¿Espectro de energías para el potencial aprox?

c) ¿Es la aproximación mejor para valores grandes o pequeños de  $a$



$$V_0 \left( \cosh\left(\frac{x}{a}\right) - 1 \right)$$

Realizaremos una aproximación en serie de Taylor en el punto de equilibrio estable  $x=0$

$$V(x) \approx V(x_0) + \underbrace{V'(x_0)}_0 (x-x_0) + \frac{V''(x_0)}{2} (x-x_0)^2 = V(x_0) + \frac{V''}{2} (x-x_0)^2$$

$$V'(x) = V_0 \left( \sinh\left(\frac{x}{a}\right) \cdot \frac{1}{a} \right) = \frac{V_0}{a} \sinh\left(\frac{x}{a}\right) \quad V''(x) = \frac{V_0}{a^2} \cosh\left(\frac{x}{a}\right)$$

$$V'(x_0=0) = 0$$

$$V''(x=0) = \frac{V_0}{a^2}$$

$$V(x) \approx \frac{V_0}{2a^2} (x-x_0)^2$$

El espectro de energías para un potencial armónico es:

$$E = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega$$

La aproximación es mejor para valores grandes de  $a$ , ya que de este forma  $\frac{x}{a} \ll 1$  y estamos cerca del pto. de eq. estable en el que es correcto realizar una aprox. en serie.

SEPT. 2003

1) la función de onda normalizado del átomo  $H$  del  $H$  del nivel  $1s$ , solución de la ec. Sch. con energía  $E_1$ , es de la forma:  $\psi(r) = A e^{-\alpha r}$

Determinar los constantes  $A$ ,  $\alpha$  y  $E_1$ .

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-bx} dx = \frac{n!}{b^{n+1}} \quad n=0,1,2,\dots \leftarrow \text{apuntar.}$$

La ecuación que nos relaciona la función de onda con la energía para un átomo de  $H$ , en el cual el  $e^-$  está sometido a un potencial central es:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left( V(r) + \frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2\mu r^2} \right) R(r) = E R(r)$$

En el estado fundamental  $\ell=0$ . Cambiamos:  $y = rR$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} y''(r) - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r} y(r) = E y(r)$$

$$y = r \cdot a e^{-\alpha r} \quad y' = a e^{-\alpha r} - \alpha r a e^{-\alpha r}$$

$$y'' = -\alpha a e^{-\alpha r} - \alpha a e^{-\alpha r} + \alpha^2 r a e^{-\alpha r} = -2\alpha a e^{-\alpha r} + \alpha^2 r a e^{-\alpha r}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} (-2\alpha a + \alpha^2 r a) - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0 r} a = E_1 \cdot r$$

$$+\frac{2\alpha a \hbar^2}{2\mu} - \frac{\hbar^2 \alpha^2 r a}{2\mu} - \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0} = E_1 r$$

$$E_1 = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2\mu}$$

$$\frac{2\alpha a \hbar^2}{2\mu} = \frac{2e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

$$\alpha a = \frac{\mu e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}$$

La función de onda debe estar normalizada:

$$\int_0^{\infty} a^2 e^{-2ar} dr = \frac{a^2}{\sqrt{2a}} \pi = 1 \rightarrow a^2 = \sqrt{\frac{2a}{\pi}} \rightarrow a = \left( \frac{2a}{\pi} \right)^{1/4}$$

$$a^5 = \frac{\mu^2 e^2}{4\pi \epsilon_0 \hbar^2} = \frac{2}{\pi} a^5 = 4 \sqrt{\frac{\mu^2 e^2}{4\pi \epsilon_0 \hbar^2}} \rightarrow a^5 = \frac{\pi}{2} \left( \frac{\mu^2 e^2}{4\pi \epsilon_0 \hbar^2} \right)^{1/4}$$

$$\boxed{E_1 = -\frac{\hbar}{2\mu} a^2}$$

$$\boxed{a = \left( \frac{\pi^3 \mu^2 e^2}{64 \epsilon_0 \hbar^2} \right)^{5/4}}$$

$$\boxed{a = \left( \frac{2}{\pi} \right)^{1/4} \left( \frac{\pi^3 \mu^2 e^2}{64 \epsilon_0 \hbar^2} \right)^{5/16}}$$

$$E_1 = -\frac{\hbar}{2\mu} a^2$$

SEPT 2007

1) Reducción del paquete de ondas  $\rightarrow$  los realizar una medida de la función de onda del sistema cambia y su energía ya no está definida  $\rightarrow$  No se puede asociar  $T = E_0 - U$  p.g la energía ya no será  $E_0$

2) Sistema con  $l=1$ . Base del espacio de los estados:  $\chi_{-1}, \chi_0, \chi_{+1}$  con autovalores  $+t\hbar$  o  $-t\hbar$  que satisfacen:

$$L_{\pm} \chi_m = \sqrt{2} t \hbar \chi_{m \pm 1}$$

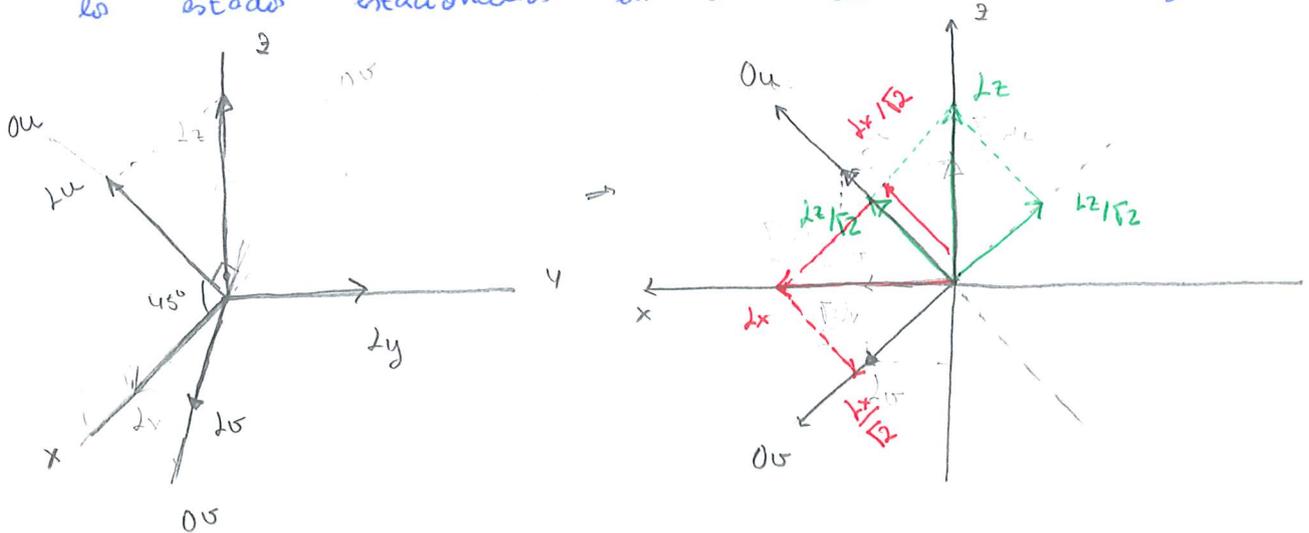
$$L_{\pm} \chi_{\pm 1} = L_{\pm} \chi_{\mp 1} = 0$$

El hamiltoniano del sistema es  $H = \frac{\omega_0}{t\hbar} (L_x^2 - L_y^2)$

$L_u$  y  $L_v$  son los componentes de  $L$  a lo largo de las direcciones  $ou$  y  $ov$  del plano  $xOz$  que forman  $45^\circ$  con los ejes  $Ox$  y  $Oz$ .  $\omega_0 \in \mathbb{R}$

al escribir la matriz que representa a  $H$  en la base dada.

Hallar los estados estacionarios en orden creciente de energía.



$$L_u = \frac{L_z}{\sqrt{2}} + \frac{L_x}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (L_z + L_x)$$

$$L_v = \frac{L_x}{\sqrt{2}} - \frac{L_z}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} (L_x - L_z)$$

$$H = \frac{\omega_0}{\hbar} (L_z^2 - L_x^2) = \frac{\omega_0}{\hbar} \left( \frac{1}{2} (L_z^2 + L_x^2 + 2L_z L_x + L_x L_z) - \frac{1}{2} (L_z^2 + L_x^2 - L_z L_x - L_x L_z) \right) =$$

$$= \frac{\omega_0}{2\hbar} (2L_z L_x + 2L_x L_z) \rightarrow \boxed{H = \frac{\omega_0}{\hbar} (L_z L_x + L_x L_z)}$$

$$[L_z, L_x] = L_z L_x - L_x L_z = i\hbar L_y$$

Los autovalores de  $L_x$  y  $L_y$  son los mismos

$$L_x = \frac{1}{2} (L_+ + L_-)$$

$$L_+ \chi_1 = 0$$

$$L_+ \chi_0 = \sqrt{2}\hbar \chi_1$$

$$L_+ \chi_{-1} = \sqrt{2}\hbar \chi_0$$

$$L_+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\hbar \end{pmatrix} \begin{matrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{matrix}$$

$$L_- \chi_1 = \sqrt{2}\hbar \chi_0$$

$$L_- \chi_0 = \sqrt{2}\hbar \chi_{-1}$$

$$L_- \chi_{-1} = 0$$

$$L_- = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 \\ 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \\ 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{matrix}$$

$$L_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \\ \sqrt{2}\hbar & 0 & \sqrt{2}\hbar \\ 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \end{pmatrix}$$

$$L_z = \begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix}$$

$$L_x L_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \\ \sqrt{2}\hbar & 0 & \sqrt{2}\hbar \\ 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2}\hbar^2 & 0 & -\sqrt{2}\hbar^2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$L_z L_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \hbar & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\hbar \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \\ \sqrt{2}\hbar & 0 & \sqrt{2}\hbar \\ 0 & \sqrt{2}\hbar & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}\hbar^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\sqrt{2}\hbar^2 & 0 \end{pmatrix}$$

$$L_z L_x + L_x L_z = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\boxed{H = \frac{1}{\sqrt{2}} \omega_0 \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}}$$

Hallamos los estados estacionarios

$$H a = \frac{\omega_0 t h}{\sqrt{2}} \quad \begin{vmatrix} -\lambda & a & 0 \\ a & -\lambda & -a \\ 0 & -a & -\lambda \end{vmatrix} = -\lambda^3 + a^2 \lambda + a^2 \lambda = 0$$

$$\lambda = 0 \quad \lambda^2 = 2a^2 \quad \begin{cases} \lambda = \sqrt{2}a \\ \lambda = -\sqrt{2}a \end{cases}$$

$\lambda_1 = 0$       En orden creciente

$$\begin{aligned} \lambda_2 = \omega_0 t h & \rightarrow \lambda_1 = -\omega_0 t h \\ \lambda_3 = -\omega_0 t h & \rightarrow \lambda_2 = 0 \\ & \rightarrow \lambda_3 = \omega_0 t h \end{aligned}$$

$\phi_1$

$$\begin{pmatrix} \omega_0 t h & \omega_0 t h / \sqrt{2} & 0 \\ \omega_0 t h \sqrt{2} & +\omega_0 t h & -\omega_0 t h / \sqrt{2} \\ 0 & -\omega_0 t h / \sqrt{2} & \omega_0 t h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0$$

$$\omega_0 t h x + \frac{\omega_0 t h}{\sqrt{2}} y = 0$$

$$x = -\frac{1}{\sqrt{2}} y$$

$$-\omega_0 t h / \sqrt{2} y + \omega_0 t h z = 0$$

$$z = 1/\sqrt{2} y$$

$$\boxed{\phi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( -\frac{1}{\sqrt{2}} x_1 + x_0 + \frac{1}{\sqrt{2}} x_{-1} \right)}$$

$\phi_2$

$$\frac{\omega_0 t h}{\sqrt{2}} y = 0 \rightarrow y = 0$$

$$\boxed{\phi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_1 + x_{-1})}$$

$$\frac{\omega_0 t h}{\sqrt{2}} x - \frac{\omega_0 t h}{\sqrt{2}} z = 0 \quad x = z$$

