UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
DEPARTAMENTO DE FISICA TEORICA I

Febrero-Mayo MJRPlaza

Física Cuántica I

Página web de la asignatura: http://teorica/ft8/problemas.html

Los libros de donde se toman los ejercicios están indicados entre corchetes, así [Li] es Liboff, [Gr] Griffiths, [Ga] Gasiorowicz, [SMM] is *Modern Physics* by R.A. Serway, C.J. Moses and C.A. Moyer, etc. Los problemas en **rojo** se proponen como ejercicios pzra hacer en casa al alumno. No hay que entregarlos. Los problemas en negro los hago yo en clase. La solución de todos estos problemas, si no está escrita en estas páginas, me la piden y se la llevo a clase.

$K_B = 1.38\times 10^{-23}$ J K^{-1} $= 8.61\times 10^{-5}$ eV K^{-1}, $\hbar = 6.58\times 10^{-16}$ eV s,
$c = 3\times 10^{8}$ m s^{-1}, $\sigma = 5.67\times 10^{-8}$ J s^{-1} m^{-2} K^{-4}, 1 Å $= 10^{-10}$ m,
1 e $= 1.602\times 10^{-19}$ C, $m_e = 0.511\times 10^{6}$ eV$/c^2$,
$\alpha \equiv e^2/(4\pi\varepsilon_0\,\hbar c) = 1/137$, $m_p = 1\,836\,m_e$.

LO QUE SIEMPRE SE DICE AL PRINCIPIO

1. La constante de estructura fina se define como $\alpha \equiv \dfrac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c}$ donde $1/(4\pi\varepsilon_0) = 9.0\times 10^{9}$ J m C^{-2} es la constante de la ley de Coulomb (ε_0 se conoce con el nombre de constante dieléctrica del vacío). Comprobar que α (i) es adimensional, (ii) tiene un valor aproximadamente igual a $1/137$.

2. [Li, pg 35] [Black body radiation] Show that the energy density $U(T)$ of a radiation field in equilibrium at the temperature T is directly proportional to T^4. *Hint*: Use the Wien's law.

3. [Colección de problemas cortos] ¿Cuál es la dependencia con la temperatura del número total de fotones emitidos por un cuerpo negro? (Sólo una de las siguientes respuestas es correcta). *Ayuda*: usar la ley de Wien: $u(\nu) \propto \nu^3 f(\nu/T)$. Conclusión: El número de fotones no se conserva al variar la temperatura.

   $A: T^4 \qquad B: T^3 \qquad C: T \qquad D: T^{3/2}$

4. [Cuerpo negro] Deducir la ley de Wien $\lambda_{\max} T = 0.289\,\mathrm{cm\,K}$ a partir de la fórmula de Planck

$$u(\nu)\,\Delta\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\frac{h\,\nu\,\Delta\nu}{e^{h\,\nu/K_B\,T}-1}.$$

   Ayuda: la solución no nula de $5\,(e^x-1) = x\,e^x$ es $x = 4.965$.

5. • [Cuerpo negro] Demostrar a partir de la ley de Planck

$$R_T(\nu)\,\Delta\nu = \frac{c}{4}\,\frac{8\pi\nu^2}{c^3}\frac{h\,\nu\,\Delta\nu}{e^{h\,\nu/K_B\,T}-1}$$

   la ley de Stefan $R_T = \sigma\,T^4$. Teniendo en cuenta que $\displaystyle\int_0^\infty dx\frac{x^3}{e^x-1} = \frac{\pi^4}{15}$, determinar que el valor de la constante σ es el dado en la tabla de arriba.

Nota: La radiancia espectral, R_T, es radiación emitida por unidad de superficie y de tiempo, se relaciona con $R_T(\nu)$, No es por unidad de volumen, pues por eso incluye un factor $c/4$.

6. • [Cuerpo negro-una curiosidad] El sol tiene un radio de 696 000 Km y una temperatura superficial de 6 000 K. Suponiendo que el sol radia como un cuerpo negro, demostrar que a) la masa perdida por segundo es aproximadamente de 5×10^9 Kg (recordad que $E = m\,c^2$); b) si el sol estuviera hecho de carbón y se quemara por un proceso convencional duraría sólo del orden de 4 200 años, dado que un kilo de carbón produce 3×10^7 J al arder y que la densidad del carbón es $1\,400\,\mathrm{Kg\,m^{-3}}$; c) el flujo de energía radiada a la distancia de la tierra es aproximadamente de $1.6\,\mathrm{Kilovatios\,m^{-2}}$ ya que la órbita de la tierra es de 1.5×10^8 Km de radio.

7. [Órdenes de magnitud de las ondas asociadas a partículas] Calcular la longitud de onda de de Broglie de (a) una pelota de masa 66 g y velocidad 10 m/s, (b) una mota de polvo de diámetro una micra y masa 10^{-15} Kg con velocidad 1 mm/s, (c) un electrón no-relativista acelerado por una diferencia de potencial de 100 V, (d) el mismo electrón pero con eneegía cinética de 1 MeV, (e) electrones producidos en un acelerador de 50 GeV. En este caso comprarar el resultado obtenido con las dimensiones de un nucle promedio.

   Ayuda: La del ejercicio siguiente es útil.

8. • [Ga, pg 24] What is the de Broglie wavelength of (a) a 1 eV electron, (b) a 10 MeV proton, (c) a 100 MeV electron, (d) a thermal neutron (defined as a neutron whose kinetic enegy is $3K_BT/2$ with $T = 300\,\mathrm{K}$)?

   Ayuda: $m_ec^2 = 0.511\,\mathrm{MeV}$, $m_pc^2 = 938\,\mathrm{MeV}$, $m_nc^2 = 939\,\mathrm{MeV}$. No lo hice así en clase, que lo hice más feo, pero al consultar mis notas de hace muchos años tenía el apunte siguiente (más profesional), $\hbar c = 1973$ eVÅ. 1973 es fácil de recordar, suena a un año.

