Problema 1.

Considera el problema de la partícula a una caixa monodimensional de longitud unitat i potencial zero. Calcula l'autovalor exacte d'energia corresponent a l'estat fonamental de l'esmentat problema. Calcula l'autovalor del quadrat de l'operador hamiltonià. Considera ara la funció aproximada no normalitzada $\Psi_0 = x(1-x)$ corresponent a l'estat fonamental. Calcula el valor mijà de l'operador hamiltonià i del seu quadrat. Compara aquests resultats amb els anteriors.

En lloc de calcular les integrals com ho has fet adés, expandeix primer la funció $\Psi_0 = x(1-x)$ en la base complerta de funcions normalitzades $\phi_n(x) = \sqrt{2}\sin{(n\pi x)}$ i calcula les integrals $H_{ij} =< \phi_i|\hat{\mathcal{H}}|\phi_j >$. A partir d'elles i dels coeficients de l'expansió de la funció $\Psi_0 = x(1-x)$ en aquesta base, calcula el valor mijà de l'operador hamiltonià i del seu quadrat. Tot seguit, tenint en compte que $\hat{\mathcal{H}}$ és hermític i que les funcions que treballem són reals, considera que: $< \psi|\hat{\mathcal{H}}^2|\psi > = < \psi|\hat{\mathcal{H}}\hat{\mathcal{H}}|\psi > = < \psi\hat{\mathcal{H}}|\hat{\mathcal{H}}\psi >$ $= < \psi|\hat{\mathcal{H}}|\xi > = < \xi|\hat{\mathcal{H}}|\psi > = < \hat{\mathcal{H}}\psi|\hat{\mathcal{H}}\psi >$. Aleshores , amb la funció normalitzada $\Psi_0 = Nx(1-x)$, calcula el valor mitjà del quadrat del operador hamiltonià utilitzant l'expressió: $< \hat{\mathcal{H}}\Psi_0|\hat{\mathcal{H}}\Psi_0 >$.Et sorprenen els resultats?

En cas afirmatiu contesta les següents preguntes: Què és un operador hermític? És correcte definir un operador per la seua fòrmula, independentment del seu rang i domini? Què són les condicions de contorn?

Si encara no ho tens clar, considera l'operador energia cinètica en una dimensió $\hat{T} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}$. Considera l'espai vectorial de polinomis de la forma $Q_{n+2}(x) = x(1-x)P_n(x)$, on $P_n(x)$ és un polinomi qualsevol de grau n. Comprova l'hermiticitat de $\hat{T}$ i de $\widehat{T^2}$. Considera després l'espai de funcions expandit per les funcions circulars $\{\sin{(n\pi x)}\}$ amb $n \leq 10$. Comprova l'hermiticitat de $\hat{T}$ i de $\widehat{T^2}$.

Ara segurament ja estaràs en disposició de contestar correctament la pregunta: $\hat{T} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2}$ representa sempre la magnitud física energia cinètica?

Problema 2

Considerem el rotor elàstic bidimensional de massa i constant elàstica unitat, descrit per $\hat{\mathcal{H}} = -\frac{1}{2}\bigtriangledown^2 + \frac{1}{2}r^2$. Escriu-lo en coordenades cartesianes. Aleshores, separa variables. Fes tractament algebraic a cadascuna de les dues equacions que has obtingut. Reuneix els resultats i demostra que: $E(v_x, v_y) = v_x + v_y + 1$; $|v_x, v_y >= N_{v_x} N_{v_y} H_{v_x}(x) H_{v_y}(y) e^{-x^2/2} e^{-y^2/2}$.

Escriu aquest mateix operador en coordenades polars. Separa variables i troba les solucions de la part angular. Omiteix trobar les funcions confluents hipergeomètriques que constitueixen les solucions de la part radial.