$\phi_3$

$$\boxed{\phi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{1}{\sqrt{2}} x_1 + x_0 - \frac{1}{\sqrt{2}} x_{-1} \right)}$$

$$-\frac{1}{\sqrt{2}} x_1 + x_0 + \frac{1}{\sqrt{2}} x_{-1} = \sqrt{2} d_1 \quad [1]$$

$$x_1 + x_{-1} = \sqrt{2} d_2 \quad [2]$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}} x_1 + x_0 - \frac{1}{\sqrt{2}} x_{-1} = \sqrt{2} d_3 \quad [3]$$

$$[1] + [3] \quad 2x_0 = \sqrt{2} (d_1 + d_3)$$

$$x_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (d_1 + d_3)$$

$$[1] - [3] \quad -\frac{2}{\sqrt{2}} x_1 + \frac{2}{\sqrt{2}} x_{-1} = \sqrt{2} (d_1 - d_3)$$

$$[2] \quad x_1 + x_{-1} = \sqrt{2} d_2$$

b) En el instante  $t=0$  el sistema está en el estado

$$\psi(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_{+1} - \chi_{-1})$$

Calcular  $\langle L_x \rangle$ ,  $\langle L_y \rangle$ ,  $\langle L_z \rangle$  en función de  $t$

$$\chi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1 + \phi_3)$$

$$\chi_{-1} = \frac{1}{2} (\phi_1 + \sqrt{2}\phi_2 - \phi_3)$$

$$\chi_1 = \frac{1}{2} (\phi_1 - \sqrt{2}\phi_2 - \phi_3)$$

$$\psi(x, t=0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{1}{2}\phi_1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\phi_2 - \frac{1}{2}\phi_3 - \frac{1}{2}\phi_1 - \frac{\sqrt{2}}{2}\phi_2 + \frac{1}{2}\phi_3 \right)$$

$$\psi(x, t=0) = -\phi_2$$

$$\psi(x, t) = -\phi_2 e^{-iE_2 t / \hbar} = -\phi_2 \rightarrow \text{no hay dependencia temporal porque}$$

la función es un estado estacionario

$$\langle L_x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \ 0 \ 1) \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar}{2} & 0 \\ \frac{\hbar}{2} & 0 & \frac{\hbar}{2} \\ 0 & \frac{\hbar}{2} & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{1}{2} \cdot \frac{\hbar}{2} (1 \ 0 \ 1) \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} =$$

$$= \frac{\hbar}{4} (0 \ 2 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \underline{0}$$

$$\langle L_y \rangle = \frac{1}{2i} \langle L_+ - L_- \rangle = \frac{1}{\sqrt{2} \cdot 2i} (\chi_{+1} - \chi_{-1}, (L_+ - L_-) (\chi_{+1} - \chi_{-1})) = \underline{0}$$

$$\langle L_z \rangle = \frac{1}{2} \hbar (1 \ 0 \ 1) \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (1 \ 0 \ -1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \underline{\hbar}$$

c) Probabilidades de obtener los diferentes medidos de  $L_x^2$  en un instante  $t$ . Suponer que esta medida ha resultado igual a  $\hbar^2/2$ . ¿Cuál es el estado tras la medida? Indicar sin cálculos la es. subyacente del sistema.

$$L_x^2 = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\lambda_1 = \hbar^2 \quad \psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\chi_1 + \chi_{-1}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1 - \phi_3)$$

$$\lambda_2 = 0 \quad \psi_2 = \chi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1 + \phi_3)$$

$$\lambda_3 = 0 \quad \psi_3 = \frac{1}{\sqrt{2}} (-\chi_1 + \chi_{-1}) = -\phi_2$$

$$P(0) = 1$$

$$\psi(x,t) = -\phi_2 \quad < \quad P(\hbar^2) = 0$$

9 Aunque es imposible, suponamos que se ha obtenido  $\hbar^2$ .

Reducción del paquete de ondas:

$$\psi' = c_1 \cdot (\phi_1 - \phi_3) + c_2 \cdot (\phi_1 + \phi_3) = \phi_1 (c_1 + c_2) + \phi_3 (c_2 - c_1)$$

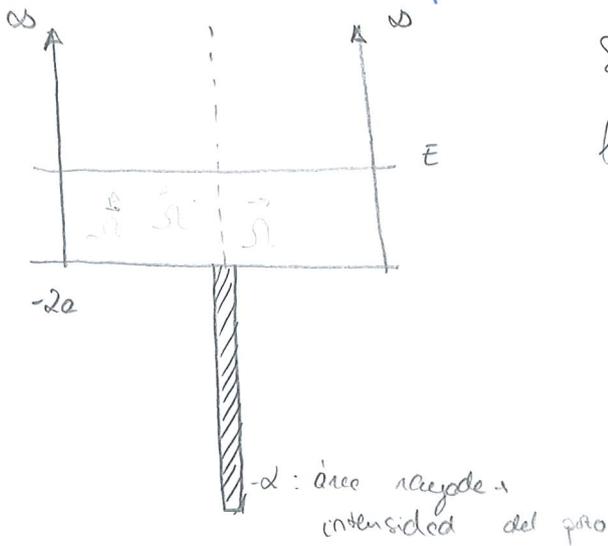
$$\psi' = a\phi_1 + b\phi_3 \Rightarrow \boxed{\psi' = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1 + \phi_3)}$$

$$\boxed{\psi'(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_1 e^{i\omega t} + \phi_3 e^{-i\omega t})}$$

1) Una partícula de masa  $m$  está sometida al potencial:

$$V(x) = \begin{cases} -\alpha \delta(x) & |x| \leq 2a \\ \infty & |x| \geq 2a \end{cases}$$

Obtener la ecuación trascendental que da la cuantización de la energía. Comprobar que cuando  $a \rightarrow \infty$  se logra la energía correspondiente a un potencial aislado en  $V(x) = -\alpha \delta(x)$ .



Si la energía es menor que cero solo hay atenuación y el paquete de ondas no se propaga:  $E < 0$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & -2a < x < 0 \\ Ce^{-ikx} + De^{-ikx} & 0 < x < 2a \end{cases}$$

En los extremos la función se anula:

$$\begin{aligned} Ae^{i2ka} + Be^{-i2ka} &= 0 \rightarrow A = -Be \\ Ce^{-i2ka} + De^{-i2ka} &= 0 \rightarrow D = -Ce \end{aligned}$$

Continuidad en el caso

$$A+B = C+D \rightarrow + B(-e^{i2ka} + 1) = C(1 - e^{-i2ka})$$

$$\boxed{B=C}$$

Discontinuidad de la derivada en 0

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} \psi''(x) dx + \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) \psi(x) dx = E \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) dx$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [\psi'(0^+) - \psi'(0^-)] - \alpha \psi(0) = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [ikC - ikD - ikA + ikB] = \alpha (C+D) \rightarrow B=C \rightarrow$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} [2ikB - ik(D+A)] = \alpha (B+D)$$

$$-\frac{\hbar^2 ik}{2m} (2B - D - A) = \alpha (B+D)$$

$$B \left( -\frac{\hbar^2 ik}{m} - \alpha \right) + D \left( \frac{\hbar^2 ik}{2m} - \alpha \right) + \frac{\hbar^2 ik}{2m} A = 0$$

$$B e^{ikx_0} + A = 0$$

$$B e^{ikx_0} + D = 0$$

$$\begin{vmatrix} -\frac{\hbar^2 ik}{m} - \alpha & \frac{\hbar^2 ik}{2m} - \alpha & \frac{\hbar^2 ik}{2m} \\ e^{ikx_0} & 0 & 1 \\ e^{ikx_0} & 1 & 0 \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow$$

$$\rightarrow e^{ikx_0} \frac{\hbar^2 ik}{2m} + \frac{\hbar^2 ik}{2m} e^{ikx_0} - \alpha e^{ikx_0} + \frac{\hbar^2 ik}{m} + \alpha = 0$$

$$\left( \frac{\hbar^2 ik}{m} - \alpha \right) e^{ikx_0} = - \left( \frac{\hbar^2 ik}{m} + \alpha \right) \Rightarrow \boxed{(-\hbar^2 ik + m\alpha) e^{ikx_0} = (\hbar^2 ik + m\alpha)}$$

$$e^{ikx_0} = \frac{\hbar^2 ik + m\alpha}{m\alpha - \hbar^2 ik}$$

$$a \rightarrow \omega \rightarrow m\alpha = \hbar^2 ik$$

$$k^2 = \frac{-m^2 \alpha^2}{\hbar^2}$$

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{-m\alpha^2}{2\hbar^2} = \underline{\underline{E_0}}$$

2) Una partícula de masa  $m$  está sometida a un pozo infinito de potencial centrado en el origen. En  $t=0$ , se tiene que:

$$\psi(x, t=0) = \psi_1(x) - 2i\psi_5(x)$$

Donde:

$$\psi_n(x) = c \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \left[ \frac{n\pi}{a} \left( x - \frac{a}{2} \right) \right] \rightarrow \psi_n(x) = \begin{cases} c \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{a} & n \text{ par} \\ c \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{n\pi x}{a} & n \text{ impar} \end{cases}$$

Calcular  $\langle \Delta p \rangle^2(t)$

$\langle p \rangle$

$$\psi_1 = c \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \left[ \frac{\pi}{a} \left( x - \frac{a}{2} \right) \right] \quad \psi_5 = c \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \left( \frac{5\pi}{a} \left( x - \frac{a}{2} \right) \right)$$

$$\frac{\partial \psi_1}{\partial x} = c \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \left[ \frac{\pi}{a} \left( x - \frac{a}{2} \right) \right] \cdot \frac{\pi}{a} \quad \frac{\partial \psi_5}{\partial x} = c \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \left[ \frac{5\pi}{a} \left( x - \frac{a}{2} \right) \right] \cdot \frac{5\pi}{a}$$

$$\left( \frac{\partial \psi_1}{\partial x} \right) = c \sqrt{\frac{2}{a}} \left( \operatorname{sen} \frac{\pi x}{a} - \frac{\pi}{a} \right) \quad \frac{\partial \psi_5}{\partial x} = c \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{5\pi x}{a} \cdot \frac{5\pi}{a}$$

$$\langle \psi_1 | p | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \int_{-a}^a \left( -i \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{\cos \pi x}{a} + 2 \sqrt{\frac{2}{a}} \frac{\cos 5\pi x}{a} \right) \left( c \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{\pi x}{a} \frac{\pi}{a} + 2 \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{5\pi x}{a} \cdot \frac{5\pi}{a} \right) dx =$$

$$= \frac{\hbar}{i} \int_{-a}^a \frac{2}{a} \frac{\pi}{a} \cos \frac{\pi x}{a} \operatorname{sen} \frac{\pi x}{a} = 2i \frac{2}{a} \frac{\pi}{a} \cos \frac{5\pi x}{a} \operatorname{sen} \frac{5\pi x}{a} \cdot \frac{5\pi}{a} + 2i \frac{2}{a} \frac{\pi}{a} \frac{\cos \pi x}{a} \operatorname{sen} \frac{\pi x}{a} + \frac{8}{a} \frac{5\pi}{a} \operatorname{sen} \frac{5\pi x}{a} \cos \frac{5\pi x}{a}$$

función par x impar en intervalo impar.

$$\langle p \rangle = 0$$

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} = -\frac{c\pi}{a} \frac{\pi}{a} \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{\pi x}{a} \quad \frac{\partial^2 \psi_5}{\partial x^2} = -\frac{25\pi^2}{a^2} c \sqrt{\frac{2}{a}} \cos \frac{5\pi x}{a}$$

$$\langle \psi_1 | p^2 | \psi \rangle = -\hbar^2 \frac{2}{a} \int_{-a}^a \left( c \cos \frac{\pi x}{a} - 2 \cos \frac{5\pi x}{a} \right) \left( \frac{-i\pi^2}{a^2} \cos \frac{\pi x}{a} + 2 \frac{25\pi^2}{a^2} \cos \frac{5\pi x}{a} \right) dx =$$

$$= \frac{2\hbar^2}{a^3} \pi^2 a + \frac{2\hbar^2}{a} \cdot \frac{25\pi^2}{a^2} \cdot 0 + \frac{8 \cdot 25\pi^2 \hbar^2}{a^3} a = 202\pi^2 \hbar^2$$

$\Delta p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2$   
 $\Delta p^2 = 202\pi^2 \hbar^2$

2016

1) Sea un potencial de la forma  $V(r) = -\frac{U_0}{2m} \delta(r - a)$  ¿?

