



## Facultad de Ciencias

Universidad Autónoma de México  
Mecánica Cuántica - Tarea 2

### Profesores:

Dr. Chumin Wang Chen

Ayud. Tomas Javier Escamilla Lara

Ayud. Oliver Isaac Barreto Quintanar

**Alumno: Sebastián González Juárez**

sebastian\_gonzalezj@ciencias.unam.mx



1. (1.6 pts.) Considere una partícula que incide por la izquierda al potencial

$$V(x) = \begin{cases} W\delta(x), & \text{si } x \leq 0 \\ V_0, & \text{si } x > 0 \end{cases}$$

, donde  $W = \hbar\sqrt{V_0/m}$  y  $\delta(x)$  es la función delta de Dirac. Calcule la transmitancia y reflectancia con energía  $E > V_0$ . Analice el caso asintótico cuando  $E \gg V_0$  y compare la reflectancia con y sin delta en el potencial escalón.

La ecuación que gobierna la función de onda  $\psi(x, t)$  es la ecuación de Schrödinger.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x, t)\psi(x, t), \quad -\infty < x < \infty, \quad t > 0$$

Para nuestro potencial,

$$V(x, t) = V(x) = \begin{cases} W\delta(x), & \text{si } x \leq 0 \\ V_0, & \text{si } x > 0 \end{cases}$$

Tenemos que la ecuación de Schrödinger es estacionaria.

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

Donde sustituimos  $E$ , que es la energía de la partícula. Veamos las regiones de interés dejando afuera la continuidad, la cual nos servirá más tarde.

- $x < 0$

Si  $x < 0$ , entonces  $V(x) = W\delta(x)$ .

La función delta  $\delta(x)$  solo tiene efecto en el punto  $x = 0$  y provoca una discontinuidad en la derivada de la función de onda en ese punto. En la región  $x \neq 0$ , el potencial es cero, siendo explícitos en la región  $x < 0$ . La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo se reduce a la ecuación de una partícula libre:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E\psi(x)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)$$

Veamos que la derivada de segundo orden es proporcional a  $\psi(x)$  con un coeficiente negativo, nos indica que las soluciones son oscilatorias. Definimos el número de onda  $k$  como:

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

lo que nos lleva a la ecuación diferencial:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -k^2\psi(x)$$

Las soluciones generales a esta ecuación diferencial son combinaciones lineales de las funciones exponenciales complejas  $e^{ikx}$  y  $e^{-ikx}$ :  $\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$

A y B son las constantes de integración que se determinan mediante las condiciones de frontera y las condiciones de normalización.

-  $Ae^{ikx}$  representa una onda que se propaga hacia la derecha (incidente desde la izquierda).

-  $Be^{-ikx}$  representa una onda que se propaga hacia la izquierda (onda reflejada).

- $x > 0$

Si  $x > 0$ , entonces  $V(x) = V_0$ . (Pasos casi análogos al anterior)

En esta región, el potencial es constante y está dado por  $V_0$ . la ecuación de Schrödinger toma la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V_0\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi(x)$$

Acá se desprenden 2 casos.

Caso 1.  $E > V_0$

Cuando la energía de la partícula es mayor que el potencial, la diferencia  $(E - V_0)$  es positiva, lo que indica que las soluciones son oscilatorias. Definimos el número de onda  $q$  como:

$$q = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

La ecuación diferencial se convierte en:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -q^2\psi(x)$$

Sus soluciones generales son funciones exponenciales complejas:  $\psi_2(x) = Ce^{iqx} + De^{-iqx}$

C y D son constantes que se determinan mediante las condiciones de frontera.

-  $Ce^{iqx}$  representa una onda que se propaga hacia la derecha (transmitida).

-  $De^{-iqx}$  representa una onda que se propaga hacia la izquierda (onda reflejada en la región 2, que en general no está presente si no hay un potencial de barrera adicional en  $x > 0$ ).

Caso 2.  $E < V_0$

La energía de la partícula es menor que el potencial, la diferencia  $(E - V_0)$  es positiva, lo que indica que las soluciones ya no son oscilatorias, sino exponenciales. Definimos el parámetro  $\kappa$  como:

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

La ecuación diferencial toma la forma:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \kappa^2\psi(x)$$

Las soluciones son exponenciales reales:  $\psi_2(x) = Fe^{-\kappa x}$

-  $F$  es una constante que se determina mediante las condiciones de frontera.

-  $e^{-\kappa x}$  describe una onda que decae exponencialmente a medida que  $x$  crece.

Fin del análisis, continuemos

Calculemos la transmitancia y reflectancia con energía  $E > V_0$ . Dado que la energía de la partícula  $E > V_0$ , las soluciones de la ecuación de Schrödinger serán oscilatorias en ambas regiones.

$$x < 0, \quad \psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$x > 0, \quad \psi_2(x) = Ce^{iqx}, \quad q = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

Obs. que solo consideramos la solución que se propaga hacia la derecha, quitando a  $De^{-iqx}$  porque asumimos que la partícula está incidente desde la izquierda y no hay onda reflejada desde el infinito.

Tenemos las siguientes condiciones de frontera,

- Continuidad de  $\psi(x)$  en  $x = 0$ :  $\psi_1(0) = \psi_2(0) \Rightarrow A + B = C$
- Discontinuidad de la derivada de  $\psi(x)$  en  $x = 0$ , por la barrera delta,

$$\left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=0} - \left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=0} = \frac{2mW}{\hbar^2} \psi(0)$$

$$\left. \frac{d\psi_1}{dx} \right|_{x=0} = ik(A - B), \quad \left. \frac{d\psi_2}{dx} \right|_{x=0} = iqC$$

$$\Rightarrow iqC - ik(A - B) = \frac{2mW}{\hbar^2} C$$

Reemplazando  $W = \hbar \sqrt{\frac{V_0}{m}}$ , tenemos:

$$iqC - ik(A - B) = 2 \sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}} C$$

Las dos ecuaciones que tenemos son:

$$a) A + B = C, \quad b) iqC - ik(A - B) = 2 \sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}} C$$

Sustituyendo a) en b), obtenemos:

$$\begin{aligned} iq(A + B) - ik(A - B) &= 2 \sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}} (A + B). \\ iqA + iqB - ikA + ikB &= 2 \sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}} A + 2 \sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}} B \\ A \left( iq - ik - 2 \sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}} \right) &= B \left( 2 \sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}} - iq - ik \right) \end{aligned}$$

De esta ecuación, obtenemos la relación  $\frac{B}{A}$ :

$$\frac{B}{A} = \frac{iq - ik - 2 \sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}}}{-iq - ik + 2 \sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}}}$$

Coefficiente de reflexión  $R$ .

