Física Cuántica II (3er curso del Grado en Física) Septiembre de 2014

Alumnos con evaluación continua: Deben procurar contestar tanto a la cuestión como a los problemas.
Alumnos con solamente examen presencial: Debe superar el 40 % de la nota máxima de cada parte por separado.
Cuestiones: conteste breve y razonadamente, ajustándose a la pregunta y explicando lo que hace.
Problemas: debe resolverlos, no sólo decir cómo se se podrían resolver, ni poner la solución, sino que **hay que resolverlos realmente, explicando con claridad los pasos y discutir los resultados**. Recuerde definir **todas** las variables que use y **explicar** la notación y las fórmulas que utilice.
No haga números hasta haber obtenido una expresión algebraica (estime entonces en órdenes de magnitud).
Solamente se permite el uso de un libro de Tablas y Fórmulas matemáticas, sin añadido alguno.

CUESTIONES (puntuación: hasta 1,5 puntos por cuestión)

C1.- (para todos los estudiantes)

El estado de espín de dos partículas 1 y 2 de espín $s = 1/2$ no interactuantes puede escribirse como un producto $|\alpha\rangle_1 |\delta\rangle_2 \equiv |\alpha\delta\rangle$, donde $|\alpha\rangle$, $|\delta\rangle$ pueden ser cualquiera de los estados $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ de una base del espacio de estados de espín 1/2.

Encontrar la forma del operador de intercambio de espín $\widehat{C}$ que actuando sobre $|\alpha\delta\rangle$ da como resultado $\widehat{C}\,|\alpha\delta\rangle = |\delta\alpha\rangle$, es decir, intercambia el estado de espín de las partículas.

Expresar $\widehat{C}$ en términos de las matrices de Pauli.

C2.- (solamente deben responderla los estudiantes que <u>no</u> hayan realizado la evaluación continua)

La energía potencial de interacción entre los átomos que forman una molécula de HCl puede aproximarse por un potencial de Morse

$$V(x - x_{eq}) = D\Big(\exp\left[-2a(x - x_{eq})\right] - 2\exp\left[-a(x - x_{eq})\right]\Big)$$

siendo x_{eq} la distancia de equilibrio, con $D \simeq 4,4$ eV y $a \simeq 1,85$ Å. Determinar la energía del estado de vibración fundamental de la molécula. (Datos: $hc = 12{,}400$ eV· Å; masa reducida HCl $\simeq 35 \times 10^9$ MeV/c^2)

PROBLEMAS (puntuación: hasta 3,5 puntos por problema)

P1.- (para todos los estudiantes)

Dos partículas distinguibles de espín 1/2 interaccionan entre sí y con un campo magnético externo $\mathbf{B}$ (de módulo B) a través del hamiltoniano

$$\widehat{H} = \frac{J}{\hbar}\left(\widehat{\mathbf{S}}_1 \cdot \widehat{\mathbf{S}}_2\right) + gB\left(\widehat{S}_{1,z} + \widehat{S}_{2,z}\right)$$

donde los subíndices 1 y 2 se refieren a las partículas 1 y 2. Además, se define al operador magnetización como $\widehat{\mathbf{M}} = \widehat{\mathbf{S}}_1 - \widehat{\mathbf{S}}_2$.

(a) Encontrar y clasificar las energías y los autoestados del sistema.
(b) Supongamos que $J > 0$ y $B < 2J/g$. ¿Cuál es entonces el estado fundamental? ¿Cuál es su momento angular total? ¿Cuánto vale $\left\langle \widehat{\mathbf{M}} \right\rangle$ en dicho estado?
(c) Responder a las mismas preguntas que en (b) si $J > 0$ y $B > 2J/g$.
(d) Responder a las mismas preguntas si $J < 0$.

