UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

Apellidos	
Nombre	DNI ....
Asignatura **Física cuántica I**	Grupo ....
Curso **2º**	Fecha ....

Física cuántica I - Grupos B, B2 y E
Examen final – 11 de junio de 2018

Problema 1 (0.75 + 1.50 + 0.75 = 3 puntos).
Una partícula de masa m en una dimensión se encuentra en un instante en un estado con función de ondas

$$\phi(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad x \leq 0\,, \\ x\, e^{-\gamma^2 x^2} & \text{si} \quad x \geq 0\,, \end{cases}$$

donde γ es un parámetro con dimensiones de $(\text{longitud})^{-1}$ característico de la energía potencial.

(a) Normalizar la función de ondas.

$$\boxed{\phi_{\text{normalizada}}(x) = e^{\mathrm{i}\theta} \left(8\gamma^3 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \right)^{1/2} \phi(x)\,, \quad \theta \text{ real arbitrario}}$$

(b) Calcular los valores esperados de X^2 y de P.

$$\boxed{\langle X^2 \rangle = \frac{3}{4\gamma^2} \qquad\qquad \langle P \rangle = 0}$$

(c) A qué distancia $x_{\max}$ del origen es máxima la probabilidad de encontrar la partícula.

$$\boxed{x_{\max} = \frac{1}{\sqrt{2}\,\gamma}}$$

(a) Normalización:

$$N^2 := \int_0^\infty dx\, |\phi(x)|^2 = \int_0^\infty dx\, x^2 e^{-2\gamma^2 x^2} = \frac{1}{8\gamma^3} \sqrt{\frac{\pi}{2}}$$

$$\Rightarrow \quad \phi_{\text{normalizada}}(x) = \frac{1}{N}\, \phi(x) = e^{\mathrm{i}\theta} \left(8\gamma^3 \sqrt{\frac{2}{\pi}} \right)^{1/2} \phi(x)\,, \quad \theta \text{ real arbitrario}\,.$$

(b) Valores esperados:

$$\langle X^2\rangle = \int_0^\infty dx\, x^2\, |\phi_{\text{normalizada}}(x)|^2 = 8\gamma^3\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^\infty dx\, x^4\, e^{-2\gamma^2x^2} = 8\gamma^3\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,\frac{3}{32\gamma^5}\,\sqrt{\frac{\pi}{2}} = \frac{3}{4\gamma^2}\,.$$

$$\langle P\rangle = \int_0^\infty dx\; \phi^\star_{\text{nor}}(x)\,(-\mathrm{i}\hbar)\,\frac{d}{dx}\,\phi_{\text{nor}}(x) = -\,8\mathrm{i}\hbar\gamma^3\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^\infty dx\, x\, e^{-\gamma^2x^2}\,\frac{d}{dx}\left(x\, e^{-\gamma^2x^2}\right)$$
$$= -\,8\mathrm{i}\hbar\gamma^3\sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^\infty dx\, e^{-2\gamma^2x^2}x\,(1-2\gamma^2x^2) = -\,8\mathrm{i}\hbar\gamma^3\sqrt{\frac{2}{\pi}}\left(\frac{1}{4\gamma^2} - 2\gamma^2\,\frac{1}{8\gamma^4}\right) = 0\,.$$

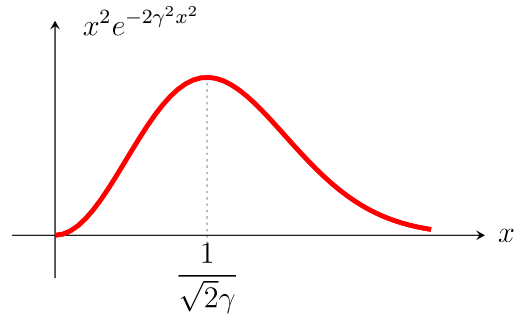
Todas las integrales anteriores se facilitan en la hoja de integrales repartida con el examen.