   Sol: (a) 12.40Å, (b) 0.09Å, (c) 12.40 fm, (d) 1.45Å

FUNCION DE ONDA, PROBABILIDAD, NORMALIZACIÓN, DISPERSIÓN, MOMENTO...

9. [Gr, pg 10] The needle on a broken car speedometer is free to swing, and bounces perfectly off the pins at either end, so that if you give it a flick it is equally likely to come to rest at any angle between 0 and π. a) What is the probability density $\rho(\theta)$? Graph $\rho(\theta)$ as a function of θ from $-\pi/2$ to $3\pi/2$. (Of course, part of this interval is excluded, so ρ is zero there.) Make sure that the total probability is 1. b) Compute $\langle\theta\rangle$, $\langle\theta^2\rangle$ and σ for this distribution. c) Compute $\langle\sin\theta\rangle$, $\langle\cos\theta\rangle$ and $\langle\cos^2\theta\rangle$.

10. [Gr, pg 10] We consider the same device as the previous problem, but this time we are interested in the x-coordinate of the needle point-that is, the 'shadow', or 'projection', of the needle on the horizontal line. a) What is the probability density $\rho(x)$? Graph $\rho(x)$ as a function of x from $-2r$ to $2r$, where r is the length of the needle. (Again, part of this interval is excluded, so ρ is zero there.) b) Compute $\langle x\rangle$, $\langle x^2\rangle$ and σ for this distribution. You could have obtained these results from part c) of problem 9.

11. [Li, pg 57] Supóngase una muestra de un millón de electrones preparados en un cierto estado de función de onda
$$\psi = e^{-|x|}\,e^{-i\,wt}\cos\pi x.$$
    Se hacen medidas (en un tiempo específico $t = t'$) para determinar la localización de los electrones en la muestra. Aproximadamente, ¿cuántos electrones se encontrarán en el intervalo $-\frac{1}{2} \leq x \leq \frac{1}{2}$?

    Ayuda: para calcular las integrales utilizar la identidad $\cos x = (e^{ix} + e^{-ix})/2$. También puede (hágalo usted de estas manera si quiere) quitar el cuadrado del coseno pasando al ángulo doble y considerar que la derivada de $e^{-x}(a\sin x + b\cos x)$ es $e^{-x}((a-b)\cos x - (a+b)\sin x)$.

12. [Experimental mathematics with Maple/Mathematica/MATLAB/a mano] Two measurements of a quantity A give the values a_1, a_2, and $(\Delta A)^2 = (a_1 - a_2)^2/4$, as you can check. If measurements result in three values, a_1, a_2, a_3, then

$$(\Delta A)^2 = \frac{1}{3^2}\left((a_1 - a_2)^2 + (a_1 - a_3)^2 + (a_2 - a_3)^2\right),$$

and in the case of four values a_1, a_2, a_3, a_4,

$$(\Delta A)^2 = \frac{1}{4^2}\left((a_1 - a_2)^2 + (a_1 - a_3)^2 + (a_1 - a_4)^2 + (a_2 - a_3)^2 + (a_2 - a_4)^2 + (a_3 - a_4)^2\right).$$

It is easy to generalize this result. The conclusion is that ΔA depends exclusively on the **differences** of measured values of A, not on the values themselves.

13. [Li, pg 79] A particle is known to be in the state

$$\psi(x,t) = A\,\exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{4\,l^2}\right)\exp\left(\frac{ip_0\,x}{\hbar}\right)\exp\left(i\omega_0\,t\right).$$

The lengths x_0 and l are constants, as are the momentum p_0 and frequency ω_0. The (real) constant A is determined through normalization. Calculate $\langle X\rangle$, $\langle X^2\rangle$ and show that the **variance** $(\Delta X)^2 = l^2$. Argue how this result is consistent with the change of shape of $|\psi|^2$ with a change in the parameter l. Calculate the uncertainty ΔP. Do you find your answer to be consistent with the uncertainty principle?

Note: All measurements are referred to a specific time t. The momentum P is represented by the operator $-i\hbar d/dx$.

14. • Una partícula que se mueve en una dimensión se encuentra en un estado representado por la función de onda

$$\psi_1 = A_1\, e^{-y^2/4}$$

(a menudo se simplifica diciendo solamente que la partícula e encuentra "en un estado ψ_1"). Otro estado posible de la partícula es

$$\psi_2 = A_2\, y\, e^{-y^2/8}$$

y un tercer estado es

$$\psi_3 = A_3\left(e^{-y^2/4} + y\, e^{-y^2/8}\right).$$

Normalizar los tres estados en el intervalo $-\infty < y < +\infty$, es decir, encontrar A_1, A_2 y A_3. La probabilidad de encontrar a la partícula en el intervalo $0 < y < 1$ cuando se halla en el estado ψ_3 ¿es la misma que la suma de las probabilidades correspondientes a los estados ψ_1 y ψ_2 por separado? Responder a la misma pregunta para el caso del intervalo $-1 < y < 1$.

Nota: Creo que este problema lo saqué del Liboff, pero ahora no estoy segura.

15. • [Gr, pg 14, and others] [Para entusiastas] [Description of unstable particles] We obtained that

$$\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} dx\,\psi^*\psi = 0,$$

or that the probability of finding the particle *somewhere*, $P(t) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dx\,\psi^*\psi$, is a constant for all times (we set it to 1) provided that:

1) the solution ψ satisfies the Schödinger equation,

2) the solution is localized (i.e., the usual assumption that the wave function and all its derivatives are zero at infinity) allowing for normalization,

3) the potential energy is a real function.