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{iq - ik - 2 \sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}}}{-iq - ik + 2 \sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}}} \right|^2$$

Coefficiente de transmisión  $T$ .

$$T = \frac{|C|^2}{|A|^2} = \frac{|A + B|^2}{|A|^2} = \frac{\left| A \left( 1 + \frac{B}{A} \right) \right|^2}{|A|^2} = \left| 1 + \frac{B}{A} \right|^2 = \left| 1 + \frac{iq - ik - 2 \sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}}}{-iq - ik + 2 \sqrt{\frac{mV_0}{\hbar^2}}} \right|^2$$

Ahora pasemos a analizar el caso asintótico, cuando  $E \gg V_0$ , consideraremos dos situaciones:

1. Potencial escalón sin delta: En este caso, el potencial es simplemente  $V(x) = V_0$  para  $x > 0$  y 0 para  $x < 0$ .
2. Potencial escalón con delta: Además del potencial escalón  $V(x) = V_0$  para  $x > 0$ , también tenemos un potencial delta  $W\delta(x)$  en  $x = 0$ .

1. Potencial escalón sin delta, la ecuación de Schrödinger en ambas regiones se resuelve como hemos visto.

$$\text{Para } x < 0: \psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\text{Para } x > 0: \psi_2(x) = Ce^{iqx}, \quad q = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$$

Dado que para  $E \gg V_0$ , el número de onda en la región  $x > 0$ ,  $q$ , se aproxima a  $k$ .  $q \approx k \left(1 - \frac{V_0}{2E}\right)$

Esto significa que las ondas incidentes y transmitidas tienen casi el mismo número de onda, lo que sugiere que la probabilidad de reflexión será pequeña.

La reflectancia es,

$$R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left(\frac{k-q}{k+q}\right)^2 \approx \left(\frac{k - k\left(1 - \frac{V_0}{2E}\right)}{k + k\left(1 - \frac{V_0}{2E}\right)}\right)^2 = \left(\frac{\frac{V_0}{2E}}{2}\right)^2 = \frac{V_0^2}{16E^2}.$$

La reflectancia es muy pequeña en el límite y decrece como  $1/E^2$ .

2. Potencial escalón con delta. Agregamos  $W\delta(x)$  en  $x = 0$ . En este caso, el potencial delta afecta la derivada de la función de onda en  $x = 0$ :

$$\frac{d\psi_2}{dx}\Big|_{0+} - \frac{d\psi_1}{dx}\Big|_{0-} = \frac{2mW}{\hbar^2} \psi(0)$$

Hay una discontinuidad en la derivada de la función de onda, esto altera la relación entre las amplitudes de las ondas incidentes, reflejadas y transmitidas.

Para  $E \gg V_0$ , el cálculo de la reflectancia  $R$  con el potencial delta en  $x = 0$  lleva a la expresión

$$R \approx \left(\frac{mW}{\hbar^2 k}\right)^2 = \frac{W^2}{\hbar^4} \frac{m^2}{2mE} = \frac{W^2}{2\hbar^2 E}$$

En este límite,  $R$  disminuye inversamente con  $E$ , es decir,  $1/E$  cuando  $E \gg V_0$ , lo que es mucho más lento que la dependencia en el caso sin el delta.

Sin el potencial delta vemos que significa que, a energías altas, la probabilidad de reflexión es extremadamente baja.

Con el potencial delta vemos que significa que incluso a energías muy altas, sigue habiendo una mayor probabilidad de reflexión debido a la presencia del potencial delta en  $x = 0$ .

La reflectancia sin el potencial delta es mucho menor que con el delta.

2. Una partícula de masa  $m$  se encuentra en el estado base de un pozo de potencial infinito de ancho  $L$ . A  $t = 0$  dicho potencial se expande a un tamaño mayor, i. e. la pared derecha se mueve de  $L$  a  $1.5L$  dejando la función de onda montanamente sin variación. Posteriormente se mide la energía de la partícula.
- (0.6 pts.) Escriba la función de onda normalizada de la partícula en el nuevo pozo para  $t > 0$ .
  - (0.8 pts.) ¿Cuál es la energía  $E$  as probable medida y cual es el valor esperado de la energía?
  - (0.6 pts.) ¿Cuál es la probabilidad de hallar a la partícula en la región  $[L, 1.5L]$  a  $t > 0$ ?

Antes de que el pozo se expanda, está en el estado base dentro de un pozo de potencial infinito. En el estado base del pozo de potencial infinito de ancho  $L$ , la función de onda es:

$$\psi_b = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right), \quad 0 < x < L$$

Recordemos que este estado es aquel con la energía más baja posible, que tiene la forma de la función sinusoidal más simple dentro del pozo.

Consideremos que en  $t = 0$ , el pozo se expande repentinamente, i. e. la pared derecha se moverá de  $x = L$  a  $x = 1.5L$ . Pero la función de onda, se nos dice que no cambia de manera instantánea, así que justo después de la expansión, esta función seguirá siendo la misma, pero ahora en un pozo con una nueva longitud  $L = 1.5L$ . Por lo tanto, la función de onda en el nuevo pozo será la misma función de onda inicial, pero tenemos que recalcular la normalización en el nuevo intervalo  $[0, 1.5L]$ .

$$\psi(x, t = 0) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right), \quad 0 < x < 1.5L$$

Normalicemos la función de onda para encontrar la probabilidad total de encontrar la partícula en cualquier punto dentro del pozo y debe ser 1.

$$\int_0^{1.5L} |\psi(x)|^2 dx = 1 \Rightarrow \int_0^{1.5L} \left( \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \right)^2 dx = \frac{2}{L} \int_0^{1.5L} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx = \frac{2}{L} \frac{1.5L}{2} = 1.5 \neq 1$$

Esto significa que la función de onda original ya no está normalizada en el nuevo pozo de longitud  $1.5L$ . Para normalizarla, tenemos que multiplicar la función de onda por un factor adicional  $1/\sqrt{1.5L}$ .

La función de onda normalizada en el nuevo pozo de anchura  $1.5L$  es:

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{1.5L}} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right), \quad 0 < x < 1.5L$$

Con esto confirmamos que la función de onda esta correctamente normalizada de  $[0, 1.5L]$ .

b)

Si bien la función de onda no cambio inmediatamente, los estados de energía del pozo si que han cambiado pues la anchura del pozo aumento y esto modifiko los estados estacionarios y sus energías.