La separació en polars evidencia que $\hat{L}_z$ és una constant de moviment. També ho pots veure en cartesianes si escrius $\hat{L}_z$ en termes dels creadors i aniquiladors b_x^+, b_x, b_y^+, b_y i, aleshores, comproves que $\left[\hat{\mathcal{H}}, \hat{L}_z\right] = 0$. Comprova-ho!
Aquest resultat no implica, però, que $|v_x, v_y >$ siga funció pròpia d'$\hat{L}_z$. Comprova que $\hat{L}_z|v_x, v_y > \neq \lambda|v_x, v_y >$.
Ara bé, atés que $\left[\hat{\mathcal{H}}, \hat{L}_z\right] = 0$, sempre pots trobar combinacions lineals, dins de la degeneració d'$\hat{\mathcal{H}}$, que siguen pròpies d'$\hat{L}_z$. Demostra que si $v_1 + v_2 = v_3 + v_4$, aleshores, $|v_1, v_2 >$ està degenerat amb $|v_3, v_4 >$. Demostra que $|v_x, v_y >$ presenta una degeneració $g = v_x + v_y + 1$.

Particularitza el cas $v_x + v_y = 1$. Hi han dos estats degenerats $\{|10 >$ i $|01 >\}$. Representa $\hat{L}_z$ en aquesta base. Diagonalitza la representació i troba les dues autofuncions simultànies d'$\hat{\mathcal{H}}$ i $\hat{L}_z$. Comprova que compleixen l'equació d'autovalors de l'energia, escrita aquesta en coordenades cartesianes. Reescriu les les dues autofuncions simultànies d'$\hat{\mathcal{H}}$ i $\hat{L}_z$ en coordenades polars i comprova que compleixen l'equació d'autovalors de l'energia, escrita ara en coordenades polars.

(Fixat com hem trobat solucions d'una equació diferencial en r, complicada, a partir d'altres més senzilles en cartesianes).

Problema 3

En general, podem escriure un operador de rotació en la forma $e^{i(\theta_x \hat{J}_x+\theta_y \hat{J}_y+\theta_z \hat{J}_z)}$ i un de traslació en la forma $e^{i(a_x\hat{p}_x+a_y\hat{p}_y+a_z\hat{p}_z)}$. Demostra, en particular, que $e^{i\theta_z\hat{L}_z}$ actua sobre $f(\theta)$ produint una rotació $e^{i\theta_z\hat{L}_z}f(\theta) = f(\theta+\theta_z)$. Demostra, també en particular, que $e^{ia_x\hat{p}_x}$ actua sobre $f(x)$ produint una traslació $e^{ia_x\hat{p}_x}f(x) = f(x+a_x)$.

Ara imagina que estàs al pol nord i que camines una distància "d" al llarg d'una línia recta en la direcció "$-y$". Tot seguit fas un desplaçament "d" perpendicular al primer (seguint la geodèsica). Si observem els teus moviments des de l'exterior del planeta el que realment veiem és que has fet és una rotació al voltant de l'eix "x" d'angle $\theta = d/R$ (R és el radi de la Terra. Fixat, doncs, que $d \ll R$) seguida d'una rotació d'angle també $\theta = d/R$ al voltant de l'eix $\vec{n}$ ($\vec{n} = \cos\theta\vec{j} + \sin\theta\vec{k}$, on $\theta = d/R$).

Aplica la rotació $e^{i\theta\hat{J}_x}$ sobre el vector ($x = 0$,$y = 0$,$z = R$), que defineix la posició del pol nord, i comprova que, si $d \ll R$, aquesta rotació equival a sumar un desplaçament "$-d$" en la direcció "y" a l'esmentat vector que defineix la posició del pol nord. Tot seguit, aplica una rotació θ al voltant de l'eix "$\vec{n}$". Efectua ara el producte de les exponencials (assumint $d \ll R$, i.e. $\cos\theta \to 1$, $\sin\theta \to \theta$, $e^x = 1 + x + x^2/2! + \ldots$) i anota el resultat.

Des del pol nord estant efectua els desplaçaments anteriors en ordre invers: primer camina en direcció "$-x$" (rotació al voltant de l'eix "y") i després en la direcció perperdicular (rotació al voltant de l'eix $\vec{n'} = \cos\theta\vec{i} - \sin\theta\vec{k}$). Comprova que no s'aplega al mateix lloc. Que els punts a que s'aplega d'una i altra manera estan separats una distància $3d^2/R$. Comprova tanmateix que les "translacions perpendiculars" commuten en el límit $d/R \to 0$ on les "traslacions" són realment traslacions i no rotacións infinitesimals.

Fixat que els operadors $\hat{p}_x$ i $\hat{p}_y$ comuten perquè les traslacions "x" i "y" comuten i que els operadors $\hat{L}_x$ i $\hat{L}_y$ no commuten perquè les rotacions corresponents no commuten!

