

# FISICA 4

**14 de diciembre de 2011**

PARTE II: FISICA CUANTICA Y ESTADISTICA

SERIE DE PROBLEMAS

*Profesor Roberto C. Bochicchio*

## Serie 1

### *Experiencias y modelos - Unidades - Ordenes de magnitud*

1. Calcular el "tamaño" de los cuantos involucrados en: i) la excitación de un movimiento electrónico periódico de período  $10^{-15}$  seg.; ii) un modo de vibración molecular de período  $10^{-14}$  seg.; iii) un péndulo de 1 seg.

2. Calcular la energía media de un oscilador de frecuencia: a) 1 Hz.; b)  $10^{14}$  Hz. a temperaturas de: i) 100K; ii) 1000K. Comparar estos resultados con los que predice el principio de equipartición.

3. El pico en la energía emitida por el Sol ocurre a los 480 nm. Estimar la temperatura de su superficie utilizando como hipótesis que puede ser considerado como un *cuero negro*.

4. Encontrar las formas de la capacidad calorífica de Einstein a bajas y a altas temperaturas.

5. ¿Cuántos fotones por segundo emitirá una lámpara de sodio de 100 Watts, la cual radia toda su energía con eficiencia ideal como luz amarilla de 589 nm.

6. Calcular la velocidad de un electrón emitido por una superficie de potasio cuya función trabajo es  $\Phi = 2,3 \text{ eV}$ ., por luz de longitud de onda: a) 300 nm.; b) 600 nm.

7. a) Mostrar que el efecto fotoeléctrico no puede ocurrir con un electrón libre; b) ¿Por qué no puede observarse efecto Compton con luz visible? ¿Puede observarse fotoeléctrico?

8. Deducir la expresión de la dispersión en el efecto Compton mediante la hipótesis de la conservación de la energía y el momento lineal en la aproximación relativista. Nota: el electrón está inicialmente en reposo con energía  $mc^2$ ; cuando se mueve con momento lineal  $p$  su energía es  $(p^2c^2 + m^2c^4)^{1/2}$ . El fotón, inicialmente de momento lineal  $h/\lambda_i$  y energía  $h\nu_i$  colisiona con el electrón y es deflectado en un ángulo  $\theta$  respecto a su dirección de incidencia, emergiendo con momento y energía  $h/\lambda_f$ ,  $h\nu_f$ , respectivamente. El electrón que inicialmente tenía  $p = 0$  comienza su movimiento con un ángulo  $\theta'$  respecto de la dirección incidente del fotón.

Utilizar los principios de conservación mencionados, eliminar  $\theta'$ , luego  $p$  y arribar a la expresión del corrimiento para la longitud de onda  $\delta\lambda$ .

9. Las primeras líneas de la serie de Balmer (visible) en el espectro de átomo de

hidrógeno están ubicadas a  $\lambda/nm. = 656.46, 486.27, 434.17, 410.29, \dots$ . Encontrar un valor para la constante de Rydberg  $R_H$ . El potencial de ionización,  $I$ , es la mínima energía necesaria para remover al electrón. ¿Cómo se relaciona  $I$  con  $R_H$ ? Nota: el límite de ionización corresponde a  $n \rightarrow \infty$  para el estado final del electrón.

10. Calcular la longitud de onda de de Broglie de: a) una masa de 1 gr. viajando a una velocidad de 1 cm/seg; b) la misma masa que en a) pero a una velocidad del 95 por ciento de la velocidad de la luz; c) un átomo de hidrógeno a la temperatura de 300K, estimar la velocidad por medio del principio de equipartición; d) un electrón acelerado desde el reposo por medio de un potencial de i) 1 volt, ii) 10 Kv.; Nota: para el momento en el punto b) hacer uso de la expresión relativista  $p = mv/(1 - v^2/c^2)^{1/2}$  y para la velocidad en b) usar  $1/2 mv^2 = e\Delta\phi$ , donde  $\Delta\phi$  es la diferencia de potencial.

11. ¿Cuál es el potencial necesario para acelerar un electrón de manera que se le pueda asociar una longitud de onda de de Broglie de 1 Amstrong?

12. Determinar mediante el uso de los postulados de de Broglie:

- a) los estados de energía permitidos para una partícula confinada en un segmento de longitud L;
- b) los estados de energía de un electrón en el átomo de hidrógeno.

13. a) ¿Cuál es la mínima incerteza en la velocidad y la energía cinética de un electrón confinado en una caja "lineal" de una dimensión de 0.10 nm.

b) ¿Cuál es la menor energía de un fotón para poder observar un objeto de 2.5 ?

c) Si medimos el momento lineal de una partícula con una precisión del milésimo, ¿cuál será la indeterminación de la posición para una pelota de 5 gr. a 2 m/seg? ¿ y cuál la de un electrón que se mueve a 1.8  $10^6$ m/seg.?

14. Dado un paquete de onda descrito por el núcleo integral

$$\Phi(k) = A \exp\left(\frac{-\alpha^2}{4} (k - k_o)^2\right)$$

a) calcular A para que la función este normalizada

b) calcular  $|\psi(x, 0)|^2$

c) calcular el valor medio de la coordenada x, el de la coordenada p y el producto  $\Delta x \Delta p$ .

Dato:  $\int_0^\infty \exp(-u^2) du = \frac{\pi^{1/2}}{2}$

15. Utilizar el principio de incertidumbre para estimar el orden de magnitud del diámetro de un átomo. Comparar el resultado con el radio de Bohr de la primera órbita del átomo de hidrógeno. Nota: suponer que el electrón está confinado en una región de longitud  $\delta x$ . Esto implica que tiene una energía cinética no nula; además hay una energía potencial del orden de magnitud de  $-e^2/4\pi\epsilon_0\delta x$ . Hallar  $\delta x$  de manera tal que la energía total sea un mínimo y evaluar la expresión para esta.

16. A partir de las relaciones de incerteza probar que la energía mínima de un oscilador armónico es  $E_{min} \approx \frac{\hbar\omega}{2}$

## Serie 2

### *Ecuación de Schrödinger*

1. Escribir la ecuación de Schrödinger para: a) la partícula libre, b) una partícula bajo la influencia de una fuerza uniforme y constante, c) el átomo de hidrógeno, d) el átomo de helio, e) oscilador armónico.