Para el nuevo pozo de anchura  $1.5L$ , los estados estacionarios son funciones de onda que cumplen con las condiciones de contorno del pozo infinito y tienen la forma:

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{1.5L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{1.5L}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Cada uno de estos estados estacionarios tiene una energía asociada que depende del número cuántica  $n$  y de la anchura del pozo  $1.5L$ . La energía del estado  $n$  –esimo es:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m(1.5L)^2}$$

Sabemos que la función de onda no cambia inmediatamente y que no se trata de un estado estacionario, por lo que podemos expresarlo como una superposición de los nuevos estados estacionarios  $\phi_n(x)$  en el pozo expandido. Describámoslo escribiendo la función de onda inicial como una combinación lineal de los nuevos estados:

$$\psi(x, t > 0) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x)$$

Siendo  $c_n$  los coeficientes que nos determinan la contribución que tiene cada estado  $\phi_n(x)$  de la expansión y podemos calcularlos proyectando la función de onda inicial sobre cada uno de los estados  $\phi_n(x)$ :

$$c_n = \int_0^{1.5L} \psi(x, t = 0) \phi_n(x) dx$$

Siendo  $|c_n|^2$  la probabilidad de encontrar la partícula en el estado  $n$ ésimo en el pozo expandido. La energía más probable corresponde al valor  $E_n$  para el estado  $\phi_n(x)$  que tiene la mayor probabilidad, es decir  $|c_n|^2$  es máximo. Por lo tanto, el valor esperado de la energía es la suma de las energías posibles por su probabilidad:

$$\langle E \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n$$

Una vez ya explicada la teoría, pasemos a calcular los coeficientes de forma explícita. Los coeficientes  $c_n$  se obtienen proyectando  $\psi(x, t = 0)$  sobre cada  $\phi_n(x)$ :

$$\begin{aligned} c_n &= \int_0^{1.5L} \psi(x, t = 0) \phi_n(x) dx = \int_0^{1.5L} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \cdot \sqrt{\frac{2}{1.5L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{1.5L}\right) dx \\ &= \frac{2}{\sqrt{1.5L}} \int_0^{1.5L} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{1.5L}\right) dx \end{aligned}$$

Para resolver esta integral, usamos una identidad trigonométrica que nos permite simplificar el producto de dos senos:

$$\sin A \sin B = \frac{1}{2} [\cos(A - B) - \cos(A + B)]$$

$$\sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n\pi x}{1.5L}\right) = \frac{1}{2} \left[ \cos\left(\frac{\pi x}{L} - \frac{n\pi x}{1.5L}\right) - \cos\left(\frac{\pi x}{L} + \frac{n\pi x}{1.5L}\right) \right]$$

La integral de coseno en el intervalo  $[0, 1.5]$  da cero, excepto en los casos donde las frecuencias seno coinciden.

Para  $n=1$ , se simplifica significativamente la integral, ya que las frecuencias coinciden. Esto da un resultado distinto de cero, lo que significa que el coeficiente  $c_1$  es no nulo.

Para  $n \neq 1$ , las integrales de coseno oscilan y dan cero debido a la ortogonalidad de las funciones seno. Por lo tanto, los coeficientes  $c_n$  para  $n \neq 1$  son muy pequeños o nulos.

Así que para toda  $n \neq 1$  los coeficientes  $c_n$  son nulos, de modo que  $c_1$  es el estado más importante en la expansión de la función de onda inicial y este es  $\phi_1(x)$ .

Para el estado  $n = 1$ , tenemos:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m(1.5L)^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4.5mL^2}$$

Esta es la energía más probable, ya que  $c_1$  es el coeficiente mayor.

Dado que  $|c_1|^2 = 1$  y todos los demás coeficientes son cero, el valor esperado de la energía es simplemente la energía del segundo estado:

$$\langle E \rangle = E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{4.5mL^2}$$

c)

La probabilidad de encontrar una partícula en un intervalo  $[x_1, x_2]$  viene dada por la integral del valor absoluto cuadrado de la función de onda en ese intervalo:

$$P(L \leq x \leq 1.5L) = \int_L^{1.5L} |\psi(x, t)|^2 dx$$

Vimos en incisos anteriores, que la función de onda en el instante inmediatamente después sigue siendo la función de onda inicial  $\psi(x, t = 0)$ , que está dada por:

$$\psi(x, t = 0) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$

Entonces,

$$P(L \leq x \leq 1.5L) = \int_L^{1.5L} \left( \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) \right)^2 dx = \frac{2}{L} \int_L^{1.5L} \sin^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx$$



La integral contiene un  $\sin^2$ , que podemos simplificar usando la identidad trigonométrica:

$$\sin^2 A = \frac{1}{2}(1 - \cos(2A))$$

Aplicamos esta identidad en nuestra integral, donde  $A = \frac{\pi x}{L}$ :

$$\begin{aligned} P(L \leq x \leq 1.5L) &= \frac{2}{L} \int_L^{1.5L} \frac{1}{2} \left( 1 - \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \right) dx = \frac{1}{L} \int_L^{1.5L} \left( 1 - \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) \right) dx \\ &= \frac{1}{L} \left( \int_L^{1.5L} 1 \, dx - \int_L^{1.5L} \cos\left(\frac{2\pi x}{L}\right) dx \right) = \frac{1}{L} [(0.5L) - 0] = 0.5 \end{aligned}$$

Por lo tanto,  $P(L \leq x \leq 1.5L) = 0.5$

La probabilidad de encontrar la partícula en la región  $[L, 1.5L]$  justo después de la expansión del pozo es 0.5 (50%).

Al haberse expandido, la mitad de la probabilidad de encontrar la partícula permanece en la región  $[0, L]$ , mientras que la otra mitad está en la nueva región  $[L, 1.5L]$ .

3. Considere un oscilador armónico unidimensional con  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$  y los eigenestados  $|n\rangle$ .

a) (0.6 pts.) Usando los operadores de ascenso  $\hat{a}^\dagger$  y descenso  $\hat{a} = \frac{(m\omega^2 x^2 + i\hat{p})}{\sqrt{2\hbar m\omega}}$ , calcule el valor esperado  $\langle n|x^s|n\rangle$  para  $s = 1, 2$  y  $4$ .

b) (1.2 pts.) Sea  $\Psi = \frac{(|n\rangle + |n+1\rangle)}{\sqrt{2}}$ , calcule  $\sigma_x(t) \equiv \sqrt{\langle \Psi(t)|\hat{x}^2|\Psi(t)\rangle - \langle \Psi(t)|\hat{x}|\Psi(t)\rangle^2}$  y  $\sigma_p(t) \equiv \sqrt{\langle \Psi(t)|\hat{p}^2|\Psi(t)\rangle - \langle \Psi(t)|\hat{p}|\Psi(t)\rangle^2}$ , así como  $\sigma_x(t)\sigma_p(t)$  en términos de  $\hbar$  para todo  $t$ .

a)

Los operadores ascenso y descenso se definen como:

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

El hamiltoniano del oscilador armónico unidimensional lo definimos como:

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

Tenemos un oscilador armónico, el operador de posición  $\hat{x}$  lo podemos expresar en términos de los operadores de ascenso y descenso.

