Universidad de los Andes-Dpto. de Física
Mecánica Cuántica I - Semestre II/2014

Solución Examen Final

1. **Nota=1/5** *Considere un oscilador armónico uni-dimensional de masa m y frecuencia ω.*
(a) *Si se prepara en el estado con función de onda $\Psi(x) = A\psi_0(x) + B\psi_1(x)$, donde A y B son constantes reales (con $A^2 + B^2 = 1$) y $\psi_n(x)$ representa un estado estacionario del oscilador, calcule el valor medio de la posición. Cuáles valores de A y B maximizan ese valor medio?; cuáles valores de A y B minimizan ese valor medio?.*

El valor medio o esperado de la posición en el estado $\psi(x)$ es

$$\begin{aligned}\langle x\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dx[A\psi_0(x) + B\psi_1(x)]x[A\psi_0(x) + B\psi_1(x)] \\ &= 2AB\int_{-\infty}^{\infty} dx\psi_0(x)x\psi_1(x) \\ &= \sqrt{2}l_0AB \end{aligned} \tag{1}$$

donde se ha usado

$$\frac{\sqrt{2}}{l_0}x\psi_n(x) = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}(x) + \sqrt{n}\psi_{n-1}(x) \tag{2}$$

y la relación de ortonormalidad de las funciones estacionarias del oscilador armónico. Como A y B deben ser reales menores que 1 para poder cumplir con la condición de normalización de la función $\psi(x)$, es decir $A^2 + B^2 = 1$, la condición $A = B = 1/\sqrt{2}$ produce $\langle x\rangle_{MAX} = l_0/\sqrt{2}$ mientras que la condición $A = -B = 1/\sqrt{2}$ produce $\langle x\rangle_{MIN} = -l_0/\sqrt{2}$.

(b) *Considere ahora que el oscilador se ha preparado a $t = 0$ en un estado con función de onda*

$$\psi(x,0) = Ae^{-\frac{x^2}{2l_0^2}}\left[\cos\beta + \frac{\text{sen}\beta}{2\sqrt{2}}H_2(\frac{x}{l_0})\right] \tag{3}$$

donde $l_0 = \sqrt{\hbar/m\omega}$, A y β son constantes reales, y $H_2(\frac{x}{l_0})$ es el polinomio de Hermite de orden 2. Calcule la constante de normalización A. Cuáles son los posibles resultados al medir la energía del oscilador en este estado y cada una de las probabilidades correspondientes?. Cuál es el valor esperado de la posición del oscilador en este estado a $t = 0$?. Cuál es el valor esperado de la posición del oscilador a un $t > 0$ cualquiera?.

Las funciones estacionarias del oscilador armónico son

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{\sqrt{\pi}2^n n!}}\frac{1}{\sqrt{l_0}}e^{-\frac{x^2}{2l_0^2}}H_n(\frac{x}{l_0}) \tag{4}$$

Por lo tanto la función de onda dada en la Ec.(3) se puede escribir como

$$\psi(x,0) = A\pi^{1/4}\sqrt{l_0}\,[\cos(\beta)\psi_0(x) + \mathrm{sen}(\beta)\psi_2(x)] \tag{5}$$

La condición de normalización para esta última función exige que $A = (\pi^{1/4}\sqrt{l_0})^{-1}$. Por lo tanto la función de onda en la Ec.(3) queda ya normalizada como

$$\psi(x,0) \;=\; \cos(\beta)\psi_0(x) + \mathrm{sen}(\beta)\psi_2(x)$$

y de allí la evolución en el tiempo se obtiene fácilmente como:

$$\psi(x,t) \;=\; \cos(\beta)e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t}\psi_0(x) + \mathrm{sen}(\beta)e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}\psi_2(x) \tag{6}$$

Al medir la energía del oscilador en este estado los posibles resultados y sus probabilidades son

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{\hbar\omega_0}{2} \quad , \quad \mathcal{P}_0 = \cos^2(\beta) \\ E_2 &= \frac{5\hbar\omega_0}{2} \quad , \quad \mathcal{P}_2 = \mathrm{sen}^2(\beta) \end{aligned} \tag{7}$$

Usando nuevamente el resultado anotado en la Ec.(2) y las funciones de onda en la Ec.(6) se obtiene

$$\langle x(0)\rangle = \langle x(t)\rangle = 0 \tag{8}$$

independiente del tiempo.