2) Sea  $\psi(\vec{r})$  la función de onda asociado a un estado cuántico en un cierto potencial central. Si  $x$  mide  $L_z$ , ¿qué valores y con qué prob  $\alpha$  pueden obtenerse?

Calcular el valor medio de  $L_x$

$$\psi(\vec{r}) = (x + y + 3z) f(r)$$

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

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

$$L_x = \frac{1}{2} (L_+ + L_-)$$

$$Y_l^{\pm 1} = \pm \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi}$$

$$Y_l^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta$$

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

$$y = r \sin\theta \sin\phi$$

$$z = r \cos\theta$$

$$\psi(r, \theta, \phi) = r (\sin\theta \cos\phi + \sin\theta \sin\phi + 3\cos\theta) f(r) =$$

$$= r f(r) \left( \frac{\sin\theta}{2} (e^{i\phi} + e^{-i\phi}) + \frac{\sin\theta}{2i} (e^{i\phi} - e^{-i\phi}) + 3\cos\theta \right) =$$

$$= r f(r) \left( \sin\theta e^{i\phi} \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2i} \right) + \sin\theta e^{-i\phi} \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{2i} \right) + 3\cos\theta e^{i0\phi} \right) =$$

$$= r f(r) \left( -\sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{2i} \right) Y_1^1 + \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{2i} \right) Y_1^{-1} + 3\sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_1^0 \right)$$

Tenemos un  $l$  fijo, en concreto  $l=1$ . Pero  $m$  podemos medir

$m = \pm 1$  y  $m=0$ , por lo que los valores que podemos medir

para  $L_z$  son:  $\hbar$ ,  $-\hbar$  y  $0$

$$P(\hbar) = \frac{\frac{4\pi}{3} \left| \frac{1}{2} + \frac{1}{2i} \right|^2}{\frac{4\pi}{3} \left| \frac{1}{2} + \frac{1}{2i} \right|^2 + \frac{4\pi}{3} \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2i} \right|^2 + 9 \frac{4\pi}{3}} = \frac{4\pi/3}{4\pi/3} = 1/4 = 1/11$$

$$P(-\hbar) = 1/11$$

$$P(0) = 9/11$$

3)

a) Si  $[A, B] \neq 0$  entonces ¿ $[A, H] = [B, H] \neq 0$ ? Justifique la respuesta.

$$(\Delta A \Delta B)^2 \geq -1/4 \langle [A, B] \rangle^2$$

$$(\Delta A \Delta H)^2 \geq -1/4 \langle [A, H] \rangle^2$$

Definimos  $\hat{A} = \hat{x}$  y  $\hat{B} = \hat{p}$

$$[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$$

$$[\hat{A}, \hat{H}] = [\hat{x}, \hat{H}] = [\hat{x}, \frac{\hat{p}^2}{2m}] + [\hat{x}, V(\hat{x})] = \frac{1}{2m} 2\hat{p} [\hat{x}, \hat{p}] =$$

$$= \frac{\hat{p}}{m} [\hat{x}, \hat{p}] = \frac{i\hbar}{m} \hat{p}$$

$$[\hat{B}, \hat{H}] = [\hat{p}, \hat{H}] = [\hat{p}, \frac{\hat{p}^2}{2m}] + [\hat{p}, V(\hat{x})] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} V\psi - V\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} =$$

$$= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial x} \psi + \frac{\hbar}{i} V \frac{\partial \psi}{\partial x} - V\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial x} \psi$$

$$[\hat{p}, \hat{H}] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial x}$$

Entonces, queda claro que  $[\hat{x}, \hat{H}] = \frac{i\hbar}{m} \hat{p} \neq [\hat{p}, \hat{H}] = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial V}{\partial x}$

**FALSO**

b) Calcule la relación de "completitud" para una base discreta en términos de funciones de onda a partir de la relación en notación de direc.

Definimos  $\langle x|x' \rangle = \delta(x-x')$  ya que  $|x\rangle$  y  $|x'\rangle$  son "kets propios" del operador posición y entonces verifican la igualdad anterior.

Tomemos una base del subespacio de los estados que forma nuestro sistema:  $\{ |d_i\rangle \}$ .

Los  $|d_i\rangle$  verificarán la relación de completitud  $\sum_{i=0}^n |d_i\rangle \langle d_i| = \mathbb{1}$

Entonces:

$$\langle x | x' \rangle = \langle x | \sum_i |d_i\rangle \langle d_i| x' \rangle = \sum_i \langle x | d_i \rangle \langle d_i | x' \rangle$$

Multiplicar escalarmente un ket asociado a una función de onda por un ket propio del operador posición es lo mismo de hallar dicha función de onda, tal que:

$$\langle x | d_i \rangle = d_i(x) \quad \langle d_i | x' \rangle = d_i^*(x')$$

$$\sum_i \langle x | d_i \rangle \langle d_i | x' \rangle = \left[ \sum_i d_i(x) d_i^*(x') = \delta(x-x') \right]$$

c) ¿Las autofunciones de  $H$ ,  $L_z$  y  $L^2$  se pueden tomar reales porque la fase es arbitraria?

Las autofunciones de un operador pueden tomarse reales si la ecuación de la que se deducen es real.

$$H\psi = E\psi \rightarrow \frac{\hat{p}^2}{2m} \psi + \hat{V}(x)\psi = E\psi \rightarrow \text{Real} \rightarrow \text{Se pueden tomar reales}$$

$$L^2\psi = \hbar^2 l(l+1)\psi \rightarrow -\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} (\sin\theta \frac{\partial\psi}{\partial\theta}) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} \right) = -\hbar^2 l(l+1)\psi = \text{Real}$$

Sin embargo, para  $L_z$ :

$$L_z\psi = m\hbar\psi \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial\psi}{\partial\phi} = m\hbar\psi \rightarrow \text{No se pueden tomar siempre reales p.g. la ec. no es real.}$$

d) Sí, porque la ec. de la que se deducen es real

Valor medio de  $Lx$  del ejercicio 2

$$Lx = \frac{1}{2} (L_+ + L_-)$$

$$\langle Lx \rangle = \langle \psi, Lx \psi \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi, L_+ \psi \rangle + \frac{1}{2} \langle \psi, L_- \psi \rangle =$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi = \alpha \psi_1^+ + \beta \psi_1^0 + \gamma \psi_1^- \\ \left\{ \begin{array}{l} L_+ \psi_1^+ = 0 \\ L_+ \psi_1^0 = \sqrt{2} \psi_1^+ \\ L_+ \psi_1^- = \sqrt{2} \psi_1^0 \end{array} \right. \\ \left\{ \begin{array}{l} L_- \psi_1^+ = \sqrt{2} \psi_1^0 \\ L_- \psi_1^0 = 0 \\ L_- \psi_1^- = 0 \end{array} \right. \end{array} \right.$$

$$= \frac{1}{2} \langle \alpha \psi_1^+ + \beta \psi_1^0 + \gamma \psi_1^- | \alpha \psi_1^+ + \beta \psi_1^0 + \gamma \psi_1^- \rangle$$

$$= \frac{1}{2} \langle \alpha \psi_1^+ + \beta \psi_1^0 + \gamma \psi_1^-, \alpha \cdot 0 + \beta \cdot \sqrt{2} \psi_1^+ + \gamma \sqrt{2} \psi_1^0 \rangle +$$

$$\frac{1}{2} \langle \alpha \psi_1^+ + \beta \psi_1^0 + \gamma \psi_1^-, \alpha \sqrt{2} \psi_1^0 + \beta \sqrt{2} \psi_1^- + \gamma \cdot 0 \rangle =$$

$$= \frac{1}{2} (\alpha \beta \sqrt{2} + \gamma \beta \sqrt{2}) + \frac{1}{2} (\alpha \beta \sqrt{2} + \gamma \beta \sqrt{2}) = \beta \sqrt{2} (\alpha + \gamma)$$

los  $\sigma_j$  de una matriz tipo  $\begin{pmatrix} 0 & a & 0 \\ a & 0 & a \\ 0 & a & 0 \end{pmatrix}$

son  $\lambda_1 = -\sqrt{2}a$        $\lambda_2 = \sqrt{2}a$   
 $v_1 = (1, -\sqrt{2}, 1)$        $v_2 = (1, \sqrt{2}, 1)$

**Ex**

$\lambda_3 = 0$       El tme de inicial no sirve  
 $v_3 = (1, 0, 1)$       cuando estados no ligados.

HOYAZ Si dicen distribución de prob o  
 densidad de prob estén hablando de  $|\psi|^2$

1. (2 puntos) Escribir en notación de espacio de los estados.  
 Considerando el caso de una partícula de onda.

Para la base continua, comprobar experimentalmente el resultado obtenido:

$$\int \varphi_\alpha^*(x') \varphi_\alpha(x) d\alpha = \delta(x - x')$$

en el caso en el que los  $\varphi_\alpha$  sean los estados estacionarios de la partícula libre.

2. (2 puntos) La función de onda de una partícula de masa  $m$  que se mueve en cierto potencial viene dada en un determinado instante de tiempo por

$$\Psi(x, y, z) = (x + y + z) e^{-\alpha \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \quad (\alpha > 0)$$

Se quiere calcular la probabilidad de que al medir  $L^2$  y  $L_z$  se obtengan, respectivamente,  $2\hbar^2$  y 0.

- ¿Es necesaria alguna información sobre las características del potencial?
- Señala qué otro tipo de información, datos o fórmulas necesitas.  $\rightarrow$  ¿NADA?
- Resumir el procedimiento a seguir para realizar el cálculo suponiendo que dispones de toda la información precisa.

3. (2 puntos)

- demostrar que el vector densidad de corriente de probabilidad  $J(x, t)$  de un estado estacionario en un problema unidimensional no depende de  $x$  ni de  $t$ . ¿Cuánto vale  $J$  si además el estado estacionario es ligado?  $\rightarrow$  aunque no sea ligado vale 0
- Si  $r$  denota la coordenada radial, el operador asociado a la componente radial del momento  $p_r$  está dado por  $p_r = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} r$ . Demostrar que  $p_r, L^2, L_z$  son tres observables que conmutan. Encontrar la forma funcional de las autofunciones comunes a los tres observables.

4. (4 puntos) Considerar un oscilador armónico unidimensional. Se definen los estados coherentes como aquellos que son autoestados del operador aniquilación,  $a\psi_\lambda = \lambda\psi_\lambda$  donde  $\lambda \in \mathbb{C}$  en general.

- Calcular  $\Delta x \Delta p$  para un estado coherente.
- Probar que  $\psi_\lambda = e^{-\frac{|\lambda|^2}{2}} e^{\lambda a^\dagger} \psi_0$  es un estado coherente normalizado, siendo  $\psi_0$  el estado fundamental del oscilador armónico.

Nota: se define la exponencial de un operador  $A$  como otro operador dado por

$$e^A = 1 + A + \frac{A^2}{2} + \dots + \frac{A^n}{n!} + \dots$$

- Hallar la evolución temporal del estado coherente  $\psi_\lambda$  del apartado b), demostrando que la condición de coherencia permanece inalterada en el tiempo.  
 Calcular la probabilidad de que al hacer una medida de la energía resulte un cierto  $E_n$ .
- Hallar el producto escalar de dos estados coherentes como los del apartado b)  $\psi_\lambda \psi_\mu$  correspondientes a distintos valores propios ( $\lambda \neq \mu$ ), demostrando que es no nulo. ¿Contradice esto algún teorema?