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \Rightarrow \hat{x}^n = \left( \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}(\hat{a}^\dagger + \hat{a}) \right)^n$$

El operador descenso  $\hat{a}$  actúa sobre el estado  $|n\rangle$ , bajando el núm. cuántico:  $\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$

El operador ascenso  $\hat{a}^\dagger$  actúa sobre el estado  $|n\rangle$ , sube el núm. cuántico:  $\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$

Calculemos los valores esperados. Tengamos muy en cuenta que  $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$

- Para  $s = 1$ :

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{x}|n\rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle n|\hat{a}^\dagger + \hat{a}|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\langle n|\hat{a}^\dagger|n\rangle + \langle n|\hat{a}|n\rangle) \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\langle n|\sqrt{n+1}|n+1\rangle + \langle n|\sqrt{n}|n-1\rangle) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (0 + 0) = 0 \end{aligned}$$

- Para  $s = 2$ :

$$\begin{aligned} \langle n|\hat{x}^2|n\rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n|(\hat{a}^\dagger + \hat{a})^2|n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle n|\hat{a}^{\dagger 2} + \hat{a}^\dagger \hat{a} + \hat{a} \hat{a}^\dagger + \hat{a}^2|n\rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m\omega} (\langle n|\hat{a}^{\dagger 2}|n\rangle + \langle n|\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle + \langle n|\hat{a} \hat{a}^\dagger|n\rangle + \langle n|\hat{a}^2|n\rangle) \end{aligned}$$

- $\langle n | \hat{a}^{\dagger 2} | n \rangle$ , el operador  $\hat{a}^{\dagger 2}$  sube el número cuántico en 2, por lo que  $\langle n | \hat{a}^{\dagger 2} | n \rangle = 0$
- $\langle n | \hat{a}^{\dagger} \hat{a} | n \rangle$ , este simplemente es el numero cuántico  $n$ ,  $\langle n | \hat{a}^{\dagger} \hat{a} | n \rangle = 0$
- $\langle n | \hat{a} \hat{a}^{\dagger} | n \rangle$ , tenemos la relación  $[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}] = 1 \Rightarrow \hat{a}^{\dagger} \hat{a} = \hat{a} \hat{a}^{\dagger} + 1 \Rightarrow \langle n | \hat{a} \hat{a}^{\dagger} | n \rangle = n + 1$
- $\langle n | \hat{a}^2 | n \rangle$ , el operador  $\hat{a}^2$  baja el numero cuántico en 2, por lo que  $\langle n | \hat{a}^2 | n \rangle = 0$

Entonces,

$$\langle n | \hat{x}^2 | n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (0 + \langle n | \hat{a}^{\dagger} \hat{a} | n \rangle + \langle n | \hat{a} \hat{a}^{\dagger} | n \rangle + 0) = \frac{\hbar}{2m\omega} (n + n + 1) = \frac{\hbar}{2m\omega} (2n + 1)$$

- Para  $s = 4$ :

$$\langle n | \hat{x}^4 | n \rangle = \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \langle n | (\hat{a}^{\dagger} + \hat{a})^4 | n \rangle = \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \langle n | \hat{a}^{\dagger 4} + \hat{a}^{\dagger 3} \hat{a} + \hat{a}^{\dagger 2} \hat{a}^2 + \hat{a}^{\dagger} \hat{a}^3 + \hat{a}^4 | n \rangle$$

- $\langle n | \hat{a}^{\dagger 4} | n \rangle$ , el operador  $\hat{a}^{\dagger 4}$  sube el número cuántico en 4, por lo que  $\langle n | \hat{a}^{\dagger 4} | n \rangle = 0$
- $\langle n | \hat{a}^{\dagger 3} \hat{a} | n \rangle$ , el numero cuántico sube en 3 y baja en 1, por lo que  $\langle n | \hat{a}^{\dagger 3} \hat{a} | n \rangle = 0$
- $\langle n | \hat{a}^{\dagger 2} \hat{a}^2 | n \rangle$ , como  $\hat{a}^2 | n \rangle = \sqrt{n(n-1)} | n-2 \rangle$ ,  $\hat{a}^{\dagger 2} | n \rangle = \sqrt{(n+1)(n+2)} | n+2 \rangle$

$$\langle n | \hat{a}^{\dagger 2} \hat{a}^2 | n \rangle = 6n(n-1)$$

- $\langle n | \hat{a}^{\dagger} \hat{a}^3 | n \rangle$ , nuevamente cambia el numero cuántico, por lo que  $\langle n | \hat{a}^{\dagger} \hat{a}^3 | n \rangle = 0$
- $\langle n | \hat{a}^4 | n \rangle$ , el operador  $\hat{a}^4$  baja el número cuántico en 4, por lo que  $\langle n | \hat{a}^4 | n \rangle = 0$

Entonces,

$$\langle n | \hat{x}^4 | n \rangle = \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 \langle n | \hat{a}^{\dagger 2} \hat{a}^2 | n \rangle = \left( \frac{\hbar}{2m\omega} \right)^2 (6n(n-1)) = \frac{3\hbar^2}{2m^2\omega^2} (n^2 - n)$$

b)

El estado  $|\Psi\rangle$  es una superposición de dos estados:  $|\Psi\rangle = \frac{(|n\rangle + |n+1\rangle)}{\sqrt{2}}$ , calculemos para  $\hat{x}$ :

$$\begin{aligned} \langle \Psi(t) | \hat{x} | \Psi(t) \rangle &= \left\langle \frac{(|n\rangle + |n+1\rangle)}{\sqrt{2}} \left| \hat{x} \right| \frac{(|n\rangle + |n+1\rangle)}{\sqrt{2}} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} (\langle n | \hat{x} | n \rangle + \langle n | \hat{x} | n+1 \rangle + \langle n+1 | \hat{x} | n \rangle + \langle n+1 | \hat{x} | n+1 \rangle) \\ &= \frac{1}{2} (\langle n | \hat{x} | n \rangle + \langle n+1 | \hat{x} | n+1 \rangle + 2\langle n | \hat{x} | n+1 \rangle) \end{aligned}$$