(d) Hay que calcular el máximo de $\rho(x) := |\phi_{\text{normalizada}}(x)|^2$. Para ello derivamos e igualamos a cero:

$$\frac{d}{dx}\,\rho(x) = 8\gamma^3\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,\frac{d}{dx}\left(x^2e^{-2\gamma^2x^2}\right) = 8\gamma^3\sqrt{\frac{2}{\pi}}e^{-2\gamma^2x^2}\left(2x-4\gamma^2x^3\right)$$

$$\frac{d}{dx}\,\rho(x) = 0 \quad\Leftrightarrow\quad e^{-2\gamma^2x^2}\,2x\left(1-2\gamma^2x^2\right) = 0 \quad\Rightarrow\quad x\to\infty\,,\quad x=0\,,\quad x=\pm\frac{1}{\sqrt{2}\gamma}\,.$$

Las soluciones $x\to\infty$ y $x=0$ son puntos de mínimo de $\rho(x)$, pues $\rho(x)$ es siempre mayor o igual que cero y en ellos se anula. El punto $x=-1/\sqrt{2}\gamma$ no pertenece al dominio. Sólo queda $x=1/\sqrt{2}\gamma$. Comprobar que es un punto de máximo es fácil. Basta notar que $\rho(x)$ es mayor o igual que cero para todo x, que es continua, que sólo se anula en los puntos frontera $x=0$ y $x\to\infty$ de su domininio, y que tiene un solo punto de extremo, por lo que éste tiene que ser un máximo. (Hasta aquí el problema. El resto se incluye por completitud). De hecho, la gráfica de $\rho(x)$ es:



Alternativamente, puede comprobarse que la segunda derivada de $\rho(x)$ en $x=1/\sqrt{2}\gamma$ es negativa:

$$\frac{d^2\rho(x)}{dx^2} = 16\gamma^3\sqrt{\frac{2}{\pi}}\;e^{-2\gamma^2x^2}\left[\left(1-2\gamma^2x^2\right)^2 - 4\gamma^2x^2\right] \quad\Rightarrow\quad \left.\frac{d^2\rho(x)}{dx^2}\right|_{x=1/\sqrt{2}\gamma} < 0\,.$$

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

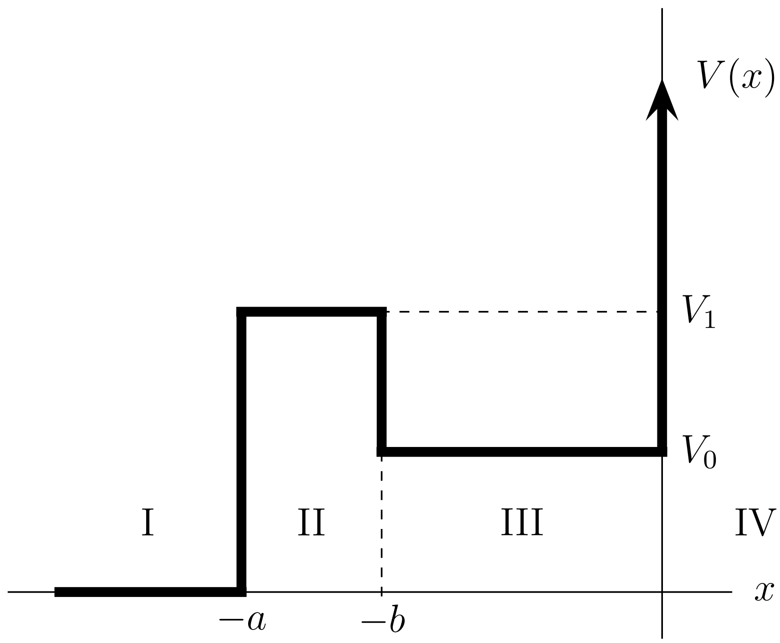
Apellidos ....

Nombre .... DNI ....

Asignatura **Física cuántica I** .... Grupo ....

Curso **2º** .... Fecha ....

Problema 2 (1 punto).
Una partícula de masa m incide desde la izquierda en forma onda plana sobre un pozo con energía potencial como la de la figura. Con el convenio $\psi(x,t) = e^{-\mathrm{i}Et/\hbar}\phi(x)$ para los estados estacionarios (usado siempre en clase) escribir la forma de $\phi(x)$ en las distintas zonas para $V_0 < E < V_1$.