Expresiones útiles:

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) \quad p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (a^\dagger - a)$$



2014

1) En notación de Dirac la relación de completitud para bases discretas es:

$$\sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = \mathbb{1}$$

Donde la base  $\{|\psi_i\rangle\}$  es el conjunto de NETS que forman el espacio de los estados  $(E)$  de nuestro sistema concreto.

Para el caso de tener una base continua  $\{|\psi_\alpha\rangle\}$ , la

relación será:

$$\int |\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha| d\alpha = \mathbb{1}$$

Traducimos al lenguaje de las funciones de onda:

La función de onda asociada a un NET  $x$  calcula multiplicando a dicho NET por  $|x\rangle \rightarrow$  NET propio del operador posición

$$\langle x|x'\rangle = \sum_i \langle x|\psi_i\rangle\langle\psi_i|x'\rangle = \sum_i \psi_i(x)\psi_i^*(x') = \delta(x-x')$$

$$\langle x|\psi_i\rangle = \psi_i(x)$$

$$\langle\psi_i|x\rangle = \psi_i^*(x)$$

ya que  $\langle x|x'\rangle$  es la función

de onda asociada a  $|x'\rangle$ , que

es un NET propio del operador posición

$$\langle x|x'\rangle = \int |\psi_\alpha\rangle\langle\psi_\alpha| d\alpha = \int \psi_\alpha(x)\psi_\alpha^*(x') d\alpha = \delta(x-x')$$

$\psi_\alpha \rightarrow$  estados estacionarios de la partícula libre

$$\psi_\alpha(x) = \frac{e^{i\alpha x}}{\sqrt{2\pi}} \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\alpha x} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-i\alpha x'} d\alpha = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\alpha(x-x')} d\alpha = \frac{1}{2\pi} \delta(x-x') = \delta(x-x')$$

2)  $\psi(x,y,z) = (x+y+z) e^{-\alpha \sqrt{x^2+y^2+z^2}}$   $\alpha > 0$

c)  $x = r \sin\theta \cos\phi$   $x^2+y^2+z^2 = r^2$   
 $y = r \sin\theta \sin\phi$   
 $z = r \cos\theta$

$\psi(r,\theta,\phi) = r \left( \frac{\sin\theta}{2} e^{i\phi} + \frac{\sin\theta}{2} e^{-i\phi} + \frac{\sin\theta}{2i} e^{i\phi} - \frac{\sin\theta}{2i} e^{-i\phi} \right) e^{-\alpha r} =$   
 $= r e^{-\alpha r} \left[ \frac{1}{2} e^{i\phi} \sin\theta (1-i) + \frac{1}{2} e^{-i\phi} \sin\theta (1+i) \right]$   
*falta 2 que cancela  $\cos\theta$*   
 $\sqrt{4\pi} Y_0^0$

Escribimos esta función según los armónicos esféricos

$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin\theta e^{\pm i\phi}$   $\sin\theta e^{i\phi} = -\sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_1^1$   
 $\sin\theta e^{-i\phi} = \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_1^{-1}$

$\psi(r,\theta,\phi) = \frac{r e^{-\alpha r}}{2} \left( (1-i) \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_1^1 + \sqrt{\frac{8\pi}{3}} Y_1^{-1} (1+i) \right) + \sqrt{4\pi} Y_0^0$

Esta función es valor propio de  $L^2$ , no porque  $l=1$  y  $l=0$  ya que el # cuántico azimutal es fijo y vale  $l=1$ . Para  $L^2$  el único valor que vamos a medir será el o.p. correspondiente a  $l=1 \rightarrow$  o.p. =  $\hbar^2 l(l+1) = 2\hbar^2$

$\langle P(2\hbar^2) \rangle = 1 \rightarrow P(2\hbar^2) = \frac{|c_1|^2 + |c_2|^2}{\text{norma}}$   $P(0) = \frac{|c_3|^2}{\text{norma}}$

Los o.p. de  $L_z$  son  $m\hbar \rightarrow$  podemos medir solo  $\hbar$  o  $-\hbar$

$\langle P(0) \rangle = 0$  *también 0*

al  $\nabla^2 \psi = -\alpha^2 \psi$  son operadores que se definen como sigue: lo particular

$L_z = xPy - yPx = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} (y \frac{\partial}{\partial x}) - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x \frac{\partial}{\partial y}) = \frac{\hbar}{i} \left( \frac{\partial}{\partial y} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} \right)$

Al resolver la ecuación para los valores propios de ambos dos

Obtenemos:

$$\Delta^2 Y(\theta, \varphi) = a \cdot Y(\theta, \varphi)$$

$$-\hbar^2 \left( \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin^2 \theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \varphi^2} \right) = a \cdot Y$$

Al resolver esta ecuación obtenemos los armónicos esféricos

$$\Delta^2 f(\theta, \varphi) = \frac{\hbar^2}{i} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} = a f \rightarrow \frac{\hbar^2}{i} f' = a f \rightarrow \frac{\partial f}{\partial \varphi} = \frac{a i}{\hbar} f$$

$$\frac{\partial f}{f} = \frac{a i}{\hbar} d\varphi \Rightarrow \ln f = \frac{a i}{\hbar} \varphi + g(\theta) \Rightarrow f = h(\theta) e^{i \frac{a}{\hbar} \varphi}$$

Como la func. debe ser monovaluada:  $|a = m\hbar|$

Las funciones propias son también los armónicos esféricos

NO SE NECESITA NINGUNA INFO MÁS

3)  $\vec{j}(x, t)$  en estado estacionario de  $\psi$  no dep. de  $x$  ni de  $t$

$$a) \frac{\partial \rho(x, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{j}$$

$\rho(x, t)$  es la densidad de probabilidad de un estado estacionario

En los estados estacionarios nada cambia, por lo que  $\rho$  se mantiene cte en el tiempo

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 \rightarrow -\nabla \cdot \vec{j} = 0 \rightarrow \frac{\partial \vec{j}}{\partial x} = 0 \rightarrow \boxed{j = cte}$$

Si el estado estacionario es ligado, quiere decir que la energía

no es continua: los estados estacionarios pueden tomarse reales

$$\boxed{\vec{j}} = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \boxed{0}$$

$\uparrow$   
 $\psi^* = \psi$

porque la ec. de lo que se deduce es real.

$$b) \quad p_r = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} r$$

$L^2$  y  $L_z$  se sabe que conmutan, ya que lo base en común entre ellos son los armónicos esféricos.

Esta claro que  $[p_r, L_z] = 0$  y que  $[p_r, L^2] = 0$ , ya que  $L_z$  y  $L^2$  solo dependen de las coordenadas angulares y  $p_r$  solo depende de la coordena radial, entonces es indiferente el orden en el que se aplican.

$$p_r \cdot f = a \cdot f \quad \hbar - \frac{a i r}{r}$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} r f(r) = a \cdot f(r)$$

$$\frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} (f(r) + r f'(r)) = a f(r) \rightarrow r f'(r) = \frac{a r - \hbar}{\hbar} f(r)$$

$$\frac{f'(r)}{f(r)} = \frac{a r - \hbar}{\hbar r} \rightarrow \ln f = \int \left( \frac{a}{\hbar} - \frac{1}{r} \right) dr = \frac{a i}{\hbar} r - \ln r$$

$$\leftarrow f = \frac{e^{i \frac{a}{\hbar} r}}{\sqrt{2\pi} r}$$

$a \in \mathbb{R} \rightarrow$  los v.p son todos los números reales.  
 $\boxed{a/\hbar = c \rightarrow \text{v.p}}$

Esta función multiplicado por los armónicos esféricos sigue siendo función propia de  $p_r$  y también lo es de  $L^2$  y de  $L_z$ .  
 Luego, la base común de los 3 operadores es:

$$\{ \psi_{mla} \} = \left\{ \frac{e^{i a/\hbar r}}{\sqrt{2\pi} r} Y_l^m(\theta, \phi) \right\}$$

El establecimiento de un valor propio  $mla$  conlleva la determinación de una única func. propia  $\rightarrow L^2, L_z$  y  $p_r$  forman un

4) Oscilador armónico 1D. Estados coerentes:  $a|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$

a)  $\Delta x \Delta p$  para estado coerente

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger)$$

$$\langle x \rangle = \langle \psi | x | \psi \rangle = \langle \psi | \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (a + a^\dagger) | \psi \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [ \langle \psi | a | \psi \rangle + \langle \psi | a^\dagger | \psi \rangle ] =$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} [ \langle \psi | \lambda | \psi \rangle + \langle \psi | \lambda^* | \psi \rangle ] = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\lambda + \lambda^*)$$

$\langle x^2 \rangle$

$$x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (a^2 + a^{\dagger 2} + aa^\dagger + a^\dagger a) \quad aa^\dagger - a^\dagger a = 1$$

$$\langle \psi | x^2 | \psi \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \psi | a^2 | \psi \rangle + \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \psi | a^{\dagger 2} | \psi \rangle + \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \psi | aa^\dagger | \psi \rangle + \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \psi | a^\dagger a | \psi \rangle =$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} (\lambda^2 + \lambda^{*2} + |\lambda|^2 + 1 - |\lambda|^2) = \frac{\hbar}{2m\omega} (\lambda^2 + \lambda^{*2} + 1)$$

$$\langle p \rangle = i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} [ \langle \psi | a^\dagger | \psi \rangle - \langle \psi | a | \psi \rangle ] = i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\lambda^* - \lambda)$$

$$\langle p^2 \rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2} \langle \psi | a^{\dagger 2} + a^2 - a^\dagger a - aa^\dagger | \psi \rangle =$$

$$\langle p^2 \rangle = -\frac{m\hbar\omega}{2} (\lambda^{*2} + \lambda^2 - |\lambda|^2 - 1 + |\lambda|^2) = -\frac{m\hbar\omega}{2} (\lambda^{*2} + \lambda^2 - 1)$$

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (\lambda^2 + \lambda^{*2} + 1) - \frac{\hbar}{2m\omega} (\lambda^2 + \lambda^* + 2|\lambda|^2) =$$

$$= \frac{\hbar}{2m\omega} (1 - 2|\lambda|^2)$$

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = -\frac{m\hbar\omega}{2} (\lambda^{*2} + \lambda^2 - 1) + \frac{m\hbar\omega}{2} (\lambda^{*2} + \lambda^2 - 2|\lambda|^2) =$$

$$= \frac{m\hbar\omega}{2} (1 - 2|\lambda|^2)$$

$$(\Delta x \Delta p)^2 = \hbar^2 (1 - 2|\lambda|^2)^2 \Rightarrow \boxed{\Delta x \Delta p = \hbar (1 - 2|\lambda|^2)}$$

$$b) \psi_2 = e^{-|x|^2/2} e^{2a^\dagger} \psi_0$$

$$a \psi_n = \sqrt{n} \psi_{n-1}$$

$$\psi_0 = \left( \frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/4} \exp \left\{ -\frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right\}$$

$$a^\dagger \psi_n = \sqrt{n+1} \psi_{n+1}$$

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n \psi_0$$

$$e^{2a^\dagger} = e^{1 + 2a^\dagger + \frac{2^2 a^{\dagger 2}}{2} + \dots + \frac{2^n a^{\dagger n}}{n!}}$$

$$e^{2a^\dagger} \psi_0 = \psi_0 + 2\psi_1 + \frac{2^2 \sqrt{2}}{2} \psi_2 + \dots + \frac{2^n}{n!} \sqrt{n!} \psi_n + \dots$$

$$\psi_2 = \left( \psi_0 + 2\psi_1 + \frac{2^2 \sqrt{2}}{2} \psi_2 + \dots + \frac{2^n}{n!} \sqrt{n!} \psi_n + \dots \right) e^{-|x|^2/2}$$