Nota: Fixa't que $\hat{R}_{\theta_z}f(\theta) = f(\hat{R}_{\theta_z}^{-1}\theta)$, per això tenim que $e^{i\theta_z\hat{L}_z}f(\theta) = f(\theta+\theta_z)$ equival a fer una rotació en sentit contrari sobre la funció. (Recorda que $e^{i\theta_z\hat{L}_z} = \sum_0^\infty \frac{(i\theta_z\hat{L}_z)^k}{k!} = \sum_0^\infty \frac{(\theta_z d/d\theta)^k}{k!}$).

Problema 4

- Demostra que $[\phi_k \, x \, (\phi_m^*)']_{x\to\pm\infty} = 0$.

  Pensa 10 minuts abans de llegir la *primera* ajuda[1]. Si amb aquesta ajuda i uns minuts més no has trobat el camí de la solució, consulta la *segona* ajuda[2]. I així succesivament amb la tercera[3] quarta[4] i cinquena[5] ajuda. Una cosa més: encara que no et calguen les ajudes (i una volta fet el problema) llig-les, per si de cas et fan pensar.

- En espectroscòpia és molt important la relació que hi ha entre el valor de transició entre dos estats ϕ_m i ϕ_k dels operadors *velocitat de dipol* $\frac{\partial}{\partial x}$ i *moment dipolar* x:

  $$< \phi_m | \frac{\partial}{\partial x} | \phi_k > = -\frac{m}{\hbar^2} \, (E_m - E_k) \; < \phi_m | x | \phi_k >$$

  Feu la demostració amb la següent ajuda: Primer escriviu l'eq. estacionària de Schrödinger per a ϕ_m^* i la multipliqueu per $x \, \phi_k$. Segon, escriviu l'eq. estacionària de Schrödinger per a ϕ_k i la multipliqueu per $x \, \phi_m^*$. Tercer, resteu les dues equacions i integreu per parts la identitat resultant (allò que heu demostrat a l'apartat anterior us serà d'utilitat a l'hora d'integrar).

- Comproveu la relació anterior al cas de l'oscil·lador harmònic. Ajuda: feu us dels operadors de creació i aniquilació i recordeu que:

  $$b|n> = \sqrt{n}|n-1> \qquad\qquad b^+|n> = \sqrt{n+1}|n+1>.$$

---

[1] Per a que l'integral $\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx$ siga finita cal que $f(x)$ s'aproxime asimptòticament a zero a mesura que x s'aproxima a $\pm\infty$.

[2] L'element $x_{mk} = < \phi_m | x | \phi_k >$ de la representació de l'operador x en la base d'autovectors (o en qualsevol altra base que genere el mateix espai de Hilbert de funcions quadràticament integrables) ha d'existir (ha de ser finit). Aleshores, cal que $[\phi_m^* \, x \phi_k]_{x\to\pm\infty} = 0$.

[3] Demostra que també la derivada de ϕ_m s'aproxima asimptòticament a zero si x tendeix a infinit: $\phi_m'(\pm\infty) = 0$. Ajuda: fixa't que $< \phi_m | -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} | \phi_m >$, valor mitjà de l'energia cinètica, cal que siga finit. És immediat, doncs, (deriveu per parts) que $< \phi_m' | \phi_m' >$ és finit i que, aleshores, cal que l'integrand $|\phi_m'|^2$ (i per la qual cosa també ϕ_m') es faci zero als extrems $x \to \pm\infty$.

[4] Fixa't que ϕ_m' és necessàriament contínua i derivable i pot ser expandida en la base completa de funcions d'ona. És a dir, pertany a l'espai de Hilbert on està definit l'hamiltonià (tot i que poguera no pertanyer al seu Domini, com per exemple si ϕ_m' no fos derivable dues voltes). ϕ_m' podria fins i tot ser element d'una base d'aquest espai de Hilbert.

[5] Anomena ϕ_p^* a $(\phi_m^*)'$. Aleshores com x_{pk} està definit (és finit) i cal, doncs, que $\left[\phi_p^* \, x \phi_k\right]_{x\to\pm\infty} = 0$. És a dir que $[(\phi_m^*)' \, x \phi_k]_{x\to\pm\infty} = 0$.