2. Mostrar que la ecuación de Schrödinger es separable cuando el potencial de interacción  $V(t)$  depende solamente de tiempo y es uniforme en el espacio. Resolver las ecuaciones resultantes cuando  $V(t) = V_0 \cos(\omega t)$ . ¿Es estacionaria la función de estado resultante?

3. La función de estado del átomo de hidrógeno en su estado fundamental tiene la forma  $\psi(\vec{r}) = A \exp(-a r)$ , donde  $a$  es una constante que vale  $(53)^{-1} \text{pm}$ . Normalizar esta función esféricamente simétrica a la unidad.

a) calcular la probabilidad de encontrar al electrón en el núcleo

b) en un punto del espacio distante del núcleo en 53 pm.

c) calcular la probabilidad de encontrar al electrón dentro de un elemento de volumen de  $1 \text{ pm}^3$  ubicado en los puntos de a) y b)

d) calcular la probabilidad que el electrón se encuentre en cualquier lugar dentro de una esfera de radio de 53 pm.

e) si el radio de un átomo se define como el radio de una esfera en la cual la probabilidad de encontrar al electrón es del 90 %, ¿cuál es el radio del átomo?

4. Una partícula en un potencial unidimensional infinito está descrita por una función de estado

$$\psi(x) = A \exp(-x^2/2\Gamma^2)$$

Normalizarla. Calcular la probabilidad de encontrar a la partícula en la región  $-\Gamma \leq x \leq \Gamma$ . Nota: la función definida por la integral se denomina *función error* y se encuentra tabulada en varios textos y en calculadoras y/o programas algebraicos de uso corriente.

5. Un estado excitado del mismo sistema del ejercicio anterior se describe mediante la función de estado

$$\psi(x) = A' x \exp(-x^2/2\Gamma^2)$$

¿Cuál es la posición más probable de la partícula?

6. Una partícula de masa  $m$  incide desde la izquierda sobre una pared de ancho infinito (escalón) de valor  $V_0$ . Calcular el *coeficiente de reflexión* para los casos en que; a)  $E \leq V_0$ ; b)  $E > V_0$ . Para electrones incidentes sobre una superficie metálica  $V_0 \approx 10 \text{ eV}$ . Calcular y graficar el coeficiente de reflexión.

7. Para comprimir una "caja" dentro de la cual se encuentra una partícula se necesita cierta energía. Esto sugiere que la partícula ejerce una fuerza sobre las paredes. Con esta hipótesis en mente, y considerando que cuando la longitud de la "caja" cambia en  $dl$ , la energía cambia por medio de la expresión  $dE = -F dl$ , calcular la expresión de la fuerza  $F$ . ¿A qué distancia se obtiene  $F = 1 \text{ N}$  cuando el electrón se encuentra en el estado con número cuántico  $n = 1$ ?

8. a) Mostrar que el valor medio o esperado de la posición  $\langle \mathbf{x} \rangle$  de una partícula en una "caja" unidimensional es

$$\langle \mathbf{x} \rangle = \frac{1}{2} L$$

donde  $L$  es la longitud de la "caja". Evaluar la desviación cuadrática media de la posición  $\delta \mathbf{x}$  en este caso. ¿Cuál es su significado físico?

b) Realizar los mismos cálculos para el momento lineal  $\mathbf{p}$

c) Evaluar el producto de las desviaciones cuadráticas medias y construir el principio de incerteza. ¿Depende del número cuántico?

9. Calcular los valores de  $\langle \mathbf{x} \rangle$ ,  $\langle \mathbf{x}^2 \rangle$ ,  $\langle \mathbf{p} \rangle$ ,  $\langle \mathbf{p}^2 \rangle$ ,  $\langle \mathbf{T} \rangle$  (energía cinética),  $\langle \mathbf{V} \rangle$  (energía potencial) y  $\langle \mathbf{H} \rangle$  (energía total), para el oscilador armónico en su estado fundamental y observar los productos  $\delta x \delta p$  en virtud del principio de incerteza.

Datos:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-\alpha x^2) = \left(\frac{\pi}{\alpha}\right)^{1/2}; \int_{-\infty}^{\infty} x \exp(-\alpha x^2) = \frac{1}{2}\alpha; \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \exp(-\alpha x^2) = \frac{1}{2} \left(\frac{\pi}{\alpha^3}\right)^{1/2}$$

10. Considerar el siguiente potencial (pozo infinito)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| \leq a/2 \\ \infty & |x| > a/2 \end{cases}$$

donde  $a$  es una constante que representa el ancho del pozo.

a) Hallar las autofunciones de  $\mathbf{H}$  y los niveles de energía de una partícula de masa  $m$  en él.

- b) Graficar las cuatro primeras autofunciones de la partícula,  $\psi_1, \psi_2, \psi_3$  y  $\psi_4$  y sus módulos al cuadrado.
- c) Calcular la probabilidad de encontrar la partícula en el intervalo  $(0, a/4)$  para estos cuatro autoestados.
- d) Calcular  $\langle \mathbf{x} \rangle, \langle \mathbf{x}^2 \rangle, \langle \mathbf{p} \rangle, \langle \mathbf{p}^2 \rangle, \delta \mathbf{x}, \delta \mathbf{p}$  y  $\delta \mathbf{x} \delta \mathbf{p}$ .
- e) Calcular y graficar la probabilidad que la partícula tenga un momento lineal  $p$  para el primer autoestado y para uno de número cuántico "n" grande.
- f) Escribir la expresión general para un estado  $\Psi(x, t)$  arbitrario.

11. Encontrar las autofunciones y una ecuación para los autovalores de un hamiltoniano con potencial como el que se indica, para  $E < 0$

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ -V_o & 0 < x < a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

12. Realizar el mismo calculo que en el problema anterior para el potencial (pozo finito)

$$V(x) = \begin{cases} -V_o & |x| < a \\ 0 & |x| > a \end{cases}$$

13. Operador paridad: El operador paridad  $\Pi$  se define mediante la relación

$$\Pi \psi(x) = \psi(-x)$$

- a) mostrar que las autofunciones de  $\Pi$  son simétricas o antisimétricas, con autovalores  $\pm 1$  respectivamente.
- b) demostrar que si  $\mathbf{H}(x) = \mathbf{H}(-x)$ ,  $\mathbf{H}(x)$  conmuta con  $\Pi$ . ¿Qué se puede decir de la paridad de la autofunciones de  $\mathbf{H}(x)$ ?