Under these conditions, the normalization factor is preserved by time evolution and we 'set it and forget it', as many books say. If we relax the constraint that the potential energy be real and allow it to have a constant imaginary part (rare?... hmmmm) $V = V_0 - \frac{i\hbar}{2}\Gamma$, we can repeat the analysis (please, do it) and obtain that

$$\frac{dP(t)}{dt} = -\Gamma P(t),$$

whose solution is $P(t) = P(0)e^{-\Gamma t}$, thus allowing for unstable particles that spontaneously disintegrate with a lifetime $1/\Gamma$. Radioactivity is a typical example of this exponential decay law.

MATHEMATICAL TOOLS OF QUANTUM MECHANICS

16. [Gr, pg 94 pero retocado] Let

$$T = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 1-i \\ 1+i & 0 \end{pmatrix}$$

be a matrix operator with dimensions of $\hbar\omega$, that is, energy. (a) Verify that T is Hermitian. (b) Find its eigenvalues (notice that they are all **real**). (c) Find and normalize the eigenvectors (note that they are **orthogonal**). (d) Decompose the identity as a sum of projectors, the result is called *spectral decomposition of the identity*; and decompose T as a sum projectors multiplied by the corresponding eigenvalues. (e) A measurement of T is made on the state represented by the column vector $|v\rangle = (1,1)^t/\sqrt{2}$; what values of T are obtained and with which probability? Calculate $\langle v|Tv\rangle$ in two different ways. (f) Construct the unitary diagonalizing matrix S and check explicitly that diagonalizes T. (g) Check on any two states $|v\rangle, |w\rangle$ of your invention that $\langle v|Tw\rangle = \langle Tv|w\rangle$.

17. • [Gr, pg 94] Consider the following Hermitian matrix

$$A = a \begin{pmatrix} 2 & i & 1 \\ -i & 2 & i \\ 1 & -i & 2 \end{pmatrix},$$

where a is a real constant that carries the dimension of A (energy, whatever). Repeat the previous exercise but now for matrix A. Within the degenerate sector of eigenvectors of A, construct two linearly independent eigenvectors (it is this step that is **always** possible for an Hermitian matrix, but not for an **arbitrary** matrix). Orthogonalized them, and check that both are orthogonal to the third. Normalize all the eigenvectors. Measurement of A is now made on the column vector $|v\rangle = (1,1,1)^t/\sqrt{3}$.

18. [Zettili, pg 150] In the following expressions where A is an operator (if you have problems think of a square matrix but get used to operators in general too) specify the nature of each expression (i.e., specify whether it is an operator, a bra, or a ket): (a) $\langle\phi|A|\psi\rangle\langle\psi|$, (b) $A|\psi\rangle\langle\phi|$, (c) $\langle\phi|A|\psi\rangle|\psi\rangle\langle\phi|A$, (d) $\langle\psi|A|\phi\rangle|\phi\rangle + iA|\psi\rangle$, (e) $\Big(|\phi\rangle\langle\phi|A\Big) - i\Big(A|\psi\rangle\langle\psi|\Big)$

19. Learn the Gram-Schmidt procedure that from a set of linearly independent vectors $\{e_1, e_2, e_3, \cdots\}$ generates an orthonormal set $\{e_1^{'}, e_2^{'}, e_3^{'}, \cdots\}$ that spans the same space. Or move to the next exercise and do it.

20. [De este problema lo importante es la idea más que los cálculos concretos: de dos vectores linealmente independientes se sacan dos perpendiculares entre sí. Es un Gram-Schmidt puro y duro. Pero antes hay que verlo geométricamente] Sean $u_i(x)$, $i = 1, 2$ dos funciones de onda normalizadas y estacionarias. Suponed que son ortogonales de forma que

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_i^*(x)\, u_j(x)\, dx = \delta_{ij}.$$

Demostrad que la superposición $\alpha u_1 + \beta u_2$ donde α y β son constantes complejas está normalizada si y sólo si $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$.

Suponed ahora que u_1 y u_2 están normalizadas pero no son ortogonales. Demostrar que existe una única constante γ con $|\gamma| \leq 1$ tal que $u = u_1 - \gamma\, u_2$ es ortogonal a u_2. Dado que $|\gamma| \leq 1$ demostrar que $u/\sqrt{1 - |\gamma|^2}$ está normalizada.

21. • [ExParcial2016] (i) Una partícula se halla en un estado físico del que se sabe que: (a) al medir su energía sólo se pueden obtener los valores $1, 2$ y 4. Estos valores son en eV; b) el valor medio de la energía es 2; c) la dispersión cuadrática de la energía es $\sqrt{3/2}$. ¿Cuál es la probabilidad de que al medir la energía se obtenga el valor 1? ¿Y de que se obtenga el valor 4?

(ii) El observable A viene dado por la matriz

$$A = \begin{pmatrix} 2 & i & 0 \\ b & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

a) Decir cuánto vale b. b) Al hacer una medida de A sobre el estado representado por el vector columna $|v\rangle = (1, 1, 0)^t$, ¿qué probabilidad hay de que se obtenga el valor 1? ¿Y de que se obtenga el valor 2?

22. [Gr, pg 97] A Hermitian operator is one that satisfies the condition

$$\langle f|Tg\rangle = \langle Tf|g\rangle$$

for all functions $f(x)$ and $g(x)$ in the space. Is the momentum operator $P = -i\hbar \dfrac{d}{dx}$ Hermitian?

DE MUCHA UTILIDAD Y QUE DEBEN SABERSE...

23. Demostrar que las funciones de onda estacionarias de una partícula sometida al potencial $V(x)$ con $V(-x) = V(x)$ o bien tienen una paridad definida (quiere decir que son funciones pares o impares) o bien pueden elegirse de manera que tengan una paridad definida.

[*Ayuda*: El primer paso en la demostración consiste en probar que si $u(x)$ es una solución de la ecuación de Schrödinger también lo es $u(-x)$ para el mismo valor de E]

24. [Utilísimo para los cálculos] When the wave function is square integrable and **real**, the expectation value $\langle P\rangle$ is **zero**.