P2.- (para todos los estudiantes)

El hamiltoniano $\widehat{H}_0$ de un sistema tiene dos autofunciones degeneradas ϕ_{01} y ϕ_{02} con energía E_0. Los niveles excitados $n = 1, 2, ...$ son no degenerados, siendo las autofunciones ϕ_n y las autoenergías $E_n = E_0 + 4nG$, con G una constante positiva. Se perturba el sistema con un hamiltoniano $\widehat{W}$ tal que

$$\begin{aligned} \left\langle \phi_{0i} \middle| \widehat{W} \middle| \phi_{0j} \right\rangle &= G \quad \text{para } i = 1,2; \quad j = 1,2; & \left\langle \phi_{0i} \middle| \widehat{W} \middle| \phi_n \right\rangle &= G/n \quad \text{para } i = 1,2; \quad n = 1,2,3 \\ \left\langle \phi_n \middle| \widehat{W} \middle| \phi_n \right\rangle &= 0 \quad \text{para } n = 1,2,3,...; & \left\langle \phi_n \middle| \widehat{W} \middle| \phi_m \right\rangle &= G/\left|n - m\right| \quad \text{para } n \neq m. \end{aligned}$$

a) Diagonalice la matriz del nuevo hamiltoniano $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{W}$ en el subespacio de los estados estacionarios degenerados y obtenga así las nuevas autofunciones no degeneradas ψ_{01} y ψ_{02} y sus energías correspondientes.

Como $\left\langle \phi_{0i} \middle| \widehat{W} \middle| \phi_{0k} \right\rangle$ y $\left\langle \phi_{0i} \middle| \widehat{W} \middle| \phi_n \right\rangle$ son del mismo orden, para calcular unas buenas funciones perturbadas a primer orden habrá que tener en cuenta también las contribuciones que provienen de las ϕ_n. Así pues
b) Corregir a primer orden las funciones ϕ_{01}, ϕ_{02} teniendo en cuenta la presencia de los estados ϕ_n. Compare con (a)
c) Determinar las correcciones a los niveles energéticos hasta segundo orden. Compare con (a)

Formulario para examen de *Física Cuántica II*

- **Datos que podrían ser útiles:**

$h = 6{,}63 \times 10^{-34}$ J s $\quad$ 1 eV $= 1{,}6 \times 10^{-19}$ J $\quad m_p = 1{,}67 \times 10^{-27}$ kg $\quad e = 1{,}6 \times 10^{-19}$ C $\quad m_e = 9{,}11 \times 10^{-31}$ kg

$R_\infty = 109737$ cm^{-1} $\quad k_B = 1{,}38 \times 10^{-23}$ J K^{-1} $\quad c = 3 \times 10^8$ m s^{-1} $\quad N_A = 60{,}2 \times 10^{22}$ $\quad a_o = \dfrac{4\pi\epsilon_o\hbar^2}{me^2} \simeq 0{,}52$ Å

$\lambda_C = h/(m_e c) = 0{,}024$ Å $\quad \mu_b = e\hbar/(2m_e) = 9{,}27 \times 10^{-24}$ J T^{-1} $\quad 1/(4\pi\epsilon_o) = 9 \times 10^9$ m^3 kg s^{-2} C^{-2}

- **Integrales que podrían ser útiles:**

$$\int_0^t e^{-x^2}dx = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}\ \mathrm{erf}(t) \qquad \int_0^\infty x^m \exp(-ax^2)dx = \begin{cases} \dfrac{n!}{2a^{n+1}} & \text{si } m = 2n+1 \ (m \text{ impar}) \\[2ex] \dfrac{1\cdot 3\cdot \cdots \cdot (2n-1)}{2^{n+1}}\sqrt{\dfrac{\pi}{a^{2n+1}}} & \text{si } m = 2n \ (m \text{ par}) \end{cases}$$

$$\int_0^\infty r^n e^{-ar}dr = n!/a^{n+1} \qquad \int x^2 e^{ax}dx = \frac{e^{ax}}{a}\left(x^2 - \frac{2x}{a} + \frac{2}{a^2}\right)$$

$$\int \cos^2 x\ dx = \frac{1}{4}\sin(2x) + \frac{x}{2} \qquad \int x\cos^2 x\ dx = \frac{x^2}{4} + \frac{x}{4}\sin(2x) + \frac{1}{8}\cos(2x)$$

$$\int x^2\cos^2 x\ dx = \frac{x^3}{6} + \frac{x}{4}\cos(2x) + \frac{1}{4}\left(x^2 - \frac{1}{2}\right)\sin(2x)$$