14. Hallar las ecuaciones para los autovalores y escribir los autoestados correspondientes para los casos:

a)  $0 < E < V_o$

b)  $E > V_o$

para el siguiente potencial

$$V(x) = \begin{cases} \infty & |x| > b \\ V_0 & a < |x| < b \\ 0 & |x| < a \end{cases}$$

15. Hallar los *coeficientes de transmisión y reflexión* para el potencial del Problema 12 en el caso  $E > 0$ .

16. Hallar los coeficientes de transmisión y reflexión para el siguiente potencial:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & |x| \leq a \\ 0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases}$$

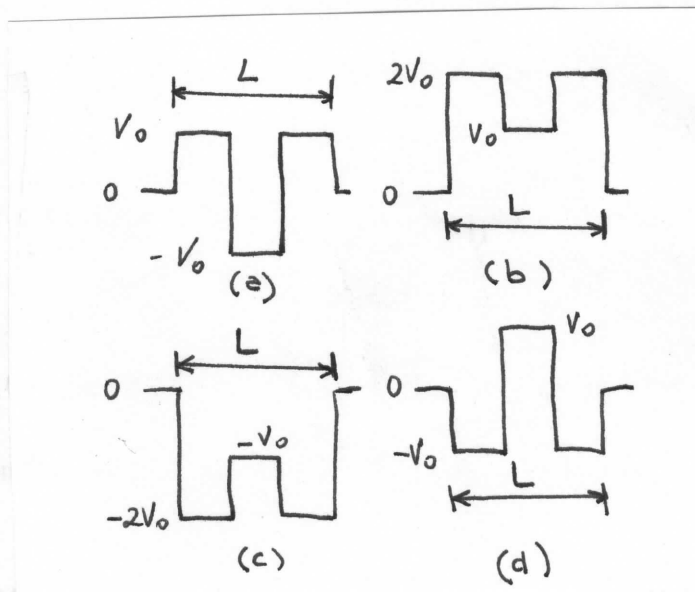
en los casos:

a)  $0 < E < V_0$

b)  $E > V_0$

Discutir físicamente los resultados hallados.

17. Analizar en cuales de los potenciales que se muestran en las figuras que siguen existe al menos un estado ligado. En los casos afirmativos, realizar gráficos cualitativos de las autofunciones del hamiltoniano para varios valores de la energía

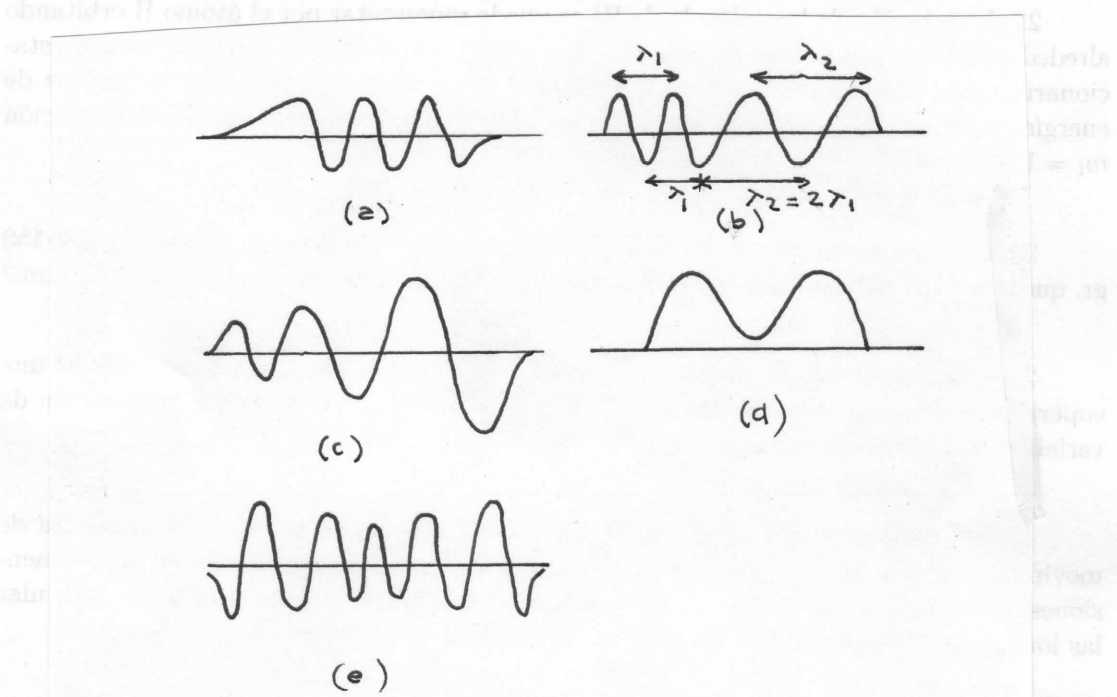


18. Dados los gráficos siguientes de autofunciones del hamiltoniano, hacer un diagrama



21. El potencial de interacción para un oscilador armónico anisotrópico, con una frecuencia de oscilación distinta para cada eje, se escribe:

ma cualitativo de los potenciales unidimensionales que las causan. Indicar en cada caso el nivel de la energía que se considera.



19. Mostrar que para una caja cúbica

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0 & |x| \leq a, |y| \leq b, |z| \leq c \\ \infty & \text{en otro caso} \end{cases}$$

la ecuación de Schrödinger puede ser separada de manera que la función de estado se escribe como un producto de tres funciones como  $X(x) Y(y) Z(z)$ . Calcular las autofunciones y la energía del sistema para una partícula de masa  $m$ . Mostrar que las autofunciones son ortonormales. Discutir las degeneraciones.

20. La energía potencial de un oscilador armónico tridimensional esférico puede escribirse como

$$V(x, y, z) = m \omega^2 r^2 / 2 = m \omega^2 (x^2 + y^2 + z^2) / 2$$

Hallar las autofunciones del hamiltoniano. Analizar la degeneración de cada nivel de energía.

21. El potencial de interacción para un oscilador armónico anisotrópico, con una frecuencia de oscilación distinta para cada eje, se escribe:

$$V(x, y, z) = m \omega^2 (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2) / 2$$

Hallar los niveles de energía. Encontrar los cuatro niveles más bajos para el caso en que  $\omega_x = \omega_y = \frac{2}{3}\omega_z$  y determinar su degeneración.