25. The Hamiltonian operator for a particle in one dimension is $H = \dfrac{P^2}{2m} + V(x)$. Suppose that u is an eigenstate of H with energy E. Show that

$$\langle u|[H, A]|u\rangle = 0,$$

where A is any operator. By taking $A = x$ show that $\langle u|P|u\rangle = 0$ (la de cálculos que ahorran este resultado y el anterior! Y cálculos feos, además). De aquí sale también el *Teorema del Virial*. See next point 26.

26. Take $H = K + V$, with $K = P^2/2m$ the kinetic energy and V the potential energy. Obviously, no matter the state, the average $\langle H \rangle = \langle K \rangle + \langle V \rangle$ holds. However, when the state is an eigenstate of H there is in addition a relation between the expectation value of K and the expectation value of V given by

$$2\langle K \rangle = \langle x \frac{d}{dx} V(x) \rangle. \quad (*)$$

This is the *Virial Theorem*. How to prove it: Calculate the commutator $[H, xP]$. Average over proper states of H. The result is zero equal to something. That relation is the virial theorem. An application to the harmonic oscillator (without mentioning the theorem at all, just working from first principles) is in the exam [ExSep2014]. Check the web page. Clearly $(*)$ does not apply to the infinite potential well, but $\langle H \rangle = \langle P^2/2m \rangle$ does.

27. The Hermitian adjoint of an operator function $f(\hat{A})$ is given by $f^\dagger(\hat{A}) = f^*(\hat{A}^\dagger)$.

28. The Hermitian adjoint operator of L^+ is L^-, and viceversa. Derived from 27.

29. El potencial nuclear que mantiene unidos protones y neutrones dentro del núcleo se aproxima muy a menudo por un pozo de paredes infinitas.

30. Mecánica Cuántica: En los cálculos analíticos de los coeficientes de reflexión y transmisión de una barrera, los libros siempre tabulan el de transmisión. Yo creo que es porque tiene una expresión final más sencilla, pero ¿es el más facil de obtener? (Si sirve de algo, yo, en mis cálculos, y yo lo calculo todo, obtengo el de reflexión y de éste saco el otro. Me sale más de los dedos proceder así. Pero esto no es teorema, es sólo experiencia.)

31. In spectroscopic symbols, $l = 0, 1, 2, 3, 4, \ldots$ correspond to $s, p, d, f, g, \ldots$; s is for *sharp*, p for *principal*, d for *diffuse*, f for *fundamental*, and the rest is just alphabetical.

32. Degeneracy results from symmetry in the system.

33. A state with exactly $\Delta P \, \Delta x = \hbar/2$ is called an *optimum state of position and momentum.* In Spanish, un *paquete mínimo* .

OSCILADOR ARMÓNICO (The HO)

34. • [Small (and easy) questions] a) Using that $[H, H] = 0$, show that $[aa^\dagger, a^\dagger a] = 0$.

    Hint: $H = \hbar\omega(aa^\dagger - \frac{1}{2}) = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2})$. Esto es así porque el Hamiltoniano del HO tiene dos (bueno, tres) expresiones distintas. De haber puesto la misma expresión en $[H, H]$, no se concluiría ningún resultado nuevo.

35. [Orders of magnitude] Experimentally speaking the hydrogen molecule behaves as an oscillator with force constant $k = 510.5$ N m^{-1} and reduced mass $\mu = 8.37 \times 10^{-28}$ Kg. i) Calculate the angular frequency of oscillation. ii) Compare it with the frequency of oscillation of a laboratory macroscopic mass of, say, 0.0100 Kg that moves on a spring with $k = 0.100$ N m^{-1}.

36. Demostrar que en el estado n-simo de un oscilador armónico la energía cinética media $\langle K \rangle$ es igual a la energía potencial media $\langle V \rangle$, es decir que

$$\langle V \rangle = \frac{1}{2} m\omega^2 \langle X^2 \rangle = \langle K \rangle = \frac{1}{2m} \langle P^2 \rangle = \frac{1}{2} \langle H \rangle = \frac{\hbar\omega}{2}(n + \frac{1}{2})$$

[*La energía mínima permitida a un oscilador es* $\hbar\omega/2$, *siendo imposible forzar a un oscilador a una energía menor. En un sólido, por ejemplo, cuyos núcleos permanecen unidos por fuerzas armónicas, este punto de 'energía cero' persiste a* 0 K.]

37. Sea un oscilador armónico en la superposición de estados

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0 + \psi_1)$$

Demostrar que $\langle X \rangle = C \cos \omega t$ donde C es una constante. Si la superposición de estados fuera $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_0 + \psi_3)$, ¿qué valor se obtendría para $\langle X \rangle$?

[*En la notación anterior* $\psi_n(x,t) \equiv \varphi_n(x)\, exp\left(-\frac{i E_n t}{\hbar}\right)$, *siendo* φ_n *ó* u_n, *como se haya llamado en clase, el autoestado n-simo del oscilador armónico.*]

38. Un oscilador armónico unidimensional con carga e se somete a un campo eléctrico uniforme E de manera que el potencial viene dado por

$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 - eEx.$$

Mostrar que cada nivel de energía se reduce en la cantidad $e^2 E^2 / 2m\omega^2$. ¿Cuáles son ahora las nuevas funciones propias?