$\phi_{\mathrm{i}} = A\,e^{\mathrm{i}kx} + B\,e^{-\mathrm{i}kx}$	$k = \sqrt{\dfrac{2mE}{\hbar^2}}$
$\phi_{\mathrm{II}} = C\,e^{\kappa x} + D\,e^{-\kappa x}$	$\kappa = \sqrt{\dfrac{2m(V_1 - E)}{\hbar^2}}$
$\phi_{\mathrm{III}} = F\,e^{\mathrm{i}k_{\mathrm{III}}x} + G\,e^{-\mathrm{i}k_{\mathrm{III}}x}$	$k_{\mathrm{III}} = \sqrt{\dfrac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$
$\phi_{\mathrm{IV}} = 0$	A, B, C, D, F, G constantes de integración

Problema 3 (0.5 + 0.5 + 0.5 + 1.0 = 2.5 puntos).
Un oscilador armónico de frecuencia angular ω se encuentra en $t = 0$ en un estado con función de ondas

$$\psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{3}}\,\phi_0(x) + \sqrt{\frac{2}{3}}\,\phi_2(x)\,,$$

donde $\phi_n(x)$ son los estado propios del hamiltoniano.

(a) ¿Cuál es la probabilidad de que al medir la energía se obtenga $\hbar\omega/2$? ¿Y de que se obtenga $7\hbar\omega/2$?

$$\mathrm{Prob}\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right) = \frac{1}{3} \qquad\qquad \mathrm{Prob}\left(\frac{7\hbar\omega}{2}\right) = 0$$

(b) ¿Cuál es la función de ondas que describe el estado del sistema en un tiempo t?

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{3}}\,e^{-\mathrm{i}E_0 t/\hbar}\,\phi_0(x) + \sqrt{\frac{2}{3}}\,e^{-\mathrm{i}E_2 t/\hbar}\,\phi_2(x)\,, \qquad E_n = \hbar\omega\left(n+\frac{1}{2}\right)$$

(c) Escribir el operador $O := XP + PX$ en términos de los operadores aniquilación a y creación $a^\dagger$.

$$O := XP + PX = \mathrm{i}\hbar\left(a^\dagger a^\dagger - a\,a\right)$$

(d) Encontrar el valor esperado de O en el instante inicial.

$$\langle O\rangle_{\psi(0)} = 0$$

En los apartados **(c)** y **(d)** es necesario entregar los cálculos. Utilícese el espacio a cotinuación.

(c) Usando las expresiones en el formulario se tiene

$$\left.\begin{aligned} a^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha x - \frac{1}{\alpha}\frac{d}{dx}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha X + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar\alpha}P\right) \\ a &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha x + \frac{1}{\alpha}\frac{d}{dx}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\alpha X - \frac{1}{\mathrm{i}\hbar\alpha}P\right) \end{aligned}\right\} \quad\Leftrightarrow\quad \left.\begin{aligned} X &= \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}\left(a^+ + a\right) \\ P &= \frac{\mathrm{i}\hbar\alpha}{\sqrt{2}}\left(a^+ - a\right) \end{aligned}\right\}.$$

De aquí se sigue

$$XP + PX = \frac{\mathrm{i}\hbar}{2}\left(a^\dagger a^\dagger - \cancel{a^\dagger a} + \cancel{a\,a^\dagger} - a\,a + a^\dagger a^\dagger + \cancel{a^\dagger a} - \cancel{a\,a^\dagger} - a\,a\right) = \mathrm{i}\hbar\left(a^\dagger a^\dagger - a\,a\right).$$

(d) Se quiere calcular

$$\langle XP + PX \rangle_{\psi(0)} = \Big\langle \big(\frac{1}{\sqrt{3}}\, \phi_0 + \sqrt{\frac{2}{3}}\, \phi_2 \big) \Big| \, \mathrm{i}\hbar \, \big(a^\dagger \, a^\dagger - a \, a \big) \, \big(\frac{1}{\sqrt{3}}\, \phi_0 + \sqrt{\frac{2}{3}}\, \phi_2 \big) \Big\rangle \, . \qquad (1)$$

Analizamos los términos del lado derecho del producto escalar (1):