- $\langle n | \hat{x} | n \rangle = 0$
- $\langle n+1 | \hat{x} | n+1 \rangle = 0$
- $\langle n | \hat{x} | n+1 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{n+1}$

$$\langle \Psi(t) | \hat{x} | \Psi(t) \rangle = \frac{1}{2} 2 \langle n | \hat{x} | n+1 \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{n+1}$$

Calculemos para  $\hat{x}^2$ :

$$\langle \Psi(t) | \hat{x}^2 | \Psi(t) \rangle = \frac{1}{2} (\langle n | \hat{x}^2 | n \rangle + \langle n+1 | \hat{x}^2 | n+1 \rangle + 2 \langle n | \hat{x}^2 | n+1 \rangle)$$

- Ya habíamos visto que,  $\langle n | \hat{x}^2 | n \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1)$
- Usando lo anterior,  $\langle n+1 | \hat{x}^2 | n+1 \rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} (2(n+1)+1) = \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+3)$
- $\langle n | \hat{x}^2 | n+1 \rangle = 0$

$$\langle \Psi(t) | \hat{x}^2 | \Psi(t) \rangle = \frac{1}{2} \left( \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+1) + \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+3) \right) = \frac{\hbar}{2m\omega} (2n+2)$$

Con esto podemos calcular  $\sigma_x$ ,

$$\begin{aligned} \sigma_x(t) &= \sqrt{\langle \Psi(t) | \hat{x}^2 | \Psi(t) \rangle - \langle \Psi(t) | \hat{x} | \Psi(t) \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega} (2n+2) - \left( \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sqrt{n+1} \right)^2} \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega} (2n+2) - \frac{\hbar}{2m\omega} (n+1)} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega} [2n+2-n-1]} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega} (n+1)} \end{aligned}$$

El operador momento  $\hat{p}$  en términos de los operadores de creación  $\hat{a}^\dagger$  y aniquilación  $\hat{a}$  es:

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

Calculemos para  $\hat{p}$ :

$$\langle \Psi(t) | \hat{p} | \Psi(t) \rangle = \frac{1}{2} (\langle n | \hat{p} | n \rangle + \langle n+1 | \hat{p} | n+1 \rangle + \langle n | \hat{p} | n+1 \rangle + \langle n+1 | \hat{p} | n \rangle)$$

- $\langle n | \hat{p} | n \rangle = 0$
- $\langle n+1 | \hat{p} | n+1 \rangle = 0$
- $\langle n | \hat{p} | n+1 \rangle = i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} \sqrt{n+1}$
- $\langle n+1 | \hat{p} | n \rangle = -i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} \sqrt{n+1}$

$$\langle \Psi(t) | \hat{p} | \Psi(t) \rangle = \frac{1}{2} \left( i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} \sqrt{n+1} - i \sqrt{\frac{\hbar m \omega}{2}} \sqrt{n+1} \right) = 0$$

Calculemos para  $\hat{p}^2$ :

$$\langle \Psi(t) | \hat{p}^2 | \Psi(t) \rangle = \frac{1}{2} (\langle n | \hat{p}^2 | n \rangle + \langle n+1 | \hat{p}^2 | n+1 \rangle + 2 \langle n | \hat{p}^2 | n+1 \rangle)$$

- $\langle n|\hat{p}^2|n\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}(2n+1)$
- $\langle n+1|\hat{p}^2|n+1\rangle = \frac{\hbar m\omega}{2}(2n+3)$
- $\langle n|\hat{p}^2|n+1\rangle = 0$

$$\begin{aligned}\langle \Psi(t)|\hat{p}^2|\Psi(t)\rangle &= \frac{1}{2} \left( \frac{\hbar m\omega}{2}(2n+1) + \frac{\hbar m\omega}{2}(2n+3) \right) = \frac{1}{2} \frac{\hbar m\omega}{2}(2n+1+2n+3) \\ &= \frac{1}{2} \frac{\hbar m\omega}{2}(4n+4) = \hbar m\omega(n+1)\end{aligned}$$

Con esto podemos calcular  $\sigma_p$ ,

$$\sigma_p(t) = \sqrt{\langle \Psi(t)|\hat{p}^2|\Psi(t)\rangle - \langle \Psi(t)|\hat{p}|\Psi(t)\rangle^2} = \sqrt{\hbar m\omega(n+1) - 0^2} = \sqrt{\hbar m\omega(n+1)}$$

El producto de las incertidumbres es:

$$\sigma_x(t)\sigma_p(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}(n+1)}\sqrt{\hbar m\omega(n+1)} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}(n+1)\hbar m\omega(n+1)} = \frac{1}{2}\hbar(n+1)$$

Vemos que satisface el principio de incertidumbre, ya que siempre es mayor o igual que  $\hbar/2$ , con la igualdad ocurriendo en el estado fundamental  $n = 0$ .

$$\sigma_x(t)\sigma_p(t) \geq \hbar/2$$

4. Una partícula de carga eléctrica  $q$  está en un potencial de oscilador armónico tridimensional y un campo eléctrico uniforme ( $\vec{\epsilon}$ ) con hamiltoniano  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} - q\vec{\epsilon} \cdot \vec{r}$  con  $\vec{r} = (x, y, z)$  y  $\vec{\epsilon} = (\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z)$ .

- a) (0.8 pts.) Encuentre las energías permitidas  $E_n$ .  
b) (0.7 pts.) Determine la degeneración para cada energía  $E_n$ .

a)

El hamiltoniano tiene sus 3 términos:

- Energía cinética:  $\frac{\hat{p}^2}{2m}$ , donde  $\hat{p}$  es el operador de momento de la partícula.
- Energía potencial del oscilador armónico:  $\frac{m\omega^2 r^2}{2}$ , podemos ver que se trata de una función cuadrática.
- Su interacción con el campo eléctrico:  $q\vec{\epsilon} \cdot \vec{r}$ , que evidentemente es la interacción de la carga  $q$  con el campo eléctrico uniforme.