$$\boxed{a \psi_2} = \left( a\psi_0 + 2a\psi_1 + \frac{2^2 \sqrt{2}}{2} a\psi_2 + \dots + \frac{2^n}{n!} \sqrt{n!} a\psi_n + \dots \right) e^{-|x|^2/2}$$

$$= \left( 0 + 2\psi_0 + \frac{2^2 \sqrt{2}}{2} \sqrt{2} \psi_1 + \dots + \frac{2^n}{n!} \sqrt{n!} \sqrt{n!} \psi_{n-1} + \dots \right) e^{-|x|^2/2}$$

$$= \left( 2\psi_0 + 2\psi_1 + \dots + \frac{2^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}} \psi_{n-1} + \frac{2^n}{\sqrt{n!}} \psi_n + \dots \right) e^{-|x|^2/2} = \boxed{2\psi_2}$$

$$c) E_n = (n+1/2)\hbar\omega$$

$$\psi_2(t) = \left( \psi_0 e^{-\frac{iE_0 t}{\hbar}} + 2\psi_1 e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} + \dots + \frac{2^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \psi_n + \dots \right)$$

$$\psi_2 = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n}{\sqrt{n!}} \psi_n \rightarrow \psi_2(t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n}{\sqrt{n!}} \psi_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}$$

$$\boxed{a \psi_2(t)} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} a\psi_n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \sqrt{n} \psi_{n-1}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n}{\sqrt{(n-1)!}} e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \psi_{n-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^{n+1}}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \psi_n = \boxed{2 \cdot \psi_2(t)}$$

$$d) \langle \psi_2, \psi_\mu \rangle = \left( \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^n}{\sqrt{n!}} \psi_n, \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\mu^m}{\sqrt{m!}} \psi_m \right) = \sum_{n,m} \left( \frac{2^n}{\sqrt{n!}} \psi_n, \frac{\mu^m}{\sqrt{m!}} \psi_m \right) =$$

$$= \sum_{n,m} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2^{*n}}{\sqrt{n!}} \frac{\mu^m}{\sqrt{m!}} \psi_n^* \cdot \psi_m dx = \sum_{n,m} \frac{2^{*n} \mu^m}{\sqrt{n!m!}} \delta_{mn} = \boxed{\sum_n \frac{(2^* \mu)^n}{n!}}$$

Esto no contradice ningún  $t$  porque los  $\psi_2$  no son estados estacionarios

## APÉNDICE

- Exámenes resueltos
- Soluciones ejercicios temas 3, 4 y 5
- Función Delta de Dirac ( $\delta(x)$ )
- Resumen de fórmulas
- Tabla de coeficientes CLEBSCH-GORDAN



FEBRERO 2002

2) Describa el espectro del desdoblamiento de un átomo con  $1e^-$  correspondiente a la transición  $3d \rightarrow 3p$  por efecto de:

a) Spin-órbita

b)  $B$  débil

c) En ausencia de campo externo teniendo en cuenta que el núcleo tiene un espín  $I = 1/2$

Reglas de selección:  $\Delta j = 0, \pm 1$  (no de 0 a 0)  $\Delta m_j = 0, \pm 1$

$\Delta m_s = 0$ ;  $\Delta m_l = 0, \pm 1$ ,  $\Delta F = 0, \pm 1$

Si el átomo solo tiene un  $e^- \rightarrow$  átomo hidrogenoide.

Tenemos que ver cómo se desdoblan los estados  $3p$  y  $3d$

analizando los apartados a, b y c con perturbaciones:

$3p \rightarrow n=3, l=1, m_s = -1, 0, 1, s = \frac{1}{2}, m_s = \pm \frac{1}{2}$

$3p \rightarrow g=6 \rightarrow |m_l m_s\rangle \begin{cases} |1-1+\rangle \\ |1-1-\rangle \\ |10+\rangle \\ |10-\rangle \\ |11+\rangle \\ |11-\rangle \end{cases} \xrightarrow{\text{cambiamos de base al estado total } L+S} \begin{cases} |3/2 3/2\rangle = |11+\rangle \\ |3/2 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (|11-\rangle + \sqrt{2}|10+\rangle) \\ |1/2 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} (\sqrt{2}|11-\rangle - |10+\rangle) \\ \vdots \end{cases}$

$3d \rightarrow n=3, l=2, m_s = -2, -1, 0, 1, 2, s = \frac{1}{2}, m_s = \pm 1/2, g=10$

$|m_s\rangle = \{ |1-2+\rangle, |1-2-\rangle, |1-1+\rangle, |1-1-\rangle, |10+\rangle, |10-\rangle, |11+\rangle, |11-\rangle, |12+\rangle, |12-\rangle \}$   
 ↳ podríamos cambiar de base

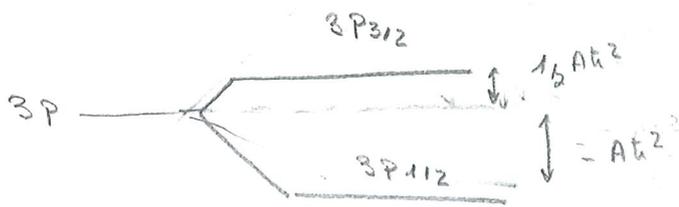
a) la interacción S-O está descrita con el hamiltoniano:

$$\left. \begin{aligned} H &= A \vec{S} \cdot \vec{L} \\ \vec{J} &= \vec{S} + \vec{L} \end{aligned} \right\} E_{L,S,J} = \frac{1}{2} A \hbar^2 [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]$$

luego  $H$  es diagonal en la base de estados  $|JH\rangle$

$3p \rightarrow l=1$  y  $s$  fijos  $\rightarrow E_J = \frac{A \hbar^2}{2} [J(J+1) - \frac{11}{2}]$

$J_{\max} = l+s = 3/2, J_{\min} = 1/2$



$$g = 4 \text{ (view de } m_j) \left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} g_T = 6 \checkmark$$

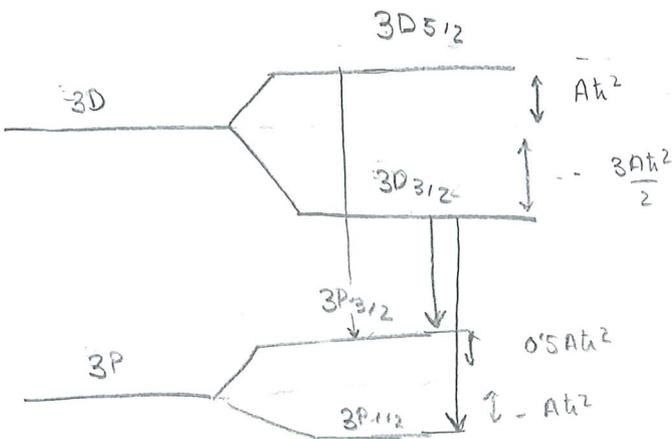
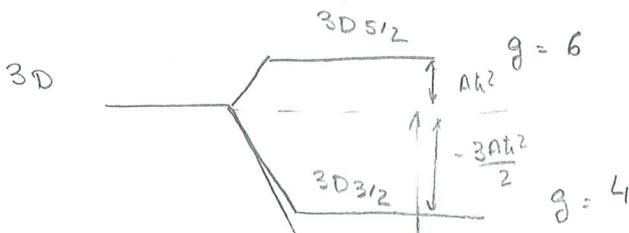
$$g = 2$$

Para el 3d

$$n = 3 \quad l = 2 \quad s = \frac{1}{2}$$

$$J = \frac{5}{2}, \frac{3}{2}$$

$$E_J = + \frac{1}{2} Ah^2 \left( J(J+1) - \frac{27}{4} \right)$$



Hay tres transiciones posibles, por tanto, para un  $e^-$  que pase de un estado 3D a 3P podríamos apreciar 3 líneas de emisión, las correspondientes a  $3D_{5/2} \rightarrow 3P_{3/2}$

$$3D_{3/2} \rightarrow 3P_{3/2} \quad 3D_{3/2} \rightarrow 3P_{1/2}$$

b) El efecto de un campo débil en un átomo hidrogenoide de doble los niveles ya modificados por la interacción espín-orbita, siendo las energías de los niveles doblados:

$$E = g \mu_B B m_j \quad g = \frac{3}{2} + \frac{s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}$$

$g$  es el denominado factor de Landé

3p →  $g = \frac{3}{2} - \frac{5}{8j(j+1)}$

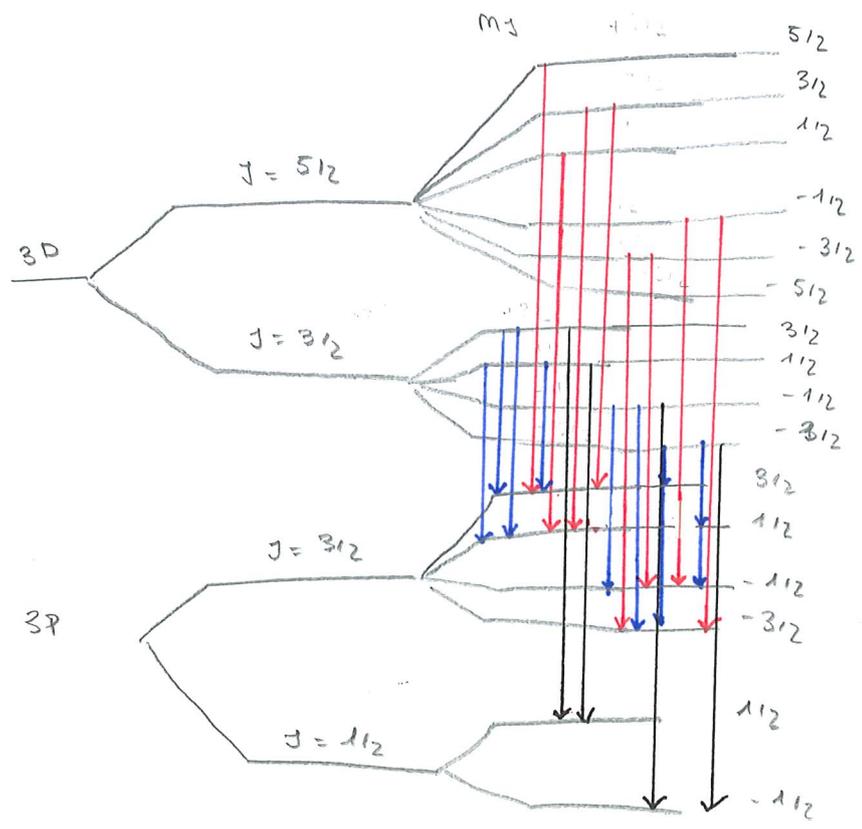
3d →  $g = \frac{3}{2} - \frac{21}{8j(j+1)}$

$E(j = \frac{1}{2}, m_j) = \begin{cases} -\frac{1}{3} \mu_B B \\ \frac{1}{3} \mu_B B \end{cases}$

$E(j = \frac{3}{2}) = \begin{cases} -\frac{6}{5} \mu_B B \\ -2,5 \mu_B B \\ 1,5 \mu_B B \\ 6,5 \mu_B B \end{cases}$

$E(j = \frac{3}{2}, m_j) = \begin{cases} -2 \mu_B B \\ -2,3 \mu_B B \\ 2,3 \mu_B B \\ 2 \mu_B B \end{cases}$

$E(j = \frac{5}{2}) = \begin{cases} -3 \mu_B B \\ -4,5 \mu_B B \\ -3,5 \mu_B B \\ 3 \mu_B B \\ 9 \mu_B B \\ \frac{5}{3} \mu_B B \\ 3,5 \mu_B B \end{cases}$



c) de perturbación aluna es:

$$H = \vec{J} \cdot \vec{S}$$

Solo participan los estados de espin.