[*Ayuda: Reemplazar x por una nueva variable para que el problema se reduzca a un oscilador armónico con diferente origen de energías.*]

39. For a classical harmonic oscillator, the particle cannot go beyond the points where the total energy equals the potential energy (these are called *turning points* in English and *puntos de retroceso* in Spanish). Identify these points for a quantum-mechanical harmonic oscillator. Write an integral giving the probability that the particle in the ground state will go beyond these classically allowed points. (You may use tables, Maple, Mathematica, MATLAB or any reasonable approximation of the integral to afford a number here)

40. [Quantization of vibrational energy] [SMM, pg 217] The energy of a quantum oscillator is restricted to be one of the values $\hbar\omega(n + 1/2)$. How can this quantization apply to the motion of a mass on a spring which seemingly can vibrate with any amplitude (energy) whatever? [*Sol*: the discrete values for the allowed energies of the oscillator would go unnoticed if the spacing between adjacent levels were too small to be detected. Los datos en clase.]

PARTICLE IN A BOX

41. [SMM, pg 225] [Application of Quantum Mechanics to a macroscopic object] A 1.00 g marble (una china más bien) is constrained to roll inside a tube of length $l = 1.00$ cm. The tube is capped at both ends. i) Modelling this as a one-dimensional infinite square well, determine the value of the quantum number n if the marble is initially given an energy of 1.00 mJ. ii) Calculate the excitation energy required to promote the marble to the next available energy state.

42. [A.S. Davydov, *Quantum Mechanics*, 1965, pg121] Una partícula está confinada en el pozo infinito unidimensional de caja $0 < x < a$. Sea $\langle A \rangle_n$ el valor esperado de cualquier operador A en el estado descrito por la autofunción de la energía u_n. Demostrar que

$$\langle x \rangle_n = \frac{a}{2}, \qquad \langle (x - \langle x \rangle_n)^2 \rangle_n = \frac{a^2}{12}\left(1 - \frac{6}{n^2\,\pi^2}\right).$$

De aquí deducir que se recobra el resultado clásico en el límite $n \to \infty$.

[*Recuérdese que una partícula clásica rebota en las paredes del pozo indefinidamente y es igualmente probable encontrarla en cualquier lugar de la caja.*]

43. • Supóngase que la función de onda normalizada de la partícula del problema anterior en el instante $t = 0$ es $\psi(x, 0) = C\, x(a - x)$. Determinar la constante real C. Determinar $\psi(x, t)$, la función de onda en un tiempo posterior t.

    [*Debe empezarse escribiendo $\psi(x, 0)$ como una serie de Fourier en los autoestados de la energía u_n. Por lo tanto, como bien dicen los teoremas, los coeficientes están determinados*].

    Se hace una medida de la energía en un instante $t > 0$. Demostrar que la probabilidad de obtener el valor E_n es cero cuando n es par. ¿Por qué es esto así? Demostrar después que la probabilidad de obtener el valor E_n es $960/\pi^6\, n^6$ cuando n es impar. ¿Qué resultado es el más probable y por qué su probabilidad es tan próxima a la unidad?

44. • Un electrón está en el estado fundamental de una caja infinita con paredes en $x = 0$ y $x = a$. De repente una pared se mueve de $x = a$ a $x = 2a$. ¿Cuál es la probabilidad de que el electrón se halle en: (i) el estado fundamental, y (ii) el primer estado excitado de la nueva caja?

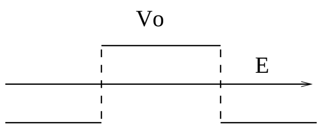
STEPS, BARRERAS de POTENCIAL y OTROS PROBLEMAS UNIDIMENSIONALES

45. [Estados no ligados] Demostrar que en un sistema unidimensional la densidad de corriente de probabilidadd J de un estado estacionario $\psi(x)$ correspondiente a una partícula que colisiona con un potencial arbitrario $V(x)$ es independiente de x y de t. ¿Tiene este resultado una generalización simple al caso de tres dimensiones? Suponiendo que $V(x) \to 0$ cuando $|x| \to \pm\infty$ se tiene que, asintóticamente, $\psi(x)$ tiene la forma

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{i\,kx} + B\, e^{-i\,kx} & x \ll 0 \\ C\, e^{i\,kx} & x \gg 0, \end{cases}$$

    mostrar que $|B|^2 + |C|^2 = 1$. ¿Cómo se debe interpretar esto?

46. [Ex June2014] Una partícula de masa m incide sobre una barrera de potencial de anchura l y altura V_0 tal y como indica la figura. Suponiendo que $E = V_0/2$, donde $E = \dfrac{\hbar k^2}{2m}$ es la energía cinética de la partícula incidente, encontrar los coeficientes de reflexión y transmisión de la barrera

$V(x) =$  $= \begin{cases} V_0, & 0 < x < l, \\ 0, & |x| > l \end{cases}$

    Nota: Utilice la condición $E = V_0/2$ desde el principio pues **simplifica considerablemente** los cálculos. La barrera va de 0 a l. Los resultados pedidos debe dejarlos en función de k's.

47. • [ExJune2015] [Scattering by a one-dimensional finite potential well. The *Ramsauer effect*] Una partícula de masa m incide desde la izquierda sobre el pozo de potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < a, \\ V_0, & x < 0, \quad x > a \end{cases}$$

    donde V_0 es una constante positiva (finita, por supuesto). La partícula lleva una energía $E > V_0$.

i) Calcular el coeficiente de reflexión R del problema de scattering.

ii) Una vez obtenido R, averiguar los dos valores más pequeños de la energia E para los que $R = 0$, o sea, para los que el potencial es totalmente *transparente* a la partícula incidente. Aviso: ninguno de los valores de E pedidos es cero.

El pozo va de 0 a a para que los cálculos sean más sencillos. No imponga una paridad definida a la función de onda porque no la tiene. La energía E es un dato, y no la tiene usted que calcular.

Note: This effect was discovered in 1921 by the German physicist C. Ramsauer in a study of the scattering of **low-energy** electrons in argon. When the wavelength corresponding to the moving electron and the characteristic dimensions of the atom are in a certain relation (you have obtained it in the exercise) are created favourable conditions for the electron wave to pass through the atom. The effect has no classical explanation, and only considering wave particle-duality and quantum mechanics can the situation be explained

In this exercise the argon atom is represented by a finite potential well.