22. La rotación de la molécula de IH se puede representar por el átomo H orbitando alrededor del I con un radio de 160 pm., considerado este último como un centro estacionario. Si la rotación se restringe a realizarse en un plano, ¿cuales son los niveles de energía rotacionales? ¿cuál es la longitud de onda de la radiación emitida en la transición  $m_l = 1 \rightarrow m_l = 0$ ?

23. Calcular los niveles de energía rotacional de un disco de radio 10 cm. y masa 150 gr. que gira libre en un plano. ¿A qué valor de  $m_l$  corresponde una rotación de 33 r.p.m.?

24. Confirmar que la función de estado de una partícula moviéndose sobre una superficie esférica se factoriza como  $\psi(\phi, \theta) = \Phi(\phi)\Theta(\theta)$  por el método de separación de variables. Encontrar la solución para  $\Theta(\theta)$ .

25. Considerar el enunciado del Problema 20 pero ahora se relaja la condición de movimiento en un plano para permitirlo en una esfera, es decir rotación en tres dimensiones. Calcular las energías y las degeneraciones de los tres niveles más bajos. Calcular las longitudes de onda de la radiación en las transiciones del tipo  $l = 1 \rightarrow 0$ .

26. Sea un sistema formado por dos sitios A y B que comparten una partícula, es decir en los cuales ésta, puede estar localizada. Sean  $\psi_A$  y  $\psi_B$  las funciones de estado de cada sitio por separado, con autovalor  $\varepsilon$ . El hamiltoniano del sistema completo  $\mathbf{H}$  actúa sobre los estados individuales de la forma

$$\mathbf{H}\psi_A = \varepsilon \psi_A + \tau \psi_B$$

$$\mathbf{H}\psi_B = \tau \psi_A + \varepsilon \psi_B$$

a) Hallar los autoestados y energías del problema.

b) Considerar ahora un observable  $\mathbf{U}$  que indica la ubicación de la partícula en cada sitio con autofunciones  $\psi_A$  y  $\psi_B$  y autovalores  $u_A$  y  $u_B$ , respectivamente. A  $t=0$  se mide  $\mathbf{U}$  con valor  $u_A$ , ¿cuál es la probabilidad de medir  $u_A$  en función del tiempo?

27. Suponer un potencial de la forma pozo infinito entre 0 y  $a$ . En el instante justo antes de  $t = 0$  se mide la energía del sistema obteniéndose el valor del estado fundamental.

A  $t = 0$  el pozo se agranda súbitamente, pasando a ser ahora un pozo infinito entre 0 y  $2a$ . Si posteriormente se mide la energía ¿qué valores se obtendrán y con qué probabilidad? ¿cuál será la energía media de la partícula en la nueva configuración?

28. Una partícula en un pozo de potencial infinito de ancho  $a$  con masa  $m$  se encuentra a  $t = 0$  en el estado

$$\psi(x, 0) = \sum_n c_n \phi_n(x)$$

donde las  $\phi_n(x)$ , son los autoestados del hamiltoniano del sistema.

a) ¿Cuál es la probabilidad que a una partícula se la encuentre, en un instante cualquiera, con una energía  $E = 5E_1$ , donde  $E_1$  es la energía del estado fundamental? Si dicha probabilidad es nula, ¿cuales de los coeficientes son nulos y cuales no?

b) Si solo  $c_1$  y  $c_2$  son no nulos, normalizar la función de estado a  $t = 0$  en función de ellos. Calcular el valor medio de la energía en ese estado. ¿Qué valor deben tener  $|c_1|^2$  y  $|c_2|^2$  para que dicho valor medio sea  $\langle \mathbf{H} \rangle = 2,5 E_1$ ? Además utilizar la información que  $\langle \mathbf{x} \rangle = a/8$ , para calcular la fase de  $c_2$  si  $c_1$  es real y positivo.

c) Calcular  $\psi(x, t)$  y  $\langle \mathbf{x} \rangle$  para un tiempo  $t$ .

d) Calcular  $\langle \mathbf{p} \rangle$  para todo tiempo por dos métodos distintos: de manera directa y por medio del teorema de Ehrenfest.

### Serie 3

#### *Formalización de la Mecánica Cuántica*

1. Confirmar que los operadores

a)  $\mathbf{T} = -\left(\frac{\hbar}{2m}\right) \frac{d^2}{dx^2}$

b)  $\mathbf{l}_z = \left(\frac{\hbar}{i}\right) \frac{\partial}{\partial \phi}$

son hermíticos. Nota: considerar las integrales  $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \mathbf{T} \psi$  y  $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \mathbf{l}_z \psi$  e integrar por partes.

2. Demostrar que las combinaciones lineales de los operadores  $\mathbf{A} + i\mathbf{B}$  y  $\mathbf{A} - i\mathbf{B}$  no son hermíticas si  $\mathbf{A}$  y  $\mathbf{B}$  son operadores hermíticos.

3. Determinar cuales de las siguientes funciones son autofunciones de los operadores  $\mathbf{p}_x$  y  $\mathbf{p}_x^2$ :

a)  $\psi(x) = A \text{ sen}(kx)$

b)  $\psi(x) = A \text{ cos}(kx) + iA \text{ sen}(kx)$

c)  $\psi(x) = A \text{ exp}(ikx) + B \text{ exp}(-ikx)$

d)  $\psi(x) = A \text{ sen}(kx) + A \text{ cos}(kx)$

e)  $\psi(x) = A \text{ exp}(ik(x-a)) \quad a = \text{cte.}$

f)  $\psi(x) = A \text{ exp}(ikx) + iA \text{ exp}(-ikx)$

g)  $\psi(x) = ax + b$

h)  $\psi(x) = x^2$

i)  $\psi(x) = x$

j)  $\psi(x) = A \text{ exp}(ax^2) \quad a = \text{cte., real}$

k)  $\psi(x) = A \text{ exp}(ax) \quad a = \text{cte., real}$

4. Determinar para qué potenciales  $V(x)$ , las siguientes funciones son autofunciones del operador energía  $\mathbf{H} = \mathbf{p}_x^2 + V(x)$

a)  $\psi(x) = A \text{ exp}(\alpha x) + B \text{ exp}(-\alpha x)$

b)  $\psi(x) = A \text{ exp}(ikx) + iB \text{ exp}(-ikx)$

c)  $\psi(x) = A \text{ exp}(-\alpha x^2/2)$

5. Una partícula en una dimensión tiene asociada una función de estado:

$$\psi(x) = A \frac{\exp(ip_0 x/\hbar)}{(a^2 + x^2)^{1/2}}$$

donde  $a$ ,  $p_0$  y  $A$  son constantes.