• Al actuar $a^\dagger a^\dagger$ sobre ϕ_0 se suben dos niveles y se obtiene un ϕ_2, que se combina con el ϕ_2 del lado izquierdo y da una contribución

$$\Big\langle \sqrt{\frac{2}{3}}\, \phi_2 \Big| \, \mathrm{i}\hbar \, a^\dagger \, a^\dagger \, \frac{1}{\sqrt{3}}\, \phi_0 \Big\rangle = [\,\text{Formulario}\,] = \mathrm{i}\hbar \, \frac{\sqrt{2}}{3} \, \langle \phi_2 | \sqrt{2} \phi_2 \rangle = \frac{2\mathrm{i}\hbar}{3} \, .$$

• Al actuar $a^\dagger a^\dagger$ sobre ϕ_2 se obtiene un ϕ_4 que da cero al multiplicarse escalarmente con los ϕ_0 y ϕ_2 del lado izquierdo.

• Al actuar aa sobre ϕ_0 se obtiene cero.

• Al actuar aa sobre ϕ_2 se bajan dos niveles y se obtiene un ϕ_0 que se combina con el ϕ_0 del lado iquierdo para dar una contribución

$$\Big\langle \frac{1}{\sqrt{3}}\, \phi_0 \Big| \, (-\mathrm{i}\hbar) \, aa \, \sqrt{\frac{2}{3}}\, \phi_2 \Big\rangle = [\,\text{Formulario}\,] = -\, \mathrm{i}\hbar \, \frac{\sqrt{2}}{3} \, \langle \phi_0 | \sqrt{2} \phi_0 \rangle = -\, \frac{2\mathrm{i}\hbar}{3} \, .$$

Sumando todas las contribuciones obtenemos cero.

Problema 4 (0.5 + 0.5 + 0.5 = 1.5 puntos).
Un átomo de hidrógeno se encuentra en un instante inicial en el estado descrito por la función de ondas

$$\psi(\mathbf{x},0) = C\,\psi_{100}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2\sqrt{3}}\,\psi_{200}(\mathbf{x}) + \frac{1}{2}\,\psi_{211}(\mathbf{x})\,.$$

¿Cuánto debe valer C para que la función de ondas esté normalizada?

$$\boxed{C = \sqrt{\frac{2}{3}} \quad \text{salvo fase arbitraria}}$$

¿Cuál es la probabilidad de obtener 0 si se mide la tercera componente del momento angular? ¿Y de obtener $\hbar$?

$\mathrm{Prob}(0) = \dfrac{3}{4}$	$\mathrm{Prob}(\hbar) = \dfrac{1}{4}$

Cacular el valor esperado de $\mathbf{L}^2$ y de la energía. En este último caso, expresar el resultado en términos de la energía E_1 del estado fundamental del átomo de hidrógeno.

$\langle \mathbf{L}^2 \rangle = = \dfrac{\hbar^2}{2}$	$\langle H \rangle = \dfrac{3}{4}\,E_1$

- $|C|^2 + \left|\frac{1}{2\sqrt{3}}\right|^2 + \left|\frac{1}{2}\right|^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad C = \sqrt{\frac{2}{3}}\,e^{\mathrm{i}\theta}\,,\ \theta$ real arbitrario.
- $\mathrm{Prob}\,(0) = |C|^2 + \left|\frac{1}{2\sqrt{3}}\right|^2 = \frac{3}{4}\,.$

  $\mathrm{Prob}\,(\hbar) = \left|\frac{1}{2}\right|^2 = \frac{1}{4}\,.$
- A $\langle \mathbf{L}^2 \rangle$ sólo contribuye el último término de $\psi(\mathbf{x},0)$, pues los dos primeros tienen $\ell = 0$:

$$\langle \mathbf{L}^2 \rangle = \left|\frac{1}{2}\right|^2 1(1+1)\,\hbar^2 = \frac{\hbar^2}{2}$$

Para $\langle H \rangle$ se tiene

$$\langle H \rangle = |C|^2 E_1 + \left(\left|\frac{1}{2\sqrt{3}}\right|^2 + \left|\frac{1}{2}\right|^2\right) E_2 = \frac{2}{3}\,E_1 + \frac{1}{3}\,\frac{E_1}{4} = \frac{3}{4}\,E_1\,.$$