Si tenemos en cuenta los estados ya doblados por S=0 el estado de espin no cambia.

$$S = \frac{1}{2} \quad J = \frac{1}{2} \quad \vec{J} = \vec{J} + \vec{S}$$

$$H = \frac{1}{2} (J^2 - S^2 - J^2)$$

En la base de estados comunes, los niveles de energía son:

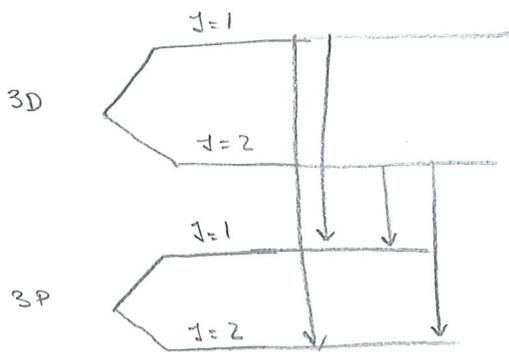
$$E = \frac{1}{2} \hbar^2 (J(J+1) - S(S+1) - J(J+1))$$

S e J están fijos  $J_{\max} = 1$

$$E = \frac{1}{2} \hbar^2 (J(J+1) - 3/4) \quad J_{\min} = 0$$

$$E_1 = -\frac{3\hbar^2}{8} \quad E_2 = -\frac{3\hbar^2}{4}$$

Entonces, cada estado se dobla en otros dos



$$\Delta m_s = 0$$

$$\Delta m_l =$$

No estoy muy seguro.

FEBRERO 2016

21 Al hacer pasar luz a través de un gas de HCl se observa el patrón de la Fig.

La línea ausente corresponde a  $\tilde{\nu}_0 = \frac{\nu_0}{2} = 2890 \text{ cm}^{-1}$ . Dibujar un diagrama de niveles rotovib. indicando los números cuánticos correspondientes. Calcular la ck elástica asociada al potencial,

suponiendo que solo existe  $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ . Calcular también la distancia entre los dos átomos. La dif entre líneas es  $20.5 \text{ cm}^{-1}$

Los niveles rotacionales que derivan de la resolución del potencial nuclear para una molécula tienen unas energías dadas por:

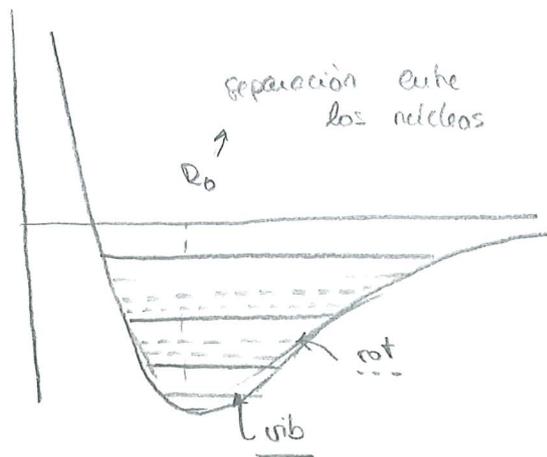
$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2I} J(J+1) \hbar^2$$

La separación entre un nivel y se encuentra en el orden de las microwondas.

Para los niveles vib se tiene  $E_{\text{vib}} = \frac{2^2 e^2}{4\pi \epsilon_0 R_0} + E^e(R_0) + (v + \frac{1}{2}) \hbar \omega$

donde  $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$

Si representamos el potencial nuclear juntos con los niveles vib:



Las transiciones deben cumplir:

$$\Delta n = 0, \pm 1 \quad \Delta l = \pm 1$$

$$E_{\text{rot}} = \frac{1}{2I} J(J+1) \hbar^2$$

$$E_{\text{v}} = \frac{2^2 e^2}{4\pi \epsilon_0 R_0} + E^e(R_0) + (v + \frac{1}{2}) \hbar \omega$$

3) Un haz de átomos de  $s = \frac{1}{2}$  que se encuentran en el autoestado  $S_z$  con autovalor positivo atraviesa Stern-Gerlach:

a) Solo permite el paso de átomos con  $S_z = +\hbar/2$

b) Solo  $S_z = \hbar/2$  con  $S_x = \vec{S} \cdot \hat{u}$   $\hat{u}$  contenido en xoz que forma ángulo  $\beta$  con oz

c) Solo átomos con  $S_z = -\hbar/2$

d) ¿ $I_f/I_0$ ? e) Como debería estar orientado  $\hat{u}$  para maximizar la intensidad del haz final?

Un aparato de Stern-Gerlach permite el paso a átomos cuyo estado coincide con el del aparato.

En primer lugar, tenemos átomos en el estado de espín:  $|+\rangle \rightarrow$  Autovalor de  $S_z$  positivo.  $|\psi\rangle = \sqrt{I_0}|+\rangle$

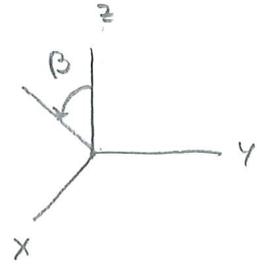
a) Como permite el paso de todos aquellos con valor  $S_z$  positivo, pasan todos los átomos:

$\frac{I_f}{I_0} = 1$  Además, los átomos seguirán en el estado más:  $|+\rangle$

b) En el aparato  $b$  entran átomos en el estado  $\sqrt{I_0}|+\rangle$ . Debemos conocer cuál es la probabilidad de que atraviesen el aparato  $\rightarrow$  hay que construir la matriz de  $S_x$

En general, para una dirección dada por los ángulos  $\theta$  y  $\varphi$ , se tiene que en la base de autoestados de  $S_z$   $|+\rangle, |-\rangle$  la matriz correspondiente al operador de espín en esa dirección es:

$$S_{\vec{u}} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \operatorname{sen} \theta e^{-i\varphi} \\ \operatorname{sen} \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix}$$



En nuestro caso:  $\theta = \beta$   $\varphi = 0$

$$S_{\vec{u}} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \beta & \operatorname{sen} \beta \\ \operatorname{sen} \beta & -\cos \beta \end{pmatrix}$$

$$|+\rangle_u = \cos \frac{\beta}{2} |+\rangle + \operatorname{sen} \frac{\beta}{2} |-\rangle$$

$$|-\rangle_u = \operatorname{sen} \frac{\beta}{2} |+\rangle - \cos \frac{\beta}{2} |-\rangle$$

Vamos a calcular la probabilidad de que pasen los  $e^-$ :

$$P = |\langle +_u | + \rangle|^2 = \left| \cos \frac{\beta}{2} \langle +_+ | + \rangle + \operatorname{sen} \frac{\beta}{2} \langle -_+ | + \rangle \right|^2 = \cos^2 \frac{\beta}{2}$$

Luego la intensidad detectada a la salida del aparato con respecto a la inicial será:

$$\frac{I_b}{I_a} = \frac{I_b}{I_0} = \cos^2 \frac{\beta}{2}$$

El estado con el que emergen estos átomos es:

$$|\psi_b\rangle = \cos \frac{\beta}{2} |+\rangle + \operatorname{sen} \frac{\beta}{2} |-\rangle$$

El aparato c solo deja pasar aquellos con autovalor  $S_z$

negativo:  $|\langle - | \psi_b \rangle|^2 = \operatorname{sen}^2 \frac{\beta}{2}$

$$\frac{I_c}{I_0} = \frac{I_0 \cos^2 \frac{\beta}{2} \cdot \operatorname{sen}^2 \frac{\beta}{2}}{I_0} = \cos^2 \frac{\beta}{2} \operatorname{sen}^2 \frac{\beta}{2}$$

Luego, la intensidad final del haz emergente será:

$$\frac{I_f}{I_0} = \cos^2 \frac{\beta}{2} \operatorname{sen}^2 \beta_{1/2}$$

Para maximizar esta intensidad:

$$\frac{d(I_f/I_0)}{d\beta} = -2 \cos \frac{\beta}{2} \cdot \operatorname{sen} \frac{\beta}{2} \cdot \frac{1}{2} \cdot \operatorname{sen}^2 \frac{\beta}{2} + \cos^2 \frac{\beta}{2} \cdot 2 \cdot \operatorname{sen} \frac{\beta}{2} \cdot \cos \frac{\beta}{2} \cdot \frac{1}{2} =$$

$$= -\cos \frac{\beta}{2} \cdot \operatorname{sen}^3 \frac{\beta}{2} + \cos^3 \frac{\beta}{2} \cdot \operatorname{sen} \frac{\beta}{2} = 0$$

$$\cos \frac{\beta}{2} \operatorname{sen} \frac{\beta}{2} \left( -\operatorname{sen}^2 \frac{\beta}{2} + \cos^2 \frac{\beta}{2} \right) = 0$$

$$\cos \frac{\beta}{2} \operatorname{sen} \frac{\beta}{2} \cos \beta = 0$$

$$\left. \begin{array}{l} \cos \frac{\beta}{2} = 0 \rightarrow \beta = \pi \\ \operatorname{sen} \frac{\beta}{2} = 0 \rightarrow \beta = 0 \end{array} \right\} \text{Máximos}$$
$$\cos \beta = 0 \rightarrow \beta = \frac{\pi}{2} \rightarrow \text{máximo}$$

El segundo aparato debería estar orientado según el eje  $ox$  (en sentido +)

SEPT 2008

2) Un ion de  $s=1$  y  $\mu = 4 \cdot 10^{-27}$  J/T se encuentra en  $S_x = +\hbar$ . Se somete a la acción de un campo  $\vec{B} = 200 \text{ G } \hat{u}$ .

Calcular el  $t_{\min}$  que debe transcurrir para que el estado de espín de las moléculas sea el correspondiente a  $S_x = -\hbar$

$$S_{\pm} \chi_m = \hbar \sqrt{2 - m(m \pm 1)} | \chi_{m \pm 1} \rangle \quad \vec{H} = \frac{\mu}{\hbar} \vec{S}$$

$$\vec{B} = B_0 \hat{u}$$

En presencia de este campo magnético, el hamiltoniano del sistema será:

$$H = - \vec{M}_s \cdot \vec{B}$$

Donde  $\vec{M}_s$  es el operador momento magnético de espín, que puede escribirse en función del operador angular de espín:

$$\vec{M}_s = \frac{2\mu_B}{\hbar} \vec{S} = \gamma \cdot \vec{S} \quad \gamma > 0$$

$$H = - \gamma \cdot \vec{S} \cdot \vec{B} = \underbrace{-\gamma B_0}_{\omega_0 > 0} S_z \rightarrow H = \omega_0 \cdot S_z \quad H = \frac{\omega_0 \hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Como necesitamos conocer la evolución en el tiempo:

$$H \cdot \psi(t) = i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt} \quad |\psi(t)\rangle = a_+(t) |+\rangle + a_-(t) |-\rangle$$

↑  
Esto es para  $s = \frac{1}{2}$

$$\frac{\omega_0 \hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_+ \\ a_- \end{pmatrix} = i\hbar \begin{pmatrix} \dot{a}_+ \\ \dot{a}_- \end{pmatrix}$$

$$\frac{\omega_0}{2} a_+ = i \dot{a}_+ \rightarrow \ddot{a}_+ - \frac{\omega_0}{2i} a_+ = 0 \rightarrow \dot{a}_+ + \frac{i\omega_0}{2} a_+ = 0$$

$$-\frac{\omega_0}{2} a_- = i \dot{a}_- \rightarrow \dot{a}_- + \frac{\omega_0}{2i} a_- = 0 \rightarrow \dot{a}_- - \frac{i\omega_0}{2} a_- = 0$$

$$\frac{d(a_+)}{dt} = -\frac{i\omega_0}{2} a_+ \rightarrow \int \frac{d(a_+)}{a_+} = -\frac{i\omega_0}{2} \int dt \rightarrow \ln a_+ = -\frac{i\omega_0 t}{2} + C$$

$$a_+ = C_+ e^{-i\omega_0 t / 2}$$

$$a_- = C_- e^{+i\omega_0 t / 2}$$

El estado inicial es  $+\frac{\hbar}{2}$  para  $S_x$ :

$$\left. \begin{aligned} |+\rangle_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + |-\rangle) \\ a_+(0) &= \frac{1}{\sqrt{2}} = C_+ & a_-(0) &= C_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \end{aligned} \right\} \psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + e^{i\omega_0 t} |-\rangle)$$