- Determinar  $A$  para que la función de estado este normalizada.
- Si se mide la posición de la partícula, ¿cuál es la probabilidad que el resultado esté comprendido entre  $-a/\sqrt{3}$  y  $a/\sqrt{3}$ ?
- Calcular el valor medio del operador  $\mathbf{p}_x$ .

6. La función de estado asociada a una partícula en una dimensión tiene la forma siguiente:

$$\psi(x) = A \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right) \exp(ip_0 x/\hbar)$$

donde  $a$ ,  $x_0$ ,  $p_0$  y  $A$  son constantes.

- Determinar la distribución de probabilidades en función de  $x$  y el valor de la constante  $A$ .
- Calcular los valores medios de  $\mathbf{x}$  y  $\mathbf{p}$  y las correspondientes dispersiones.
- Calcular la función de estado en la representación del momento lineal  $\phi(p)$  y la densidad de probabilidad asociada a ella.
- Calcular el valor medio de la energía cinética  $\langle \mathbf{p}^2/2m \rangle$
- Calcular  $\psi(x, t)$  y la distribución de probabilidades para  $\mathbf{x}$  y  $\mathbf{p}$  para todo tiempo.
- Calcular  $\delta x$  y  $\delta p$  para todo tiempo.

7. Sea la siguiente función de estado:

$$\psi(x, t) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{k_0^2}\right) \exp(i(kx - \omega t))$$

donde  $k_0$  es una constante positiva y  $A = 1/\sqrt{k_0}$ .

Calcular el valor medio del momento lineal y su dispersión.

8. Teniendo en cuenta las siguientes propiedades de los conmutadores:

i)  $[A, B] = -[B, A]$

ii)  $[A, A] = 0$

iii)  $[A + B, C] = [A, C] + [B, C]$

iv)  $[A B, C] = A [B, C] + [A, C] B$

Calcular a)  $[x_i, x_k]$ , b)  $[p_i, p_k]$ ,  $[x_k, p_i]$ , c)  $[x_k, p_i^2]$ , d)  $[x_k^{-1}, p_i]$ ,  $[x_k^{-1}, p_i^2]$ , e)  $[x p_y - y p_x, y p_z - z p_y]$  y sus variantes intercambiando las coordenadas, f)  $[x_k, H]$ , y g)  $[p_k, H]$ . Nota: considere que  $H = p^2/2m + V(x)$ . Nota:  $i = x, y, z$  coordenadas cartesianas del vector posición.

9. Evaluar explícitamente a partir del ejercicio anterior los conmutadores para  $H$ :

a)  $V(x) = V_o$ , constante.

b)  $V(x) = \frac{1}{2} k x^2$ , donde  $k$  es una constante.

c)  $V(x) \rightarrow V(r) = e^2/4\pi\epsilon_o r$ .

10. Mostrar que si dos operadores  $A$  y  $B$  conmutan, entonces existe una base de funciones  $\phi$  común a ambos operadores, es decir que vale:

$$A\phi = a\phi \text{ y } B\phi = b\phi$$

11. Si  $\psi(x)$  es una función normalizable y continua puede escribirse en términos de las autofunciones  $\phi(x)$  de un operador hermítico  $A$  según:

$$\psi(x) = \sum_i c_i \phi_i(x)$$

con

$$A\phi_i(x) = a_i \phi_i(x)$$

a) Obtener una expresión para los coeficientes  $c_i$ .

b) Calcular  $\langle A \rangle$ . Interpretar físicamente la cantidad  $|c_i|^2$ .

12. El operador  $exp(A)$  posee significado si se lo expande en serie de potencias:

$$exp(A) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} A^n$$

Mostrar que si  $|a \rangle$  es un autoestado de  $A$  con autovalor  $a$ , entonces es también autoestado de  $exp(A)$ . Determinar el autovalor.

13. Sea  $H$  el operador hamiltoniano de un sistema físico con autoestados y autovalores  $\phi_n$  y  $E_n$ , respectivamente. Mostrar que para un operador arbitrario  $A$ , el valor medio del conmutador  $[H, A]$  evaluado sobre un autoestado de  $H$  es nulo.

14. Los únicos elementos de matriz no nulos de los operadores  $\mathbf{x}$  y  $\mathbf{p}$  en el oscilador armónico son

$$\begin{aligned} \langle \nu + 1 | \mathbf{x} | \nu \rangle &= (\hbar/2m\omega)^{1/2} (\nu + 1)^{1/2} \\ \langle \nu - 1 | \mathbf{x} | \nu \rangle &= (\hbar/2m\omega)^{1/2} (\nu)^{1/2} \\ \langle \nu + 1 | \mathbf{p} | \nu \rangle &= i (\hbar m\omega/2)^{1/2} (\nu + 1)^{1/2} \\ \langle \nu - 1 | \mathbf{p} | \nu \rangle &= -i (\hbar m\omega/2)^{1/2} (\nu)^{1/2} \end{aligned}$$

y sus conjugados hermíticos.

a) Escribir explícitamente las matrices asociadas a  $\mathbf{x}$  y  $\mathbf{p}$  (numerar las filas y columnas por medio del número cuántico  $\nu = 0, 1, 2, \dots$ ) para los cuatro primeros estados. Confirmar por multiplicación matricial que se cumplen la relación de conmutación correspondiente.

b) Construir la matriz del Hamiltoniano formando la matrices de  $p^2/2m$  y  $\frac{1}{2} k x^2$  y luego sumando. ¿Cuales son los autovalores?

c) ¿Cómo haría para obtener los elementos de matriz

$$\langle \nu | \mathbf{x} \mathbf{p}^2 \mathbf{x} | \nu \rangle$$

## Serie 4

### *Momento Angular*

1. Evaluar los conmutadores  $[\mathbf{l}_i, \mathbf{l}_k]$  en la representación de coordenadas, donde los índices  $i$  y  $k$  indican las componentes  $x, y, z$  de los operadores.