- **Operadores**

$$\nabla^2\Phi = \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(r\Phi) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Phi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} \qquad \widehat{L}^2 = -\hbar^2\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right]$$

$$\widehat{L}_x = i\hbar\left(\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{cotg}\,\theta\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad \widehat{L}_y = i\hbar\left(-\cos\varphi\frac{\partial}{\partial\theta} + \mathrm{cotg}\,\theta\sin\varphi\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) \qquad \widehat{L}_z = -i\hbar\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\right.$$

- **Matrices de Pauli**

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

- **Perturbaciones independientes del tiempo**

$$E_n^{(1)} = \left\langle \psi_n^{(0)} \middle| \widehat{H}_p \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle \qquad \left|\psi_n^{(1)}\right\rangle = \left|\psi_n^{(0)}\right\rangle + \sum_{k\neq n} \frac{\left\langle \psi_k^{(0)} \middle| \widehat{H}_p \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \left|\psi_k^{(0)}\right\rangle \qquad E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n} \frac{\left|\left\langle \psi_k^{(0)} \middle| \widehat{H}_p \middle| \psi_n^{(0)} \right\rangle\right|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}}$$

- **Perturbaciones dependientes del tiempo**

$$\lambda A_{ik}^{(1)}(t) = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^t e^{\mathrm{i}\Omega_{ki}(\tau - t_0)}\langle\psi_k^{(0)}|\lambda\hat{W}(t)|\psi_i^{(0)}\rangle d\tau \qquad \text{con} \quad \Omega_{ki} = \left(E_k^{(0)} - E_i^{(0)}\right)/\hbar$$

$$\lambda^2 A_{ik}^{(2)}(t) = -\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\right)^2 \sum_n \int_{t_0}^t d\tau \int_{t_0}^\tau d\tau' e^{\mathrm{i}\Omega_{kn}(\tau - t_0)} e^{\mathrm{i}\Omega_{ni}(\tau' - t_0)} \langle\psi_k^{(0)}|\lambda\hat{W}(\tau)|\psi_n^{(0)}\rangle\langle\psi_n^{(0)}|\lambda\hat{W}(\tau')|\psi_i^{(0)}\rangle$$

Para perturbaciones periódicas, $\widehat{W}(t) = \widehat{W}\sin\omega t$, $\qquad P_{n\to m}^{\mathrm{Born}}(t) \simeq \left|\dfrac{\langle m|\hat{W}|n\rangle t}{2\hbar}\right|^2 \dfrac{\sin^2\left(\dfrac{\omega - |\Omega_{mn}|}{2}t\right)}{\left(\dfrac{\omega - |\Omega_{mn}|}{2}t\right)^2}$

- **Oscilador armónico**

$$\widehat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\widehat{X} + \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\widehat{P}_x\right),\ \widehat{a}\,\phi_n(x) = \sqrt{n}\,\phi_{n-1}(x); \quad \widehat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\widehat{X} - \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{m\omega\hbar}}\widehat{P}_x\right),\ \widehat{a}^\dagger\phi_n(x) = \sqrt{n+1}\,\phi_{n+1} \tag{1}$$

- **Átomo hidrogenoide**

$$R_{nl}(r) = \frac{2Z^{3/2}}{n^2 a_0^{3/2}}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l \mathrm{L}_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)\exp\left(-\frac{Zr}{na_0}\right) \qquad \mathrm{L}_{q-p}^p(u) = (-1)^p\frac{d^p}{du^p}\mathrm{L}_q(u)$$