MOMENTO ANGULAR

48. A *rigid rotor* is a system that consists of a particle constrained to move on the surface of a sphere but free from the influence of any other potential. Since $V = 0$ the energy of this system is purely kinetic; the Hamiltonian of the rotator is $H = \mathbf{L}^2/2I$ where I or mr^2 is the moment of inertia of the particle with respect to the origin. In deriving this relation, it is used the fact that $H = \mathbf{P}^2/2m = (rP)^2/2mr^2 = \mathbf{L}^2/2I$, since $L = |\mathbf{r} \times \mathbf{P}| = rP$. The wave function of the system is clearly independent of the radial degree of freedom, for it is constant.

49. • Comprobar que las componentes (L_1, L_2, L_3) del momento angular orbital $\mathbf{L}$ obedecen la relación de conmutación $[L_1, L_2] = i\hbar\, L_3$ y sus permutaciones cíclicas. Dado que $\mathbf{L}^2 = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2$ demostrar que $[L_3, \mathbf{L}^2] = 0$, de donde se deduce que las autofunciones de $\mathbf{L}^2$ pueden elegirse de manera que sean autofunciones de L_3. Supongo que no hace falta decir que L_1, L_2, L_3 es la notación que muchos emplean para L_x, L_y, L_z.

    Demostrar que $\langle [L_3, L_1\, L_2] \rangle$ se anula en cualquier autoestado de L_3. De este resultado deducir, evaluando $[L_3, L_1\, L_2]$, que $\langle L_1^2 \rangle = \langle L_2^2 \rangle$ en cualquier estado propio de L_3. Dado un estado en el que L_3 tiene autovalor $m\hbar$ y $\mathbf{L}^2$ tiene autovalor $l(l+1)\,\hbar^2$, comprobar que $\langle L_1^2 \rangle = \frac{1}{2}\hbar^2\,[l(l+1) - m^2]$.

50. En un estado $|lm\rangle$ se sabe que $\langle lm|(L_x^2 + L_y^2)|lm\rangle = 2$ (hemos tomado $\hbar = 1$). ¿Cuál de las siguientes respuestas es correcta?

    $$A : l = 2, m = 0 \qquad B : l = 3, m = 0 \qquad C : l = 1, m = 1, \qquad D : l = 2, m = -2$$

51. Calculate $\langle l\, l|(L_+ L_-)^2|l\, l\rangle$. Choose one possible answer:

    $$A : 4\, l^2\hbar^4 \qquad B : 0 \qquad C : l^2\,(l+1)^2\hbar^4 \qquad D : l^2\hbar^4$$

    Ayuda (que no se le daría en un examen): Utilizar que $L_+ = L_x + i\, L_y$ y $L_- = L_x - i\, L_y$.

52. Una molécula de D_2 a 30 K y en el instante $t = 0$ se sabe que está en el estado descrito por

    $$\psi(\theta, \varphi, 0) = \frac{3\, Y_1^1 + 4\, Y_7^3 + Y_7^1}{\sqrt{26}}$$

    (a) ¿Qué valores de L y L_z se encontrarán al hacer una medida y con qué probabilidad ocurrirán esos valores? (b) ¿Qué es $\psi(\theta, \varphi, t)$ sabiendo que el hamiltoniano es $H = \mathbf{L}^2/2I$? (c) ¿Cuánto es $\langle E \rangle$ para la molécula (en eV) en el instante $t > 0$?

[Ayuda: Supóngase que la molécula de deuterio es un rotor rígido, o sea dos átomos separados por una barra de longitud fija y masa despreciable. Para los estados puramente rotacionales de D_2 tomar $\hbar/4\pi\, Ic = 30.4\,\mathrm{cm}^{-1}$. I es el momento de inercia del rotor respecto al punto medio de la barra.]

53. [Examen Feb2001] Una partícula sometida a un potencial central se encuentra en un estado descrito por la función de onda no normalizada $\psi(x,y,z) = (x+y+z)\,\exp(-r^2/2b^2)$. ¿Cuánto vale $\langle \mathbf{L}^2 \rangle_\psi$? Elegir una y sólo una de las siguientes respuestas: $6\hbar^2, 0, \hbar^2, 2\hbar^2$. Datos facilitados:

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\,\pi}}\cos\theta, \qquad Y_1^{\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{3}{8\,\pi}}\sin\theta\, e^{\pm i\,\varphi},$$

donde θ, φ son las coordenadas angulares en esféricas.

Una variante diferente de este problema es dar la misma función de función de onda $\psi(x,y,z) = N(x+y+z)\,\exp(-r^2/2b^2)$ pero pedir los valores posibles de los observables $\mathbf{L}^2$ y L_z así como sus respectivas probabilidades. Lo haré también clase.

54. • Operar sobre el armónico esférico Y_l^{l-1} con L_- para obtener el factor de dependencia angular de Y_l^{l-2}.

55. Evaluate $\langle lm|L^+L^-|lm\rangle$ with $L^+L^- = \mathbf{L}^2 - L_z^2 + \hbar L_z$. Using in the previous expectation value that the Hermitian adjoint of L^+ is L^- and that $L^-|lm\rangle$ is proportional to $|lm-1\rangle$, deduce that

$$L^-|lm\rangle = \sqrt{(l+m)(l-m+1)}\,\hbar\,|l\,m-1\rangle.$$

Note: In a similar manner is obtained that $L^+|lm\rangle = \sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,\hbar\,|l\,m+1\rangle$.

These actions are **useful** to calculate $L_x|lm\rangle$ and $L_y|lm\rangle$.