2. Evaluar los conmutadores  $[\mathbf{l}_y^2, \mathbf{l}_x], [\mathbf{l}_y^2, \mathbf{l}_x^2]$  y  $[\mathbf{l}_x, [\mathbf{l}_x, \mathbf{l}_y]]$ . Nota: utilizar las propiedades enunciadas en la Serie 3.

3. Verificar que la expresión

$$\begin{aligned} \mathbf{l} \times \mathbf{l} &= \begin{vmatrix} \hat{i} & \hat{j} & \hat{k} \\ \mathbf{l}_x & \mathbf{l}_y & \mathbf{l}_z \\ \mathbf{l}_x & \mathbf{l}_y & \mathbf{l}_z \end{vmatrix} \\ &= \hat{i}(\mathbf{l}_y \mathbf{l}_z - \mathbf{l}_z \mathbf{l}_y) + \hat{j}(\mathbf{l}_z \mathbf{l}_x - \mathbf{l}_x \mathbf{l}_z) + \hat{k}(\mathbf{l}_x \mathbf{l}_y - \mathbf{l}_y \mathbf{l}_x) \end{aligned}$$

donde  $i\hbar \mathbf{l} = \hat{i}(i\hbar \mathbf{l}_x) + \hat{j}(i\hbar \mathbf{l}_y) + \hat{k}(i\hbar \mathbf{l}_z)$ , indica las relaciones básicas del momento angular. Nota: expandir el lado izquierdo de la expresión y comparar los coeficientes de los vectores unitarios; tener cuidado con el orden de las componentes vectoriales al expandir el determinante.

4. Verificar por medio del cálculo matricial que las siguientes matrices: *matrices de Pauli*

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

satisfacen las relaciones de conmutación del momento angular si escribimos  $\mathbf{s}_x = \frac{1}{2}\hbar\sigma_x$ , etc., y entonces provee una representación matricial para el momento angular. Mostrar que esta representación particular corresponde al caso  $s = 1/2$ . Nota: formar la matriz para  $\mathbf{s}^2$  y hallar sus autovalores.

5. Utilizando las matrices de Pauli, reducir los productos de operadores  $\mathbf{s}_x \mathbf{s}_y, \mathbf{s}_x \mathbf{s}_y^2 \mathbf{s}_z^2$  y  $\mathbf{s}_x^2 \mathbf{s}_y^2 \mathbf{s}_z^2$  a un operador de spin simple. Nota: escribir  $\mathbf{s}_x \mathbf{s}_y = 1/4\hbar^2 \sigma_x \sigma_y$  y evaluando el producto matricial observar que  $\mathbf{s}_x \mathbf{s}_y \propto \mathbf{s}_z$ , etc.

6. Calcular los elementos de matriz

i)  $\langle 0, 0 | \mathbf{l}_z | 0, 0 \rangle$

ii)  $\langle 1, 1 | \mathbf{l}^+ | 0, 0 \rangle$



$$\text{iii) } \langle 2, 1 | \mathbf{1}^+ | 2, 0 \rangle$$

$$\text{iv) } \langle 2, 2 | (\mathbf{1}^+)^2 | 2, 0 \rangle$$

$$\text{v) } \langle 2, 0 | \mathbf{1}^+ \mathbf{1}^- | 2, 0 \rangle$$

$$\text{vi) } \langle 2, 0 | \mathbf{1}^- \mathbf{1}^+ | 2, 0 \rangle$$

$$\text{vii) } \langle 2, 0 | (\mathbf{1}^-)^2 \mathbf{1}_z \mathbf{1}^+ | 2, 0 \rangle$$

Tener en cuenta la notación:  $\langle l', m_l' | \mathbf{A} | l, m_l \rangle$ .

7. Mostrar que si  $[\mathbf{j}_{1q}, \mathbf{j}_{2q'}] = 0$  para todo  $q, q'$ , entonces  $\mathbf{j}_1 \times \mathbf{j}_2 = -\mathbf{j}_2 \times \mathbf{j}_1$ . Realizar en particular el cálculo que muestra que en caso que valga  $\mathbf{j}_k \times \mathbf{j}_k = i \hbar \mathbf{j}_k$  con  $k = 1, 2$ , entonces  $\mathbf{j} \times \mathbf{j} = i \hbar \mathbf{j}$  donde  $\mathbf{j} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2$ . ¿Es  $\mathbf{j}_1 - \mathbf{j}_2$  un momento angular?

8. Determinar que momento angular total es posible en las configuraciones siguientes:

a)  $j_1 = 3, j_2 = 4$

b) dos electrones en un orbital con  $l_1 = l_2 = 1$  (orbitales tipo p)

c) dos electrones en un orbital con  $l_1 = l_2 = 2$  (orbitales tipo d)

d) dos electrones en la configuración pd

e) el momento angular total spin de cuatro electrones.

Nota: Utilizar las series de Clebsh-Gordan sucesivamente en e).

9. Determinar los coeficientes de acoplamiento vectoriales para un sistema con  $j_1 = 1$  y  $j_2 = 1/2$ . Evaluar los elementos de matriz  $\langle j' m' | \mathbf{j}_{1z} | j m \rangle$ .

10. ¿Cuál es el valor medio de la componente  $z$  del momento angular de un electron en el estado  $|G, M_L \rangle$  de la configuración  $d^2$  (dos electrones en el orbital d)? Nota: expresar el estado en la representación no acoplada y calcular  $\langle G, M_L | \mathbf{1}_{1z} | G, M_L \rangle$ . Evaluarlo para  $M_L = -4, -3, \dots, 3, 4$ .

## Serie 5

### *Atomo de Hidrógeno, Partículas idénticas y Atomos con Muchos Electrones*

1. Considerar un átomo de hidrógeno en su estado fundamental:

a) Calcular la probabilidad de encontrar el electrón a una distancia mayor que  $a_o$  ( $a_o \approx 0,5$  es el radio de Bohr) del núcleo.

b) Cuando el electrón está a una distancia  $2a_o$  del núcleo toda su energía es potencial y la física clásica predice que no puede exceder esa distancia. En la teoría cuántica, ¿cuál es la probabilidad de hallar al electrón a una distancia mayor que  $2a_o$ ?

c) El radio de un protón es del orden de  $10^{-13}$  cm. Calcular la probabilidad que el electrón este dentro del protón.