Tenemos que encontrar el tiempo para que el estado sea

$$|-\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + i|-\rangle)$$

$$P_{-\frac{\hbar}{2}} = |\langle -_x | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{4} | \langle + | + \rangle + e^{i\omega_0 t} \langle + | - \rangle - i \langle - | + \rangle - i e^{i\omega_0 t} \langle - | - \rangle |^2 =$$

$$= \frac{1}{4} | 1 + e^{i(\omega_0 t - \frac{\pi}{2})} |^2 = \frac{1}{4} \cdot 2(1 + \cos(\omega_0 t - \frac{\pi}{2})) = \frac{1}{2} (1 + \cos(\omega_0 t - \frac{\pi}{2}))$$

$$(1 + e^{i\alpha})(1 + e^{-i\alpha}) = 2 + 2\cos\alpha$$

Como el estado final ES  $|-\rangle_x$ , esta probabilidad ha de

ser 1 para el tiempo que estamos buscando:

$$\frac{1}{2} (1 + \cos(\omega_0 t - \frac{\pi}{2})) = 1 \rightarrow \cos(\omega_0 t - \frac{\pi}{2}) = 1$$

$$\omega_0 t - \frac{\pi}{2} = 2\pi \rightarrow \boxed{t = \frac{5\pi}{2\omega_0} = \frac{5\pi}{-2 \times 80} = 10.35 \mu\text{s}}$$

$$\frac{\mu}{\hbar} \quad 16 = 10^{-11} \text{ T}$$

HABÍA QUE HACERLO PARA ESPIN 1

3) Orbital molecular del estado fundamental de  $\text{H}_2$ :

$$\psi = c_a \chi_a + c_b \chi_b$$

$\chi_a \rightarrow 1s$  del  $e^-$  en H

$\chi_b \rightarrow 2p$  del  $e^-$  en B

a) Determina la energía de este orbital con  $H_{aa} = -13.61 \text{ eV}$ ,

$H_{bb} = -8.30 \text{ eV}$ ,  $H_{ba} = -2.35 \text{ eV}$  y despreciando  $S_{ij}$

b) Determina los coeficientes  $c_a$  y  $c_b$

Para determinar orbitales moleculares se utilizan métodos variacionales, de tal manera que las ecuaciones a resolver para calcular las energías son:

$$\sum_j c_j (H_{ij} - S_{ij}E) = 0$$

En este caso:

$$c_a (H_{aa} - E) + c_b (H_{ab}) = 0 \quad H_{ab} = H_{ba}$$

$$c_a (H_{ba}) + c_b (H_{bb} - E) = 0$$

Como es un sistema homogéneo, su determinante lo de ser nulo:

$$\begin{vmatrix} H_{aa} - E & H_{ab} \\ H_{ab} & H_{bb} - E \end{vmatrix} = 0$$

$$(H_{aa} - E)(H_{bb} - E) - H_{ab}^2 = 0 \rightarrow H_{aa}H_{bb} - H_{aa}E - H_{bb}E + E^2 - H_{ab}^2 = 0$$

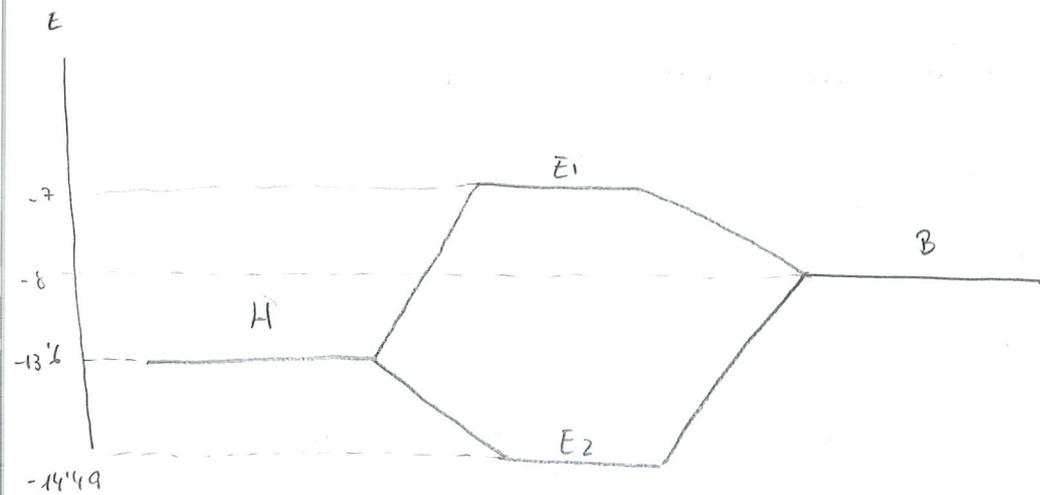
$$E^2 - (H_{aa} + H_{bb})E + H_{aa}H_{bb} - H_{ab}^2 = 0$$

$$E = \frac{H_{aa} + H_{bb} \pm \sqrt{H_{aa}^2 + H_{bb}^2 + 2H_{aa}H_{bb} - 4H_{aa}H_{bb} + 4H_{ab}^2}}{2} =$$

$$= \frac{H_{aa} + H_{bb} \pm \sqrt{(H_{aa} - H_{bb})^2 + 4H_{ab}^2}}{2}$$

$$E_1 = -7.4131 \text{ eV}$$

$$E_2 = -14.4968 \text{ eV}$$



El estado fundamental de la molécula es el de menor energía. Es decir,  $E = -14.4968 \text{ eV}$

b) Determinamos los coeficientes.

$$E = -10.95 \quad u = -2.35$$

$$\Delta = -2.65$$

$$\frac{H_{aa} + H_{bb}}{2} = E < 0$$

$$E_2 = E + \sqrt{\Delta^2 + |u|^2}$$

$$\frac{H_{aa} - H_{bb}}{2} = \Delta < 0$$

$$E_1 = E - \sqrt{\Delta^2 + |u|^2}$$

$$H_{ab} = u < 0$$

$$E_g = E_1 - E_2 = E + \sqrt{\Delta^2 + |u|^2} - E - \sqrt{\Delta^2 + |u|^2} = 2\sqrt{\Delta^2 + |u|^2}$$

$$E_g = 2\sqrt{\Delta^2 + |u|^2}$$

$$E_g^2 = 4|\Delta|^2 + 4|u|^2 \quad \Rightarrow \quad 1 = \frac{4|\Delta|^2}{E_g^2} + \frac{4|u|^2}{E_g^2}$$

$$\alpha_p = \frac{|\Delta|}{\sqrt{\Delta^2 + u^2}}$$

$$\alpha_c = \frac{|u|}{\sqrt{\Delta^2 + u^2}}$$

Ecuaciones:

$$C_a (H_{aa} - E_2) + C_b H_{ab} = 0 \quad \Rightarrow \quad C_a (\Delta + \sqrt{\Delta^2 + |u|^2}) = C_b |u|$$

$$\frac{C_b}{C_a} = \frac{\Delta + \sqrt{\Delta^2 + |u|^2}}{|u|} = \frac{\Delta}{|u|} + \frac{\sqrt{\Delta^2 + |u|^2}}{|u|} = -\frac{\alpha_p}{\alpha_c} + \frac{1}{\alpha_c} = -\frac{\alpha_p + 1}{\alpha_c}$$

SEPT 2003

3) Problema nuclear en moléculas diatómicas y espectros moleculares.

El hamiltoniano del problema nuclear es:

$$H^D = T_n(\bar{R}_\alpha) + V_n(\bar{R}_\alpha) + E^e(\bar{R}_\alpha)$$

Para resolverlo, pasamos al sistema de coordenadas del

CM, dividiendo el problema en movimiento relativo y

movimiento del CM.

Para el CM nos quedan ondas libres, por lo que causa de interés

$$\nabla^2 = \frac{1}{R^2} \frac{d}{dR} \left( R^2 \frac{d}{dR} \right) + \frac{1}{R^2} \frac{L^2}{\hbar^2}$$

Se aproxima  $\frac{L^2}{MR^2} \approx \frac{L^2}{MR_0^2}$  y se resuelve para ambos niveles

Esto da lugar a niveles vibracionales y rotacionales:

$$E_{JH}^{\text{rot}} = \frac{1}{2I} J(J+1)\hbar^2$$

$$E_{vib} = \frac{2^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 R_0} + E^e(R_0) + \left(v + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

Los niveles rot están separados en los microondas y los vib en el infrarrojo.

$$\frac{C}{C_a} \phi = C_a \left( \chi_a + \frac{C_b}{C_a} \chi_b \right) = C_a \left( \chi_a - \frac{\alpha_{p+1}}{\alpha_c} \chi_b \right)$$

$$\begin{aligned} \alpha_p^2 + \alpha_c^2 &= 1 \\ \alpha_c^2 &= 1 - \alpha_p^2 = \\ &= (1 - \alpha_p)(1 + \alpha_p) \end{aligned}$$

$$\langle \phi | \phi \rangle = C_a^2 \left( \langle \chi_a | \chi_a \rangle - \frac{\alpha_{p+1}}{\alpha_c} \langle \chi_a | \chi_b \rangle - \frac{\alpha_{p+1}}{\alpha_c} \langle \chi_b | \chi_a \rangle + \left( \frac{\alpha_{p+1}}{\alpha_c} \right)^2 \langle \chi_b | \chi_b \rangle \right)$$

Como despreciamos la integral de solo pariente:

$$\langle \phi | \phi \rangle = C_a^2 \left( 1 + \frac{(\alpha_{p+1})^2}{(1 - \alpha_p)(1 + \alpha_p)} \right) = 1$$

$$C_a^2 \cdot \left( \frac{1 - \alpha_p + \alpha_p + 1}{1 - \alpha_p} \right) = 1 \Rightarrow C_a^2 \left( \frac{2 + 2\alpha_p}{1 - \alpha_p} \right) = 1$$

$$C_a = \sqrt{\frac{1 - \alpha_p}{2}}$$

$$\frac{\alpha_{p+1}}{\alpha_c} = \frac{\alpha_{p+1}}{\sqrt{1 - \alpha_p} \sqrt{1 + \alpha_p}} = \sqrt{\frac{1 + \alpha_p}{1 - \alpha_p}}$$

$$\phi = \left( \sqrt{\frac{1 - \alpha_p}{2}} \chi_a - \sqrt{\frac{1 + \alpha_p}{2}} \chi_b \right)$$

Valores numéricos:  $\alpha_p = 0.7482$   $\alpha_c =$

$$\boxed{\begin{aligned} C_a &= 0.3548 \\ C_b &= 0.9349 \end{aligned}}$$

1) El estado cuántico de un  $e^-$  es:

$$[\Psi](\vec{r}) = \begin{bmatrix} \psi_+(\vec{r}) \\ \psi_-(\vec{r}) \end{bmatrix}$$

¿ Probabilidad de medir  $S_y$  y que se obtenga el valor  $\frac{\hbar}{2}$  indep de posición de  $e^-$ ? ¿ Prob de que al medir  $p$  (momento lineal) resulte  $\vec{p}_0$  con espín  $S_z = -\frac{\hbar}{2}$ ?