56. • [De Spin, pero no hay que saber nada de ello. Sólo que se obtienen las mismas reglas de conmutación que vimos en clase para momentos angulares orbitales] Demostrar que las matrices 2×2

$$S_1 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \quad S_2 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}, \quad S_3 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

satisfacen las reglas de conmutación del momento angular (ie $[S_1, S_2] = i\hbar S_3$ y sus permutaciones cíclicas). Demostrar que hay dos vectores linealmente independientes $\psi_\pm$ que son vectores propios de S_3 con valores propios $\pm s\hbar$, donde s es un número que usted tiene que determinar. Demostrar que los vectores $\psi_\pm$ son también vectores propios de $S^2 = S_1^2 + S_2^2 + S_3^2$ con el mismo valor propio $s(s+1)\hbar^2$.

57. • [Spherical Harmonics (SH)] There are many different exercises on *spherical harmonics*. At the beginning one thinks that all are different and all relevant but after close study one admits that the exercises are not so many and can be kept under control.

One type, for example: Expand $x^2 f(r)$ as a linear combination of SH. Here $r^2 = x^2+y^2+z^2$.

Note: How far can you carry this exercise **without books**? Remember that the more you know the theory of angular momentum (and mathematical analysis, of course) the further you reach.

Another type: Exam of June2014.

More types: Write an homogeneous polynomial of degree **three** in x, y, z so that is a linear combination of SH of type Y_1^m only.

Expand $e^{i\varphi}$ in SH (difficult? no...) *Hint*: $\dfrac{e^{i\varphi}}{\sqrt{4\pi}} = a_1 Y_1^1 + a_3 Y_3^1 + a_5 Y_5^1 + \cdots$

ÁTOMO DE HIDRÓGENO y OTROS SISTEMAS TRIDIMENSIONALES

58. [Degeneracy of a harmonic oscillator] El oscilador armónico isótropo en 3 dimensiones tiene potencial $V(x,y,z) = \frac{1}{2}m\omega^2(x^2+y^2+z^2)$. Encontrar los estados estacionarios de la forma $X(x)Y(y)Z(z)$ y de ahí demostrar que los niveles de energía son $E = \left(\frac{3}{2}+n_x+n_y+n_z\right)\hbar\omega$, donde n_x, n_y, n_z son enteros no negativos.

    ¿Cuántos estados linealmente independientes tienen energía $E = \left(\frac{3}{2}+N\right)\hbar\omega$? Comprobar que el estado fundamental es esféricamente simétrico y encontrar un estado con $N=2$ que también sea esféricamente simétrico.

59. Un átomo de hidrógeno se encuentra en un estado cuya energía es $E = -\frac{13.6}{16}$ eV. Se sabe que la función de onda que representa a dicho estado es impar y que el valor medio $\langle \mathbf{L}^2\rangle$ en tal estado es $6\hbar^2$. Al medir $\mathbf{L}^2$ la probabilidad de encontrar el valor $2\hbar^2$ será –elegir una y sólo una de las siguientes respuestas: 0 1 3/5 1/2

60. (Atomo de hidrógeno) Un átomo de hidrógeno se halla en el estado descrito por la función de onda radial y angular (ambas normalizadas) que sigue

$$R_{32}(r) = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}\,(3\,a_0)^{3/2}}\left(\frac{r}{a_0}\right)^2 e^{-r/3\,a_0}, \qquad Y_2^{-1}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\, e^{-i\,\varphi}.$$

    Calcular la dispersión cuadrática media de la componente z de $\mathbf{r}$.

    [*Ayuda:* $\int_0^\infty dx\, e^{-a\,x}x^n = n!/a^{n+1}$*, donde* a *es una constante positiva y* $n = 0,1,2,\ldots$.]

61. Para el caso de un átomo hidrogenoideo obtener una expresión explícita de la densidad de probabilidad $P_r(r) \equiv r^2|R(r)|^2$ correspondiente al estado cuya energía es E_2.

    [*Ayuda: Como no hay una dirección privilegiada en un hamiltoniano cuyo potencial es central todos los estados degenerados tienen el mismo 'peso', es decir, que todos los estados* lm *son igual de probables.*]

62. En un átomo de hidrógeno la función de onda del electrón viene dada por

$$\psi(r,\theta,\varphi) = C\,re^{-\kappa r}\sin\theta\, e^{-i\,\varphi}.$$

    Aplicando explícitamente los operadores L_z, $\mathbf{L}^2$ y H, determinar los valores de los números cuánticos l, m y n y expresar κ en términos del radio de Bohr a_0.

POSPUESTOS POR EL MOMENTO (por falta de tiempo)

63. La ecuación de Schrödinger para el oscilador armónico tiene la forma $H\varphi_n = E_n\varphi_n$ donde

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{d\,x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2\,x^2.$$

    Obtener la forma correspondiente de la ecuación en representación de momentos y demostrar que las funciones propias asociadas $\hat{\varphi}_n(p)$ tienen la misma forma funcional que $\varphi_n(x)$ aparte de constantes.

64. Determinar los valores propios del hamiltoniano

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x-c)^2,$$

usando $x = c + (\hbar/2m\omega)^{1/2}\,(a + a^\dagger)$, $p = \left(\tfrac{1}{2}\hbar m\omega\right)^{1/2}(a - a^\dagger)/i$. ¿Por qué son las energías independientes de c?

El hamiltoniano de una partícula de carga e en un campo magnético dirigido a lo largo de la dirección z es

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} - e\,\mathbf{A})^2,$$

donde $A_x = A_z = 0, A_y = B\,x$. Comprobar que los operadores p_y, p_z, H conmutan entre sí. Suponiendo que p_y y p_z toman unos valores fijos demostrar que los valores propios de H vienen dados por

$$E_n = \frac{p_z^2}{2m} + \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \qquad \omega \equiv \frac{|eB|}{m}$$

independientemente de p_y

[*Ayuda: Escribir el primer hamiltoniano en términos de* $a, a^\dagger$ *y utilizar luego que* $[a, a^\dagger] = 1$.]