Apellidos		
Nombre	DNI	
Asignatura **Física cuántica I**	Grupo	
Curso **2º**	Fecha	

Problema 5 (1.5 puntos).
Calcular el valor esperado de la tercera componente z de la posición del electrón en un átomo de hidrógeno dado por la función de ondas normalizada

$$\psi(\mathbf{x},0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,\psi_{1\,0\,0}(\mathbf{x}) + \psi_{2\,1\,0}(\mathbf{x})\,\right].$$

$$\boxed{\langle z\rangle_{t=0} = \frac{128\sqrt{2}}{243}\,\frac{a_0}{Z}}$$

Se recomienda usar las propiedades de paridad de los armónicos esféricos. En este problema es necesario entregar los cálculos.

$$\begin{aligned}\langle z\rangle_{\psi(\mathbf{x},0)} &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{100}+\psi_{210}\right) \middle|\, z\,\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\psi_{100}+\psi_{210}\right)\right\rangle \\ &= \frac{1}{2}\Big(\langle\psi_{100}|z\,\psi_{100}\rangle + \langle\psi_{100}|z\,\psi_{210}\rangle + \langle\psi_{210}|z\,\psi_{100}\rangle + \langle\psi_{210}|z\,\psi_{210}\rangle\Big)\,. \qquad (2)\end{aligned}$$

La paridad de $\psi_{n\ell m}$ es $(-1)^{\ell}$. Por tanto, ψ_{100} es par, ψ_{210} es impar, y obviamente z es impar. El primer y el cuarto término en (2) son integrales sobre todo el espacio $\mathbf{R}^3$ de funciones $z\,|\psi_{100}|^2$ y $z\,|\psi_{210}|^2$ impares. Luego

$$\langle\psi_{100}|z\,\psi_{100}\rangle = \langle\psi_{210}|z\,\psi_{210}\rangle = 0\,.$$

Del formulario repartido con el examen vemos que

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-Zr/a_0}\,, \qquad \psi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2}\frac{Zr}{a_0}\,e^{-Zr/2a_0}\,\cos\theta$$

son reales. Como $z = r\cos\theta$ también lo es, se tiene que

$$\langle\psi_{210}|z\,\psi_{100}\rangle = \langle\psi_{100}|z\,\psi_{210}\rangle = \frac{Z^4}{4\pi\sqrt{2}a_0^4}\int_0^\infty dr\,r^4\,e^{-3Zr/2a_0}\int_0^\pi d\theta\,\sin\theta\,\cos^2\theta\int_0^{2\pi}d\phi\,.$$

Resolviendo las integrales angulares y radial resulta

$$\int_0^\infty dr r^4\,e^{-3Zr/2a_0} = 4!\left(\frac{2a_0}{3Z}\right)^5, \qquad \int_0^\pi d\theta\,\sin\theta\,\cos^2\theta = -\frac{1}{3}\,\cos^3\theta\,\Big|_{\theta=0}^{\theta=\pi} = \frac{2}{3}\,, \qquad \int_0^{2\pi}d\phi = 2\pi\,.$$

En total

$$\langle z\rangle_{\psi(\mathbf{x},0)} = \langle\psi_{210}|z\,\psi_{100}\rangle = \frac{2^7\sqrt{2}}{3^5}\,\frac{a_0}{Z} = \frac{128\sqrt{2}}{243}\,\frac{a_0}{Z}\,.$$

Problema 6 (0.75 + 0.75 = 1.5 puntos).
Sobre el electrón de un átomo de hidrógeno (número atómico $Z = 1$) actúa un campo magnético B constante en la dirección del eje z, de forma que el hamiltoniano es

$$H = H_0 - \omega B L_z\,, \qquad \omega = \frac{|e|}{2\mu c}\,,$$

donde H_0 es el hamiltoniano usual de átomo de hidrógeno y L_z es la tercera componente del momento angular.

(a) Calcular las autoenergías y autofunciones de H.