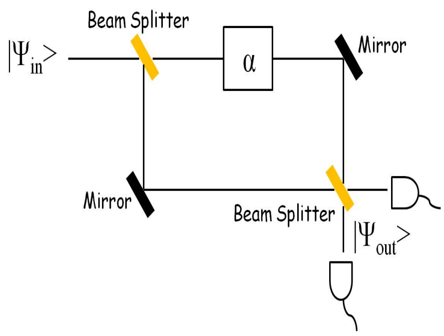
2. **Nota=1/5** *El comportamiento como sistema de dos niveles de un fotón se puede dar en un interferómetro de Mach-Zender, ver la figura adjunta. Vamos a indicar por $|0\rangle$ y $|1\rangle$ estados de fotones moviéndose por diferentes caminos: $|0\rangle$ significa un fotón en un camino horizontal mientras que $|1\rangle$ significa un fotón en un camino vertical.*

Los elementos que componen el interferómetro actúan como transformaciones unitarias sobre los estados fotónicos en un espacio de Hilbert de dimensión 2: Un **espejo** *actúa como:*

$$\hat{U}_M = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{9}$$

un **Beam Splitter** 50/50 *(o compuerta Hadamard) actúa como:*

$$\hat{U}_{BS} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \tag{10}$$



y un **desfasador** *actúa como:*

$$\hat{U}_\alpha = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{11}$$

Si el estado inicial consiste en un fotón que ingresa en un camino horizontal, i.e. $|\Psi_{in}\rangle = |0\rangle$*, calcule la probabilidad asociada a que cada uno de los detectores capture el fotón. Interprete sus resultados discutiendo el papel que juega el desfasaje* α*.*

Después del primer BS el estado del fotón viene dado por:

$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|0\rangle + |1\rangle \right] \tag{12}$$

Antes de llegar a los espejos, al haber pasado por el desfasador, el estado del fotón es:

$$|\Psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[e^{i\alpha}|0\rangle + |1\rangle \right] \tag{13}$$

Un espejo actúa como $\hat{\sigma}_x$, intercambiando las dos trayectorias (horizontal y vertical):

$$|\Psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[|0\rangle + e^{i\alpha}|1\rangle \right] \tag{14}$$

El último BS vuelve a combinar las dos trayectorias:

$$|\Psi_4\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\alpha} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \left[\left(1 + e^{i\alpha}\right) |0\rangle + \left(1 - e^{i\alpha}\right) |1\rangle \right] = e^{i\frac{\alpha}{2}} \left[\cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) |0\rangle - i\mathrm{sen}\left(\frac{\alpha}{2}\right) |1\rangle \right] \tag{15}$$

Por lo tanto el detector horizontal registrará fotones con una probabilidad $\mathcal{P}_0 = \cos^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)$ mientras que el detector vertical lo hará con una probabilidad $\mathcal{P}_1 = \text{sen}^2\left(\frac{\alpha}{2}\right)$. Note que a pesar de tener un único fotón en el interferómetro, la probabilidad de detección horizontal o vertical depende de **los dos caminos a la vez**.

3. **Nota=1.5/5** *Se tiene una partícula cuántica en un estado descrito por la función de onda en representación de espacio real dada por:*

$$\psi(\vec{r}) = \psi(x,y,z) = A\left[e^{-\frac{x^2+y^2+z^2}{a^2}}\right](x+y+z) \tag{16}$$

con a *una constante real y* A *una constante de normalización.*
(a) *Escriba la función de onda en coordenadas esféricas* (r,θ,ϕ) *y calcule la constante de normalización* A.