El estado del  $e^-$  viene descrito por el espínor

$$[\Psi(\vec{r})] = \begin{bmatrix} \langle \vec{r} | \psi \rangle \\ \langle \vec{r} | \psi \rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi(\vec{r}) \otimes |+\rangle \\ \psi(\vec{r}) \otimes |-\rangle \end{bmatrix}$$

los autoestados de  $S_y$  son:  $|+\rangle_y$  y  $|-\rangle_y$

$$\text{Nos interesa } |+\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + i|-\rangle)$$

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} d\vec{r} \cdot |\langle +_y | \Psi \rangle|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \vec{r} | \psi \rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} \langle \vec{r} | \psi \rangle \right|^2 d\vec{r} =$$

$$= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_+(\vec{r}) + i\psi_-(\vec{r})|^2 d\vec{r} = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} (|\psi_+(\vec{r})|^2 + |\psi_-(\vec{r})|^2 + \psi_+^*(\vec{r})\psi_-(\vec{r}) + \psi_-(\vec{r})\psi_+^*(\vec{r})) d\vec{r}$$

Si suponemos que el espínor está normalizado:

$$P = \frac{1}{2} \left( 1 + \int_{-\infty}^{\infty} [\psi_+^*(\vec{r})\psi_-(\vec{r}) + \psi_-(\vec{r})\psi_+^*(\vec{r})] d\vec{r} \right)$$

Para el momento y el espín:

$$P = |\langle \vec{p}_0 | \Psi \rangle|^2 = |\langle \vec{p}_0 | \psi_-(\vec{r}) \rangle|^2$$

El estado estacionario para el momento en esa dirección es

$$\psi = \frac{e^{i\vec{p}_0 \cdot \vec{r}}}{\sqrt{2\pi}}$$

$$p = \hbar k \rightarrow p_0 = \hbar k_0 \rightarrow k_0 = \frac{p_0}{\hbar}$$

$$g_+(\vec{h}) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \vec{h} | \vec{r} \rangle \psi_+(\vec{r}) d\vec{r} \rightarrow g_+(k_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \vec{h}_0 | \vec{r} \rangle \psi_+(\vec{r}) d\vec{r}$$

La función de probabilidad de momento es  $|g_+(k)|^2 dk$

$$dk = \frac{1}{\hbar} dp$$

$$P_+ = \frac{|g_+(\vec{h}_0)|^2}{\|g_+(\vec{h}_0)\|^2} = \frac{|g_+(\frac{\vec{p}_0}{\hbar})|^2}{\|g_+(\frac{\vec{p}_0}{\hbar})\|^2} = \frac{\frac{1}{\hbar^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \langle \vec{p}_0 | \vec{r} \rangle \psi_+(\vec{r}) d\vec{r} \right|^2}{\|g_+(\frac{\vec{p}_0}{\hbar})\|^2}$$

$$\|g_+(\frac{\vec{p}_0}{\hbar})\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \left| \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\langle \vec{p}_0 | \vec{r} \rangle \psi_+(\vec{r}) d\vec{r}}{\hbar} \right|^2 \frac{d\vec{p}_0}{\hbar}$$

$$P = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\left| \int_{-\infty}^{\infty} \langle \vec{p}_0 | \vec{r} \rangle \psi_+(\vec{r}) d\vec{r} \right|^2}{\|g_+(\frac{\vec{p}_0}{\hbar})\|^2}$$

2) Base:  $|\psi_1\rangle; |\psi_2\rangle; |\psi_3\rangle; |\psi_4\rangle; |\psi_5\rangle; |\psi_6\rangle$

$$H_0 = \hbar \omega_0 \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 \end{pmatrix}$$

$$W = \hbar \omega_0 \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 & -2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 2 \\ -2 & 0 & 1 & 1 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 2 & -2 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

a) Considerando  $W$  una perturbación, determina las energías

hasta el orden más bajo en  $b$ .

Para los autovalores de  $H$  que no están deg

$$E_i = E_i^0 + \langle \psi_i | W | \psi_i \rangle$$

↳ elemento de matriz de la diagonal de W

Solo se corrige a primer orden  $E_1$ :

$$\boxed{E_1 = \hbar \omega_0 + 1 \cdot b \omega_0 = \omega_0 (6\hbar + b)}$$

$E_1$  y  $E_2$  se corrigen a 2º orden:

$$E_i = E_i^0 + \langle \psi_i | W | \psi_i \rangle + \sum_{p \neq i} \frac{|\langle \psi_p | W | \psi_i \rangle|^2}{E_i - E_p}$$

Sumo a todos los elementos de la fila de W correspondiente a  $\psi_i$

$$\boxed{E_1 = 5\hbar\omega_0 + \frac{|(1-1)b\omega_0|^2 + |2b\omega_0|^2}{5\hbar\omega_0 - \hbar\omega_0} + \frac{|b\omega_0|^2}{5\hbar\omega_0 - 6\hbar\omega_0} = 5\hbar\omega_0 + \frac{3b^2\omega_0}{4\hbar} + \frac{b^2\omega_0}{\hbar} = 5\hbar\omega_0 - \frac{1}{4} \frac{b^2\omega_0}{\hbar}}$$

$E_2 \Rightarrow$  tampoco se corrige a 2º orden

Para  $E_3$  hay que hallar autovalores y autovectores del

subespacio de W:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1-\lambda & 1 & 0 \\ 1 & 1-\lambda & 0 \\ 0 & 0 & 1-\lambda \end{pmatrix} =$$

$$= (1-\lambda)^3 - (1-\lambda) = 0 \rightarrow (1-\lambda)(1-\lambda)^2 - 1 = 0$$

$$1-\lambda=0 \rightarrow \lambda=1$$

$$1+\lambda^2-2\lambda-1=0$$

$$\lambda^2-2\lambda=0$$

$$\lambda(\lambda-2)=0 \rightarrow \lambda=0 \text{ or } \lambda=2$$

Se rompe la degeneración parcialmente

$$E_3^1 = \hbar\omega_0 + b\omega_0$$

$$E_3^2 = \hbar\omega_0 + 2b\omega_0$$

$$E_3^3 = \hbar\omega_0$$

b) El sistema se encuentra en  $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}|\psi_3\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|\psi_4\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}}|\psi_5\rangle$

Se mide  $E$ . ¿P nivel fund?

¿Estado nos medida?

El nivel de más baja energía, es decir, el fundamental, es  $E_3$

Calculamos el autovector asociado a este autovalor:

$$\text{bwo } \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0 \rightarrow \begin{aligned} x+y &= 0 \\ x-y &= 0 \rightarrow x=-y \\ z &= 0 \end{aligned}$$

$$|\chi\rangle = \psi_3 - \psi_4 \rightarrow |\chi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_3\rangle - |\psi_4\rangle)$$

$$P_{E_3} = |\langle \chi | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{2} \cdot \left| \frac{1}{\sqrt{6}} - \frac{1}{\sqrt{6}} \right|^2 = 0$$

Luego el estado nos lo medido quedará igual ya que nunca se medirá  $E_3$

3) Estructura fina:  $n=3$

¿En cuántos niveles se desdobra si se prescinde de  $H_{s=0}$ ?

¿Deg? Si se tiene en cuenta  $H_{s=0}$ , ¿en cuántos se desdobra? ¿Deg?

Si prescindimos del término  $W_{s=0}$  nos quedará  $W_{f=0}$

$W_f = W_{mv} + W_D$ . Este último operador es escalar, luego

será diagonal en la base de estados  $|lm\rangle$ , estados propios del átomo de hidrógeno para  $n=3$ .

Como el nivel  $n=3$  es deg, había que hallar

$$\langle 3lmm_s | W_f | 3lmm_s \rangle = \langle 3lmm_s | W_{mv} | 3lmm_s \rangle + \langle 3lmm_s | W_0 | 3lmm_s \rangle$$

El primer producto escalar da como resultado:

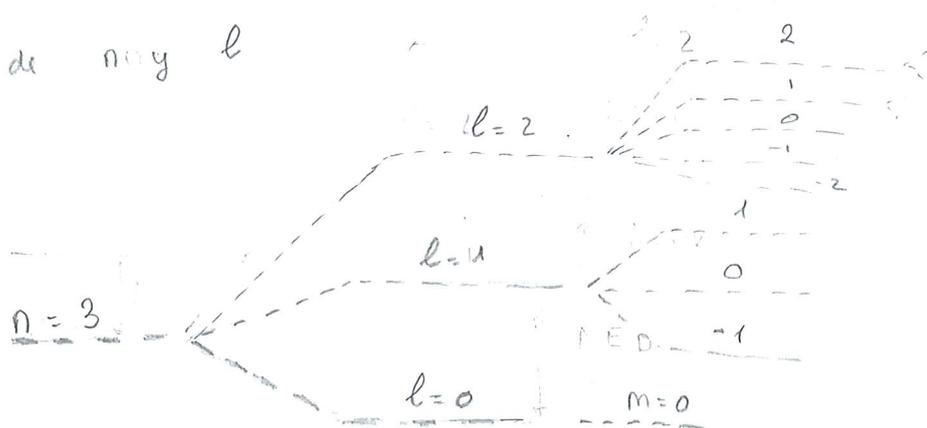
$$\Delta E_{mv} = \frac{1}{2} mc^2 \alpha^4 \left[ \frac{3}{4} - \frac{n}{l+\frac{1}{2}} \right] \cdot \frac{1}{n^4} \quad \text{Donde } \alpha \text{ es la cte de estructura fina}$$

El 2º

$$\Delta E_D = \frac{1}{2} mc^2 \alpha^4 \left[ \frac{1}{n^3} \right] \quad \text{si } l=0$$

$$= 0 \quad \text{si } l \neq 0$$

Por tanto, los desdoblamientos en la energía solo dependen de  $n$  y  $l$



$$\Delta E_e = \frac{1}{2} mc^2 \alpha^4 \left[ \frac{3}{4} - \frac{3}{l+\frac{1}{2}} \right] \cdot \frac{1}{3^4}$$

$$\Delta E_D = \frac{1}{2} mc^2 \alpha^4 \left[ \frac{1}{3^4} \right] \quad \text{para } l=0$$

Los niveles se desdoblan según  $l$ , ya que  $\Delta E_D$  únicamente aumenta la energía del nivel  $l=0$ .

El nivel  $n=3$  se desdobla en 3 niveles:  $l=0$ ,  $l=1$  y  $l=2$  con degeneraciones  $g=10$ ,  $g=6$  y  $g=2$  respectivamente.

Si tenemos en cuenta el término espín-orbita, las energías se desdoblan según el número cuántico  $j$ , resultado de  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$

Los niveles de energía serán:

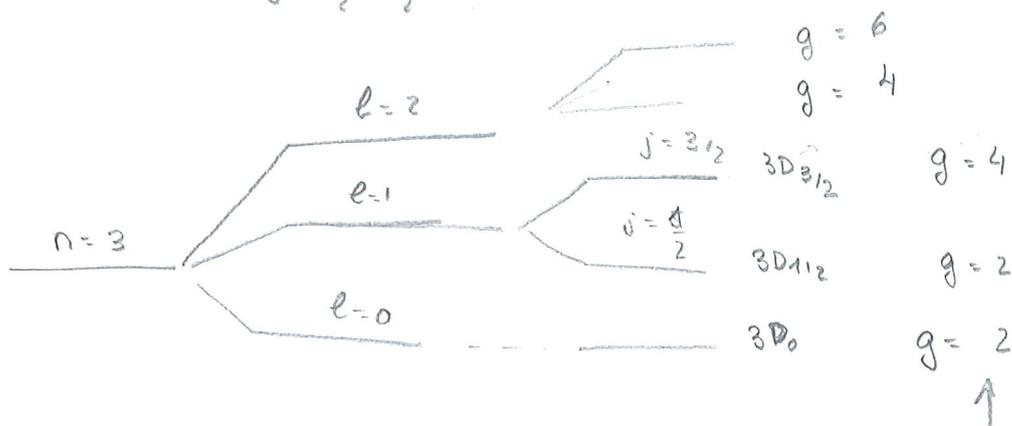
$$E = \frac{1}{2} mc^2 \alpha^4 \frac{1}{2n^3 l(l + \frac{1}{2})(l+1)} \begin{cases} l & j = l + \frac{1}{2} \\ -l - 1 & j = l - \frac{1}{2} \end{cases}$$

Para los niveles perfectamente desdoblados por  $W_{j1}$

$l=0 \rightarrow j=0 \rightarrow$  no se desdobra

$l=1 \rightarrow j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \rightarrow$  se desdobra en otros dos

$l=2 \rightarrow j = \frac{5}{2}, \frac{3}{2} \rightarrow$  se desdobra en otros 3



debido a los  $m_j$