Autoenergías: $E_{nm} = E_n - m\hbar\omega B$

Autofunciones: $\psi_{n\ell m}$

(b) Se prepara un estado inicial

$$\psi(\mathbf{x}, 0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,\psi_{2\,1\,1}(\mathbf{x}) - \psi_{2\,1\,0}(\mathbf{x})\,\right]$$

y se deja evolucionar en el tiempo. Calcular el valor esperado de L_x en un tiempo t.

$$\langle L_x\rangle_t = -\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\,\cos(\omega B t)\,.$$

(a) Las autofunciones $\psi_{n\ell m}$ del hamiltoniano del átomo de hidrógeno satisfacen

$$H_0\psi_{n\ell m} = E_n\psi_{n\ell m}\,, \qquad L_z\psi_{n\ell m} = m\hbar\,\psi_{n\ell m}\,, \tag{3}$$

con E_n las energías propias del átomo de hidrógeno. También satisfacen $\mathbf{L}^2\psi_{n\ell m} = \ell(\ell{+}1)\hbar^2\psi_{n\ell m}$, pero esto no lo usaremos aquí.

De (3) se sigue que

$$\big(H_0 - \omega B L_z\big)\,\psi_{n\ell m} = (E_n - m\hbar\omega B)\,\psi_{n\ell m}\,.$$

Es decir, $\psi_{n\ell m}$ son autofunciones del hamiltoniano total H con autovalores $E_{nm} = E_n - m\hbar\omega B$.

(b) La evolución temporal es según el hamiltoniano total H, por lo que las autoenergías E en las exponenciales $e^{-\mathrm{i}Et/\hbar}$ de los estados estacionarios son E_{nm}. De acuerdo con esto, la función de ondas en un tiempo t para el estado inicial preparado es

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(e^{-\mathrm{i}E_{21}t/\hbar}\psi_{211} - e^{-\mathrm{i}E_{20}t/\hbar}\psi_{210}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\,e^{-\mathrm{i}E_2t/\hbar}\big(\,e^{\mathrm{i}\omega Bt}\psi_{211} - \psi_{210}\,\big)\,.$$

Para calcular el valor esperado de L_x en este estado usamos (ver formulario)

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

y escribimos

$$\langle L_x\rangle_t = \Big\langle \frac{1}{\sqrt{2}}\, e^{-\mathrm{i}E_2 t/\hbar} \left(e^{\mathrm{i}\omega B t}\psi_{211} - \psi_{210}\right)\Big| \frac{1}{2}\left(L_+ + L_-\right) \frac{1}{\sqrt{2}}\, e^{-\mathrm{i}E_2 t/\hbar} \left(e^{\mathrm{i}\omega B t}\psi_{211} - \psi_{210}\right)\Big\rangle . \quad (4)$$

Los acción de L_+ y L_- sobre ψ_{211} y ψ_{210} es (ver nuevamente formulario)

$$L_+\psi_{211} = 0\,, \qquad L_+\psi_{210} = \sqrt{2}\hbar\,\psi_{211}\,, \qquad L_-\psi_{211} = \sqrt{2}\hbar\,\psi_{210}\,, \qquad L_+\psi_{210} = \sqrt{2}\hbar\,\psi_{21-1}\,.$$

Substituyendo en (4) resulta

$$\langle L_x\rangle_t = \frac{\hbar}{2\sqrt{2}}\,\big\langle \left(e^{\mathrm{i}\omega B t}\psi_{211} - \psi_{210}\right) \big| \left(-\psi_{211} + e^{\mathrm{i}\omega B t}\psi_{210} - \psi_{21-1}\right)\big\rangle$$

Ls fase temporal en el lado izquierdo del producto escalar sale compleja conjugada y la de lado derecho sin conjugar. Esto y $\langle\psi_{n\ell m}|\psi_{n'\ell' m'}\rangle = \delta_{nn'}\delta_{\ell\ell'}\delta_{mm'}$ implica que

$$\langle L_x\rangle_t = -\frac{\hbar}{2\sqrt{2}}\left(e^{-\mathrm{i}\omega B t} + e^{\mathrm{i}\omega B t}\right) = -\frac{\hbar}{\sqrt{2}}\,\cos(\omega B t)\,.$$