La relación entre coordenadas cartesianas y coordenadas esféricas se puede expresar en términos de armónicos esféricos de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} x &= r\text{sen}(\theta)\cos(\phi) = -r\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left[Y_1^1(\theta,\phi) - Y_1^{-1}(\theta,\phi)\right] \\ y &= r\text{sen}(\theta)\text{sen}(\phi) = ir\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left[Y_1^1(\theta,\phi) + Y_1^{-1}(\theta,\phi)\right] \\ z &= r\cos(\theta) = r\sqrt{\frac{4\pi}{3}}Y_1^0(\theta,\phi) \end{aligned} \tag{17}$$

Por lo tanto la función de onda del problema se puede escribir

$$\psi(x,y,z) = \psi(r,\theta,\phi) = Are^{-\frac{r^2}{a^2}}\sqrt{\frac{2\pi}{3}}\left[(i-1)Y_1^1(\theta,\phi) + (i+1)Y_1^{-1}(\theta,\phi) + \sqrt{2}Y_1^0(\theta,\phi)\right] \tag{18}$$

Recordando que la componente radial de la función de onda debe estar normalizada por sí sola

$$\int_0^\infty r^2 \mid R(r) \mid^2 dr = 1 \Rightarrow R(r) = 4\sqrt{\frac{2\sqrt{2}}{3a^5\sqrt{\pi}}}re^{-\frac{r^2}{a^2}} \tag{19}$$

la función de onda se puede entonces escribir en la siguiente forma:

$$\psi(r,\theta,\phi) = A\frac{1}{4}\sqrt{\frac{a^5\pi\sqrt{\pi}}{\sqrt{2}}}R(r)\left[(i-1)Y_1^1(\theta,\phi) + (i+1)Y_1^{-1}(\theta,\phi) + \sqrt{2}Y_1^0(\theta,\phi)\right] \tag{20}$$

Los armónicos esféricos igualmente están normalizados, por lo que se obtiene

$$A = \sqrt{\frac{8\sqrt{2}}{3a^5\pi\sqrt{\pi}}} \tag{21}$$

La función de onda ya *normalizada* se escribe finalmente como:

$$\psi(r,\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{6}}R(r)\left[(i-1)Y_1^1(\theta,\phi) + (i+1)Y_1^{-1}(\theta,\phi) + \sqrt{2}Y_1^0(\theta,\phi)\right] \tag{22}$$

(b) *Se miden sobre esta partícula descrita por la Ec.(16) los observables de momentum angular orbital $\hat{L}_z$ y $\hat{L}^2$. Qué resultados se pueden obtener para cada uno de esos observables y con cuáles probabilidades cada uno de ellos?.*

Se pueden efectivamente calcular las probabilidades de todos los resultados posibles al medir $\hat{L}^2$ y $\hat{L}_z$. Ellas son

$$\begin{aligned} l &= 1 \quad , \quad m = 0 \Longrightarrow \mathcal{P}(2\hbar^2, 0) = \frac{1}{3} \\ l &= 1 \quad , \quad m = 1 \Longrightarrow \mathcal{P}(2\hbar^2, 1) = \frac{1}{3} \\ l &= 1 \quad , \quad m = -1 \Longrightarrow \mathcal{P}(2\hbar^2, -1) = \frac{1}{3} \end{aligned} \tag{23}$$

4. **Nota=1.5/5** *Se tiene un átomo de hidrógeno en el estado fundamental (estado* $1s$*), cuya función de onda es*

$$\psi_{1s}(\vec{r}) = Ce^{-\frac{r}{a_B}}Y_0^0(\theta,\phi) \tag{24}$$

donde $a_B = \frac{\hbar^2}{m^*e^2} = 0.5\AA$ *es el radio de Bohr. La energía del estado fundamental es* $E_{1s} = -\frac{m^*e^4}{2\hbar^2} = -\frac{e^2}{2a_B} = -13.6eV$*. Notar que* $e^2 = \frac{q_e}{4\pi\epsilon_0}$*, con* q_e *la carga elemental en Coulombs. Determine:*
(a) *La constante de normalización* C*.*