2. Calcular  $\langle r \rangle$  y  $\langle r^{-1} \rangle$  para el estado fundamental de un átomo hidrogenoide de número atómico  $Z$ . Calcular  $\langle V(r) \rangle$  para ese estado.

3. Encontrar los valores más probables de  $r$  (en unidades de  $a_o$ ) para el electrón del átomo de hidrógeno en el estado  $2s$ .

4. Considerar un átomo de hidrógeno en el estado

$$\psi = A (\phi_{210} - \phi_{21-1} + \phi_{100})$$

donde los  $\phi_{nlm}$  son los autoestados del hamiltoniano.

a) Normalizar la función de estado

b) ¿Qué valores pueden medirse de  $E$ ,  $\mathbf{L}^2$  y  $\mathbf{L}_z$  y con que probabilidades? Hacer una tabla.

c) Calcular  $\langle \mathbf{L}^2 \rangle$ ,  $\langle \mathbf{L}_z \rangle$  y  $\langle \mathbf{H} \rangle$ .

d) Hallar  $\psi(t)$  y repetir los cálculos del punto c). Discutir los resultados.

Repetir todo el ejercicio para los estados definidos por:

$$\psi = \frac{A}{\sqrt{3}} \left( \phi_{200} - \frac{1}{\sqrt{2}} \phi_{211} + \frac{1}{\sqrt{3}} \phi_{21-1} \right)$$

y

$$\psi = \frac{A}{\sqrt{3}} \left( \phi_{100} - \frac{1}{\sqrt{2}} \phi_{211} + \frac{1}{\sqrt{3}} \phi_{21-1} \right)$$

5. Considerar un electrón en el átomo de hidrógeno en el estado  $n = 2$   $l = 1$ .

- a) Graficar la densidad de carga en función de  $r$ . Determinar, en términos de  $a_0$ , su máximo.
- b) Calcular  $\langle r_{12} \rangle$  y comparar con el resultado de a).

6. Suponer que los dos electrones del átomo de helio están en estados  $\{l = 1, s = 1/2\}$  y  $\{l = 2, s = 1/2\}$ , respectivamente:

- a) Calcular los valores posibles de los números cuánticos  $l$  del momento angular orbital total y de  $s$  spin total.
- b) Hallar los posibles valores del número cuántico  $j$  que corresponde a  $\mathbf{J}^2$ , siendo  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ .
- c) Considerando a cada electrón por separado, hallar los valores de los números cuánticos  $j_1$  y  $j_2$  del momento angular total de cada electrón.
- d) Teniendo en cuenta lo hallado en c) determinar los valores posibles del número cuántico  $j$  del momento angular total. Comparar con lo hallado en b).

7. Mostrar que un átomo en un autoestado descrito por los números cuánticos  $n, l, s, j, m_j$  vale:

$$\langle \mathbf{SL} \rangle = \begin{cases} \frac{1}{2} l \hbar^2, & j = l + 1/2 \\ -\frac{1}{2} (l + 1) \hbar^2, & j = l - 1/2 \end{cases}$$

Nota: al término  $\langle \mathbf{SL} \rangle$  se lo denomina *acoplamiento spin-órbita*.

8. Determinar clásicamente el momento magnético de un electrón en una órbita circular de radio  $r$  alrededor de un protón. Escribirlo en función de un operador conocido y cuantificarlo.

9. **Efecto Zeeman:** Representar el efecto de la aplicación de un campo magnético constante y uniforme  $\vec{B}$  sobre un átomo de hidrógeno. Escribir el hamiltoniano y encontrar sus autoestados y autovalores. Hallar la degeneración de cada estado y comparar mediante un gráfico los valores de energía antes y después de la aplicación del campo magnético.

10. Considerar un sistema de dos electrones (por ejemplo, un biradical). La energía del sistema depende de la orientación relativa de sus spines.

- a) Mostrar que el operador  $\frac{J}{\hbar} \mathbf{s}_1 \cdot \mathbf{s}_2$  donde  $J$  es el valor del número cuántico correspondiente al momento angular total, distingue entre estados singletes y tripletes.
- b) Si el sistema se expone a un campo magnético en la dirección  $z$ , los electrones por encontrarse en distintos entornos "sienten campos locales diferentes y su interacción puede representarse por la expresión

$$(\mu_B/\hbar) B (g_1 s_{1z} + g_2 s_{2z})$$

con  $g_1 \neq g_2$ . Escribir la matriz del hamiltoniano total y mostrar que cuando  $\hbar J \gg \mu_B B$ , la representación acoplada es más adecuada, pero cuando  $\hbar J \ll \mu_B B$ , la más adecuada es la no acoplada. Encontrar los autoestados del sistema en cada caso.

## Serie 6

### *Mecánica Estadística*

1. Un *ensemble* de 5 miembros tiene una energía  $\varepsilon_o + \Delta$ . Cada miembro puede tener cualquiera de las energías  $\varepsilon_o + k \Delta$ , con  $k$  entero. ¿Cuántas distribuciones hay, que correspondan a una distribución uniforme de la energía sobre los miembros del ensemble?

2. Construir una tabla respecto al problema anterior con columnas encabezadas por la energía de un miembro, desde  $\varepsilon_o$  hasta  $\varepsilon_o + 5 \Delta$ , y escribir debajo de las distribuciones compatibles con la energía media  $\varepsilon_o + \Delta$ . Por ejemplo, comenzar por 5, 0, 0, 0, 0, solo un miembro puede tener la energía  $\varepsilon_o + 5 \Delta$  y los otros cuatro deben tener entonces  $\varepsilon_o$ . Hallar el peso de cada distribución. ¿Cuál es la distribución más probable?

3. Sea un átomo de argón atrapado en una caja cúbica de volumen  $V$ . ¿Cuánto vale la función de partición traslacional a las temperaturas de: i)  $100K$ , ii)  $298K$ , iii)  $10^4K$ , iv)  $0K$ ; si la arista de la caja mide  $1 \text{ cm}$ ?

4. La forma de la función de partición traslacional, como se la utiliza normalmente, es válida cuando existe un enorme número de niveles de energía accesibles. ¿Cuándo resulta inválida la expresión normal y cuándo debemos recurrir a la sumatoria explícita  $q = \sum_k \exp(-\beta\varepsilon_k)$ ? ¿Cuál debería ser la temperatura del argón para que el valor de la función de partición cayera a  $10^7$ ?