Observemos primero la perturbación, esta desplaza el potencial del oscilador armónico:  $q\vec{\epsilon} \cdot \vec{r}$

Donde,  $\vec{r}$  es el desplazamiento debido al campo eléctrico,  $\vec{r} = \frac{q\vec{\epsilon}}{2m\omega^2}$

Vamos a sustituirlo,

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} - q\vec{\epsilon} \cdot \frac{q\vec{\epsilon}}{m\omega^2} \\ &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 r^2}{2} - \frac{q^2 \epsilon^2}{2m\omega^2}\end{aligned}$$

Para los niveles energías del oscilador armónico tridimensional es:

$$E_A = \hbar\omega \left( n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right)$$

Con  $n_x, n_y, n_z$  siendo los números cuánticos asociados a los modos de oscilación en sus respectivas direcciones, como sabemos estos tomando valores de enteros. Por otra parte,  $\frac{3}{2}$  representa la energía del estado base, es decir, en el punto cero de la energía del oscilador.

Para nuestro sistema será la suma de las energías del oscilador armónico y su corrección constante debido al campo eléctrico,

$$E_n = \hbar\omega \left( n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) - \frac{q^2 \epsilon^2}{2m\omega^2}$$

De modo que estas son las energías permitidas, donde  $n = n_x + n_y + n_z$  que determina el nivel de energía.

b)

La degeneración  $g_n$  en un oscilador armónico tridimensional depende de la cantidad de formas en los que los números cuánticos  $n_x, n_y, n_z$  pueden combinarse para dar el valor  $n$ .

El número de soluciones no negativas de la ecuación  $n = n_x + n_y + n_z$  es un problema estándar de combinatoria, podemos resolverlo con la técnica de contar soluciones de ecuaciones lineales enteras no negativas.

Véase que el problema es equivalente a distribuir  $n$  entre 3 comportamientos, así que usemos combinatoria para contar la cantidad de maneras de dividir un número entero  $n$  entre  $k$ .

$$\text{Num. soluciones} = \binom{n+k-1}{k-1}$$

Entonces para nuestra degeneración  $g_n, k = 3$

$$g_n = \binom{n+2}{2} = \frac{(n+2)(n+1)}{2}$$

Ej.

Para  $n = 0, 0 = n_x + n_y + n_z$

$$(0,0,0)$$

$$g_0 = 1$$

Para  $n = 1, 1 = n_x + n_y + n_z$

$$(1,0,0), (0,1,0), (0,0,1)$$

$$g_1 = 3$$

Para  $n = 2, 2 = n_x + n_y + n_z$

$$(2,0,0), (0,2,0), (0,0,2), (1,1,0), (1,0,1), (0,1,1)$$

$$g_2 = 6$$

Para  $n = 3, 3 = n_x + n_y + n_z$

$$(3,0,0), (0,3,0), (0,0,3), (2,1,0), (2,0,1), (1,2,0), (1,0,2), (0,2,1), (0,1,2), (1,1,1)$$

$$g_3 = 10$$

5. Un átomo de hidrogeno se encuentra en un estado  $|\Psi\rangle = |p_x\rangle + 2i|p_y\rangle + 2|p_z\rangle$  con  $n = 2$  y  $l = 1$ .
- a) (0.6 pts.) Pruebe si  $\Psi(\vec{r})$  es eigenfunción de  $\hat{L}^2$  y  $\hat{L}_z$ .
- b) (0.6 pts.) Calcule los posibles valores de  $\hat{L}_z$  y las probabilidades correspondientes.
- a)

La función  $\Psi$  será eigenfunción de algún operador  $\hat{O}$  si al actuar con este sobre  $\Psi$ , se obtiene la misma función multiplicada por eigenvalor, i. e.  $\hat{O}\Psi = \lambda\Psi$ .

El operador  $\hat{L}^2$  describe el cuadrado del momento angular orbital total y actúa sobre las funciones asociadas a los armónicos esféricos  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ . Su eigenvalor es  $l(l+1)\hbar^2$ , donde  $l$  es el número cuántico del momento angular orbital. Si  $\Psi$  es eigenfunción de  $\hat{L}^2$ , el operador satisface la ecuación:  $\hat{L}^2\Psi = l(l+1)\hbar^2\Psi$ .

El operador  $\hat{L}_z$  es a la componente z del momento angular, y tiene el eigenvalor  $m\hbar$ , donde  $m$  es el número cuántico magnético. Si  $\Psi$  es eigenfunción de  $\hat{L}_z$  se satisface la ecuación:  $\hat{L}_z\Psi = m\hbar\Psi$ .

- Para  $\hat{L}^2$

Tenemos el estado cuántico  $n = 2$  y  $l = 1$ . Entonces el valor de  $l$  está definido en los estados  $|p_x\rangle, |p_y\rangle, |p_z\rangle$ , obtengamos los eigenvalores,

$$\hat{L}^2|p_x\rangle = l(l+1)\hbar^2|p_x\rangle = 2\hbar^2|p_x\rangle$$

$$\hat{L}^2|p_y\rangle = l(l+1)\hbar^2|p_y\rangle = 2\hbar^2|p_y\rangle$$

$$\hat{L}^2|p_z\rangle = l(l+1)\hbar^2|p_z\rangle = 2\hbar^2|p_z\rangle$$

Entonces,

$$\hat{L}^2|\Psi\rangle = \hat{L}^2(|p_x\rangle + 2i|p_y\rangle + 2|p_z\rangle) = 2\hbar^2|p_x\rangle + (2i)2\hbar^2|p_y\rangle + (2)2\hbar^2|p_z\rangle = 2\hbar^2|\Psi\rangle$$

Por lo tanto, se satisface que  $\hat{L}^2\Psi = l(l+1)\hbar^2\Psi$ ,  $|\Psi\rangle$  es eigenfunción de  $\hat{L}^2$  con eigenvalor  $2\hbar^2$ .

- Para  $\hat{L}_z$

Veamos cómo actúa este operador sobre las componentes de  $\Psi$  es la ase de los estados  $|p_x\rangle, |p_y\rangle, |p_z\rangle$ . Dado que este operador es la componente z del momento angular orbital y sus eigenvalores son  $m\hbar$  con  $m$  el numero cuántico magnético, entonces puede tomar los valores entre  $-l, -l+1, \dots, l-1, l$ .

Veamos la relación de los estados  $p_x, p_y, p_z$  con los armónicos esféricos.

$|p_x\rangle$  es una combinación de los armónicos esféricos  $Y_{1,1}$  y  $Y_{1,-1}$ , con  $m = 0$ .