Tomamos C como una constante real.

$$\begin{aligned} 1 &= C^2\int_0^\infty drr^2e^{-\frac{2r}{a_B}}\int_0^{2\pi}d\phi\int_0^\pi d\theta\text{sen}\theta|Y_0^0(\theta,\phi)|^2 \\ &= C^2\left(\frac{a_B}{2}\right)^3\int_0^\infty dzz^2e^{-z} \\ &= C^2\frac{a_B^3}{4} \quad \Longrightarrow C = \frac{2}{a_B^{\frac{3}{2}}} \end{aligned} \tag{25}$$

Por lo tanto la función de onda normalizada se escribe

$$\psi_{1s}(\vec{r}) = \frac{2}{a_B^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r}{a_B}} Y_0^0(\theta,\phi) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_B^3}} e^{-\frac{r}{a_B}} \tag{26}$$

(b) *La probabilidad de encontrar el electrón a una distancia del núcleo menor o igual al radio de Bohr.*

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(r \leq a_B) &= \frac{4}{a_B^3} \int_0^{a_B} dr r^2 e^{-\frac{2r}{a_B}} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \mathrm{sen}\theta |Y_0^0(\theta,\phi)|^2 \\ &= 1 - 5e^{-2} \approx 0.323 \end{aligned} \tag{27}$$

(c) *El valor medio de la energía potencial, sabiendo que la energía potencial viene dada por $V(r) = -e^2/r$.*
El valor medio de la energía potencial resulta ser

$$\begin{aligned} \langle V(r) \rangle &= \langle 1s| - \frac{e^2}{r} |1s\rangle \\ &= -\frac{4e^2}{a_B^3} \int_0^{\infty} dr r e^{-\frac{2r}{a_B}} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} d\theta \mathrm{sen}\theta |Y_0^0(\theta,\phi)|^2 = -\frac{e^2}{a_B} \end{aligned} \tag{28}$$

(d) *El valor rms de la velocidad del electrón, $v_{RMS} = \sqrt{\langle v^2 \rangle}$, en unidades de c (velocidad de la luz). Qué puede afirmar sobre la necesidad de un tratamiento relativista del átomo de hidrógeno?. Justifique su respuesta. Usar el siguiente dato: constante adimensional de estructura fina $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$.*
Para obtener el valor rms de la velocidad media del electrón en el estado fundamental del átomo de hidrógeno, primero calcular el valor medio de la energía cinética. Como se conoce la energía del estado fundamental $E_{1s} = -\frac{m^* e^4}{2\hbar^2} = -\frac{e^2}{2a_B}$ y el valor medio de la energía potencial $-\frac{e^2}{a_B}$

$$E_{1s} = \langle T \rangle + \langle V(r) \rangle \tag{29}$$

por lo tanto

$$\langle T \rangle = E_{1s} - \langle V(r) \rangle = -\frac{e^2}{2a_B} + \frac{e^2}{a_B} = \frac{e^2}{2a_B} \tag{30}$$

Del anterior resultado se puede escribir

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2} m^* \langle v^2 \rangle = \frac{e^2}{2a_B} \quad \Longrightarrow \langle v^2 \rangle = \frac{e^2}{m^* a_B} \tag{31}$$

Por lo tanto el valor rms de la velocidad del electrón en el estado fundamental del átomo de hidrógeno es

$$v_{RMS} = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\frac{e^2}{m^* a_B}} = \alpha c \approx 10^{-2} c \tag{32}$$

es decir, aproximadamente el 1% de la velocidad de la luz. Por lo tanto las correcciones relativistas son muy pequeñas y se justifica un tratamiento no-relativista basado en el formalismo de Schrödinger, como el que se ha hecho.