5. Hay varios tipos de funciones de partición que pueden calcularse por suma directa de exponenciales, por el uso de datos espectroscópicos para los niveles de energía molecular involucrados. Tal es por ejemplo, el caso del átomo de Te, que posee varios estados electrónicos excitados de energías no muy altas. Hallar la función de partición electrónica para este tipo de átomos a las siguientes temperaturas de: i)  $298K$ , y ii)  $5000K$ . Utilizar para ello los datos espectroscópicos siguientes: estados fundamental (quíntuplemente degenerado);  $4751 \text{ cm}^{-1}$  (triplemente degenerado);  $4707 \text{ cm}^{-1}$  (no degenerado);  $10559 \text{ cm}^{-1}$  (quíntuplemente degenerado).

6. ¿Qué proporción de átomos de Te están: a) en su estado fundamental; b) en el estado excitado a  $4751 \text{ cm}^{-1}$ , a las dos temperaturas del problema anterior?

7. La mayor parte de las moléculas tienen sus estados electrónicos excitados en energías tan altas respecto del estado fundamental, que solo hace falta considerar este último para el cálculo de las propiedades termodinámicas. Sin embargo, hay varias excepciones, y un caso interesante es el del sistema molecular NO, que posee un estado electrónico excitado tan solo a  $121,1 \text{ cm}^{-1}$  por encima del estado fundamental. Ambos estados son

doblemente degenerados. Calcular y representar gráficamente la función de partición electrónica del NO para temperatura variando desde cero a infinito. ¿Cuál es la distribución de poblaciones relativas a temperatura ambiente?

8. Obtener la energía interna electrónica media de la molécula de NO a temperatura ambiente.

9. Un spin electrónico puede adoptar dos orientaciones en un campo magnético, cuyas energías son  $\pm\mu_B B$ . Hallar la expresión para la función de partición de spin electrónico y para la energía media. Graficar ambas como función del campo aplicado a  $298K$  y  $4K$ . ¿Cuales son las poblaciones relativas de los niveles de spin a esas dos temperaturas?

10. Calcular la contribución electrónica a la entropía molar del átomo de Te a las temperaturas de: a)  $298K$ ; b)  $5000K$ . Utilizar los datos del problema 5.

11. Calcular la contribución electrónica a la entropía molar de la molécula de NO a las temperaturas de: a)  $298K$ ; b)  $500K$ . Utilizar los datos del problema 7.

12. Determinar la dependencia de la entropía molar de un conjunto de spines electrónicos independientes, con la intensidad del campo magnético aplicado. ¿Qué se esperaría para el valor de la entropía de los spines a a)  $B = 0$  y a  $B = \infty$ ? y ¿Cuánto vale al calcularla?

13. Suponer que un mol de átomos de argón están inicialmente mantenidos en posiciones fijas y luego se les permite moverse libremente. Calcular la variación de entropía ante el cambio en esta conformación.

14. Analizar la condición de validez para predecir el comportamiento clásico de un sistema:  $\lambda \ll L$ , donde  $\lambda$  es la longitud de onda de de Broglie de las partículas y  $L$  la longitud de la caja.<sup>en</sup> la que se encuentran confinadas. Hallar una expresión más "fuerte", es decir relacionada con los parámetros macroscópicos como volumen  $V$  y temperatura  $T$ .

15. ¿Cuál es el calor específico a volumen constante de un gas diatómico a temperatura ambiente  $T_o$ ? Utilizar el hecho que todas las moléculas diatómicas poseen un espaciamiento entre niveles rotacionales muy pequeño comparado con  $kT_o$ , y en cambio entre los niveles vibracionales es grande comparado con  $kT_o$ . Evaluar numéricamente el valor, eligiendo los datos que se necesitan. Elegir la molécula.

16. Considerar un "gas" de dos partículas A y B no interactuantes, de manera que cada una de ellas pueden estar en alguno de los tres estados cuánticos numerados 1, 2 y

3.

- a) Calcular el número total de estados cuánticos del sistema "gas", suponiendo las partículas como distinguibles.
- b) Idem al punto a) pero suponiendo a las partículas A y B como bosones.
- b) Idem al punto a) pero suponiendo a las partículas A y B como fermiones.
- d) ¿Qué conclusiones puede sacar de los resultados anteriores? Pensar en la cantidad de estados que se pueden construir en cada caso, que elementos en común posee cada caso y que los diferencia, etc.

17. Idem al problema 16. pero para un "gas" de 3 partículas A, B y C.

- 18. a) Plantear los problemas 16. y 17. en términos de funciones de estado.
- b) Analizar el problema de distinguibilidad en términos de esas funciones de estado.
- c) Expresar la densidad de probabilidad asociada a esos estados.
- d) Discutir las contribuciones directas y de intercambio correspondientes al caso de 2 partículas. ¿Qué ocurre en el límite clásico?

19. a) Calcular la distribución estadística de un gas de fotones a una temperatura T.

b) Idem al punto a) pero para una distribución de un sistema de N partículas de Bose. Interpretar el parámetro adicional que interviene en este cálculo con respecto al anterior.

20. a) Escribir la función de partición  $Q$  de un gas ideal de Fermi-Dirac y expresar la entropía  $S$  en función de  $\bar{n}_r$  (número medio de partículas en el estado de energía  $\varepsilon_r$ ).

b) Idem que el punto a) para un gas de Bose-Einstein.

c) Expresar el límite clásico para los casos anteriores.

21. a) Escribir la función de partición de un gas ideal monoatómico encerrado en una caja cúbica de lado L a una temperatura T. Explicitarla en el límite clásico de densidad suficientemente baja o temperatura suficientemente alta (ver Problema 3).

b) Teniendo en cuenta la discusión realizada sobre la validez del paso de la sumatoria a la integral, mostrar que es equivalente a que  $\bar{\lambda} \ll L$  donde  $\bar{\lambda}$  es el valor medio de la longitud de onda de de Broglie asociada a la partícula.

c) Discutir en forma cualitativa si hay o no, relación entre la dependencia  $\bar{\lambda} = \bar{\lambda}(T)$  y la condición límite  $\exp(\alpha + \beta\varepsilon_r) \gg 1$  en las distribuciones de Fermi-Dirac y Bose-Einstein.