$|p_y\rangle$  corresponde al estado  $m = +1$

$|p_z\rangle$  corresponde al estado  $m = -1$

Por lo tanto, bajo la acción de  $\hat{L}_z$ ,

$$\hat{L}_z|p_x\rangle = m\hbar|p_x\rangle = 0, \quad \hat{L}_z|p_y\rangle = m\hbar|p_y\rangle = \hbar|p_y\rangle, \quad \hat{L}_z|p_z\rangle = m\hbar|p_z\rangle = -\hbar|p_z\rangle$$



Ahora apliquemos  $\hat{L}_z$  a  $\Psi$ ,

$$\hat{L}_z|\Psi\rangle = \hat{L}_z(|p_x\rangle + 2i|p_y\rangle + 2|p_z\rangle) = 0 + (2i)\hbar|p_y\rangle + 2(-\hbar|p_z\rangle) = 2i\hbar|p_y\rangle - 2\hbar|p_z\rangle$$

Para que se cumpla debería ser una constante multiplicada por  $\Psi$  pero observemos que no satisface la componente  $p_x$  de ninguna forma, por lo tanto, no hay combinación proporcional. Por lo tanto,  $|\Psi\rangle$  no es eigenfunción de  $\hat{L}_z$ .

b)

Calculemos cuales son los valores posibles de  $\hat{L}_z$  y sus probabilidades correspondientes.

Recordemos que los eigenvalores son  $m\hbar$  con  $m$  el núm. cuántico magnético, tomamos los valores entre  $-l, -l+1, \dots, l-1, l$ . Esto significa que los posibles valores son:  $\hat{L}_z = -\hbar, 0, \hbar$

Retomemos que los estados  $|p_x\rangle, |p_y\rangle, |p_z\rangle$  los podemos interpretar como combinaciones de los estados propios de  $\hat{L}_z$ , es decir,  $|l=1, m=-1\rangle, |l=1, m=0\rangle, |l=1, m=1\rangle$ . Los cuales corresponden a los armónicos esféricos. Los estados de momentos angulares en la dirección  $x, y, z$  se pueden relacionar con los estados  $|l=1, m\rangle$  mediante las relaciones:

$$|p_x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,1\rangle - |1,-1\rangle), \quad |p_y\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(|1,1\rangle + |1,-1\rangle), \quad |p_z\rangle = |1,0\rangle$$

Entonces podemos expresar  $\Psi$  como una combinación de los estados  $|1,1\rangle, |1,0\rangle$  y  $|1,-1\rangle$ .

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1,1\rangle - |1,-1\rangle) + 2i\frac{i}{\sqrt{2}}(|1,1\rangle + |1,-1\rangle) + 2|1,0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}|1,1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1,-1\rangle - 2\frac{1}{\sqrt{2}}(|1,1\rangle + |1,-1\rangle) + 2|1,0\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}|1,1\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|1,-1\rangle - \frac{2}{\sqrt{2}}|1,1\rangle - \frac{2}{\sqrt{2}}|1,-1\rangle + 2|1,0\rangle \\ &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{2}{\sqrt{2}}\right)|1,1\rangle + \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{2}{\sqrt{2}}\right)|1,-1\rangle + 2|1,0\rangle \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}}|1,1\rangle - \frac{3}{\sqrt{2}}|1,-1\rangle + 2|1,0\rangle \end{aligned}$$

Las probas de cada valor de  $\hat{L}_z = m\hbar$  son el cuadrado del coeficiente de cada estado  $|l=1, m\rangle$ ,

- Coeficiente de  $|1,1\rangle$ , su proba de medir  $\hat{L}_z = \hbar$ ,

$$P(m=1) = \left|-\frac{1}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{1}{2}$$

- Coeficiente de  $|1,-1\rangle$ , su proba de medir  $\hat{L}_z = -\hbar$ ,

$$P(m=-1) = \left|-\frac{3}{\sqrt{2}}\right|^2 = \frac{9}{2}$$

- Coeficiente de  $|1,0\rangle$ , su proba de medir  $\hat{L}_z = 0$ ,

$$P(m=0) = |2|^2 = 4$$

La suma de las probabilidades debe dar 1, de modo que, si no, habría que normalizarlas.

$$\frac{1}{2} + \frac{9}{2} + 4 = 9 \neq 1$$

Dividamos cada proba entre 9.

- Proba normalizada de medir  $\hat{L}_z = \hbar$ ,

$$P(m = 1) = \frac{\frac{1}{2}}{9} = \frac{1}{18}$$

- Proba normalizada de medir  $\hat{L}_z = -\hbar$ ,

$$P(m = -1) = \frac{\frac{9}{2}}{9} = \frac{1}{2}$$

- Proba normalizada de medir  $\hat{L}_z = 0$ ,

$$P(m = 0) = \frac{4}{9}$$

6. Sea  $|\Psi(\vec{r}, t = 0)\rangle = (|\Psi_{1,0,0}\rangle + |\Psi_{2,0,0}\rangle)/\sqrt{2}$  la función de onda de un átomo de hidrógeno a  $t = 0$ .

a) (0.5 pts.) Escriba la evolución temporal  $|\Psi(\vec{r}, t)\rangle$ .

b) (1.4 pts.) Calcule el valor esperado dependiente del tiempo de la energía potencial  $V(r) = -e^2/r$  y el de la energía cinética  $\hat{T} = \hat{p}^2/2\mu$ , es decir,  $\langle\Psi(\vec{r}, t)|V(r)|\Psi(\vec{r}, t)\rangle$  y  $\langle\Psi(\vec{r}, t)|\hat{T}|\Psi(\vec{r}, t)\rangle$ .

a)

Partamos de la función de onda del átomo de hidrógeno en  $t = 0$ :

$$|\Psi(\vec{r}, t = 0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_{1,0,0}\rangle + |\Psi_{2,0,0}\rangle)$$

Lo que nos dice es que el sistema cuántico se encuentra inicialmente en una superposición de dos estados propios del átomo de hidrógeno (el estado fundamental  $|\Psi_{1,0,0}\rangle$  y el primer estado excitado  $|\Psi_{2,0,0}\rangle$ ), ambos con igual probabilidad.