EXÁMENES

Las soluciones están en algún lugar de la pagina web.

65. [Jun2013] Una partícula de masa m se halla en el pozo de potencial

$$V(x) = \begin{cases} 0, & -a/2 < x < a/2, \\ V_0, & |x| > a/2 \end{cases}$$

donde V_0 es una constante positiva. La partícula tiene un solo estado ligado de energía $E = V_0/2$. Calcular la probabilidad de encontrar a la particula en la región i) clásicamente permitida, ii) clásicamente prohibida.

Nota: Utilice la condición $E = V_0/2$ desde el principio pues **simplifica considerablemente** los cálculos. El pozo va de $-a/2$ a $a/2$ para que usted imponga una paridad definida a la función de onda. Los resultados pedidos son **números**.

66. [Jun2013] El oscilador armónico isótropo en 2 dimensiones tiene hamiltoniano

$$H = \frac{1}{2\,m}(P_x^2 + P_y^2) + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2),$$

siendo los estados estacionarios de la forma $X(x)Y(y)$ y los niveles de energía igual a $E = (n_x + n_y + 1)\,\hbar\omega$, con n_x, n_y enteros no negativos.

i) ¿Cuántos estados linealmente independientes tienen energía $E = (N + 1)\,\hbar\omega$?

ii) Igual que hicimos en clase, pruebe que el hamiltoniano es invariante bajo rotaciones en torno a un eje perpendicular al plano xy (el eje z) porque después de la rotación **se sigue cumpliendo** la ecuación de Schrödinger.

Alternativa importante: Sólo si el párrafo anterior no le resulta familiar, calcule el conmutador de H con $L_z = -i\hbar(x\,\partial_y - y\,\partial_x)$.

iii) Encuentre una combinación lineal de los estados de energía $E = 2\,\hbar\omega$ que sea propia de L_z con valor propio $\hbar$ y otra con valor propio $-\hbar$.

Para hacer 65, 66 usted puede necesitar (o no) alguno de los siguientes datos:

La integral del cuadrado de un seno o del cuadrado de un coseno se calcula pasando al ángulo doble. En las fórmulas siguientes, l es la longitud natural de un oscilador armónico, u_n el enésimo autoestado en una dimensión, $H_n(x)$ los polinomios de Hermite y c_n constantes de normalización. Muchos libros utilizan la constante $\alpha = 1/l$ en lugar de l.

$$l = \sqrt{\hbar/m\omega}, \quad u_n(x) = c_n\,H_n\left(\frac{x}{l}\right)e^{-x^2/2\,l^2}, \quad H_0(x) = 1,\; H_1(x) = 2x,\; H_2(x) = 4x^2 - 2.$$

SOLUCIONES

43 $C^2 = 30/a^5$. Sabiendo que $u_n = \sqrt{\dfrac{2}{a}}\sin\dfrac{n\pi x}{a}$, $n = 1, 2, 3, \ldots$ y sus **reglas de ortogonalización** se saca que $\psi(x,0) = \frac{8\sqrt{15}}{\pi^3}\left(u_1 + \frac{1}{3^3}\,u_3 + \frac{1}{5^3}\,u_5 + \frac{1}{7^3}\,u_7 + \cdots\right)$. No entran $u_2, u_4, \ldots$ porque son funciones de onda impares en torno al centro de la caja y la función de partida $x(a-x)$ es par. Donde $x(a-x)$ tiene que ser máxima, en $x = a/2$, las funciones impares se anulan y no dan contribución por eso la función de onda no las quiere (porque estorban), castigadas a coeficiente cero. $\psi(x,t)$ tiene la misma estructura que $\psi(x,0)$ cambiando el 1 coeficiente de u_1 por $\exp(-itE_1/\hbar)$, $1/3^3$ coeficiente de u_3 por $\exp(-itE_3/\hbar)/3^3$ y así sucesivamente; $E_1, E_3, \ldots$ las autoenergías de la caja. La probabilidad pedida (estado enésimo) es el valor absoluto al cuadrado del coeficiente de u_n, o sea $\frac{64 \cdot 15}{\pi^6} |\exp(-itE_n/\hbar)|^2/n^6$, que es $960/\pi^6 n^6$ como dice el enunciado. No hay más que justificar.

45 Hecho en clase. La intepretación es muy sencilla: $|B|^2$ es el coeficiente de reflexión y $|C|^2$ el de transmisión. Asi $R+T=1$, como manda la *ecuación de continuidad*.

?? $T = \frac{4\frac{k3}{k1}}{\left(1+\frac{k3}{k1}\right)^2}$ and $R = \left(\frac{1-\frac{k3}{k1}}{1+\frac{k3}{k1}}\right)^2$. Si $T = 8/9$, $E = \frac{5\hbar^2\pi^2}{mL^2}$ y $V_3 = \frac{15\hbar^2\pi^2}{4mL^2}$

58 Hecho en clase. La degeneración es $(N+1)(N+2)/2$. El estado fundamental, el $|n_x, n_y, n_z\rangle = |000\rangle$ en notación obvia si hemos usado separación de variables, es igual a $c_0^3 e^{-r^2/2l^2}$, donde c_0 es una constante de normalización y $l = \sqrt{\hbar/m\omega}$, la longitud natural de un oscilador armónico unidimensional. De simetría esférica como se ve. La combinación $|200\rangle + |020\rangle + |002\rangle$ también es de simetría esférica e igual a $c_2 c_0^2 \left(4\frac{r^2}{l^2} - 6\right) e^{-r^2/2l^2}$. Hay que ir hasta $N = 4$ para encontrar el siguiente state de simetría esférica. Simetría esférica es que $l = m = 0$, por eso van con el armónico esférico Y_0^0. Una constantica.

59 Hecho en clase. 3/5.