La evolución temporal de un sistema cuántico está descrita por la ecuación de Schrödinger. Para un estado  $|\Psi_n\rangle$ , la evolución en el tiempo se da por:

$$|\Psi_n\rangle = |\Psi_n(0)\rangle e^{-iE_n t/\hbar}$$

Para el átomo de hidrógeno, los niveles de energía están cuantizados y vienen dados por la fórmula:

$$E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}$$

- Para  $n = 1$  (estado fundamental):

$$E_1 = -\frac{13.6 \text{ eV}}{1^2} = -13.6 \text{ eV}$$

- Para  $n = 2$  (primer estado excitado):

$$E_2 = -\frac{13.6 \text{ eV}}{2^2} = -\frac{13.6}{4} \text{ eV} = -3.4 \text{ eV}$$

Por lo tanto, la función de onda en  $t > 0$  se expresa como:

$$|\Psi(\vec{r}, t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_{1,0,0}\rangle e^{-iE_1 t/\hbar} + |\Psi_{2,0,0}\rangle e^{-iE_2 t/\hbar}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_{1,0,0}\rangle e^{i\frac{13.6 \text{ eV} t}{\hbar}} + |\Psi_{2,0,0}\rangle e^{i\frac{3.4 \text{ eV} t}{\hbar}})$$

b)

El potencial electrostático del átomo de hidrogeno es:  $V(r) = -e^2/r$

En la energía cinética tenemos a  $\hat{p}^2$  es el operador al cuadrado que describe la energía cinética del electro y  $\mu$  la masa reducida del sistema electrón – protón:  $\hat{T} = \hat{p}^2/2\mu$

Teníamos que la función de onda en el tiempo esta dado por:

$$|\Psi(\vec{r}, t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Psi_{1,0,0}\rangle e^{-iE_1 t/\hbar} + |\Psi_{2,0,0}\rangle e^{-iE_2 t/\hbar})$$

Calculemos el valor esperado de la energía potencial,

$$\begin{aligned} \langle V(r) \rangle(t) &= \langle \Psi(\vec{r}, t) | V(r) | \Psi(\vec{r}, t) \rangle \\ &= \left( \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Psi_{1,0,0}\rangle e^{-\frac{iE_1 t}{\hbar}} + |\Psi_{2,0,0}\rangle e^{-\frac{iE_2 t}{\hbar}}) \right) V(r) \left( \frac{1}{\sqrt{2}} (|\Psi_{1,0,0}\rangle e^{-iE_1 t/\hbar} \right. \\ &\quad \left. + |\Psi_{2,0,0}\rangle e^{-iE_2 t/\hbar}) \right) \\ &= \frac{1}{2} \left( e^{\frac{i(E_1-E_1)t}{\hbar}} \langle \Psi_{1,0,0} | V(r) | \Psi_{1,0,0} \rangle + e^{\frac{i(E_2-E_2)t}{\hbar}} \langle \Psi_{2,0,0} | V(r) | \Psi_{2,0,0} \rangle \right. \\ &\quad \left. + e^{\frac{i(E_1-E_2)t}{\hbar}} \langle \Psi_{1,0,0} | V(r) | \Psi_{2,0,0} \rangle + e^{\frac{i(E_2-E_1)t}{\hbar}} \langle \Psi_{2,0,0} | V(r) | \Psi_{1,0,0} \rangle \right) \\ &= \frac{1}{2} \left( \langle \Psi_{1,0,0} | V(r) | \Psi_{1,0,0} \rangle + \langle \Psi_{2,0,0} | V(r) | \Psi_{2,0,0} \rangle + e^{\frac{i(E_1-E_2)t}{\hbar}} \langle \Psi_{1,0,0} | V(r) | \Psi_{2,0,0} \rangle \right. \\ &\quad \left. + e^{\frac{i(E_2-E_1)t}{\hbar}} \langle \Psi_{2,0,0} | V(r) | \Psi_{1,0,0} \rangle \right) \end{aligned}$$

Donde,  $\langle \Psi_{1,0,0} | V(r) | \Psi_{1,0,0} \rangle = -\frac{e^2}{a_0}$ ,  $\langle \Psi_{2,0,0} | V(r) | \Psi_{2,0,0} \rangle = -\frac{e^2}{2a_0}$

Siendo  $a_0$  el radio de Bohr.

Además  $\langle \Psi_{1,0,0} | V(r) | \Psi_{2,0,0} \rangle = 0$  y  $\langle \Psi_{2,0,0} | V(r) | \Psi_{1,0,0} \rangle = 0$  por ortogonalidad.

$$\langle V(r) \rangle(t) = \frac{1}{2} \left( -\frac{e^2}{a_0} - \frac{e^2}{2a_0} \right) = -\frac{3e^2}{4a_0}$$

Calculemos el valor esperado de la energía cinética, para esto tenemos dos caminos,

Utilizando directamente lo obtenido anteriormente,

$$\langle \hat{T} \rangle = -\frac{1}{2} \langle V(r) \rangle = -\frac{1}{2} \left( -\frac{3e^2}{4a_0} \right) = \frac{3e^2}{8a_0}$$

O calcularlo explícitamente tal cual hicimos con la energía potencial.

$$\begin{aligned} \langle \hat{T} \rangle(t) &= \langle \Psi(\vec{r}, t) | \hat{T} | \Psi(\vec{r}, t) \rangle \\ &= \frac{1}{2} \left( \langle \Psi_{1,0,0} | \hat{T} | \Psi_{1,0,0} \rangle + \langle \Psi_{2,0,0} | \hat{T} | \Psi_{2,0,0} \rangle + e^{\frac{i(E_1-E_2)t}{\hbar}} \langle \Psi_{1,0,0} | \hat{T} | \Psi_{2,0,0} \rangle \right. \\ &\quad \left. + e^{\frac{i(E_2-E_1)t}{\hbar}} \langle \Psi_{2,0,0} | \hat{T} | \Psi_{1,0,0} \rangle \right) \end{aligned}$$

Además  $\langle \Psi_{1,0,0} | \hat{T} | \Psi_{2,0,0} \rangle = 0$  y  $\langle \Psi_{2,0,0} | \hat{T} | \Psi_{1,0,0} \rangle = 0$  por ortogonalidad.

$$\langle \hat{T} \rangle(t) = \frac{1}{2} (\langle \Psi_{1,0,0} | \hat{T} | \Psi_{1,0,0} \rangle + \langle \Psi_{2,0,0} | \hat{T} | \Psi_{2,0,0} \rangle)$$

Para el átomo de hidrogeno, la energía total  $E_n$  es el nivel  $n$  se relaciona con la potencial tal que,

$$E_n = \langle \hat{T} \rangle_n + \langle V(r) \rangle_n$$

La energía potencial  $\langle V(r) \rangle_n$  para el átomo de hidrogeno es igual a  $-2\langle \hat{T} \rangle_n$ , por lo que

$$\langle \hat{T} \rangle_n = -\frac{1}{2} \langle V(r) \rangle_n$$

$$\langle \hat{T} \rangle_{1,0,0} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{a_0} = \frac{e^2}{2a_0}, \quad \langle \hat{T} \rangle_{2,0,0} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{2a_0} = \frac{e^2}{4a_0}$$

$$\langle \hat{T} \rangle(t) = \frac{1}{2} \left( \frac{e^2}{2a_0} + \frac{e^2}{4a_0} \right) = \frac{3e^2}{8a_0}$$