

Problemes d'Ampliació de Mecànica Quàntica

- 1.- Amb l'àlgebra de bra-kets demostrar ò avaluar
 - a) $\text{tr}(XY) = \text{tr}(YX)$
 - b) $(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$
 - c) $\exp[i f(A)]$, en forma de bra-kets essent A Hermític i amb autovalors coneguts
 - d) $\sum_{a'} \psi_{a'}(\vec{x}') \psi_{a'}(\vec{x}'')$
- 2.- Considerar l'espai de kets generat pels autokets $\{|a'\rangle\}$ d'un observable A , sense degeneració
 - a) demostrar que $\Pi_{a'}(A - a')$ és l'operador nul.
 - b) Quin és el significat de $\Pi_{a'' \neq a'} \frac{(A - a'')}{(a' - a'')}$
 - c) Il·lustrar a) i b) amb $A = S_z$ i espí 1/2.
- 3.- Amb les relacions d'ortonormalitat de $|\pm\rangle$, i la deducció de S_x i S_y feta a classe provar que

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk} \hbar S_k, \quad \{S_i, S_j\} = \left(\frac{\hbar^2}{2}\right) \delta_{ij}$$

- 4.- Per un sistema d'espí 1/2 construir $|\vec{S} \cdot \hat{n}; +\rangle$ tal que

$$\vec{S} \cdot \hat{n} |\vec{S} \cdot \hat{n}; +\rangle = \left(\frac{\hbar}{2}\right) |\vec{S} \cdot \hat{n}; +\rangle,$$

amb $\hat{n}$ un vector unitari d'angles polars (α, β) . Expressar el resultat com una superposició de $|+\rangle$ i $|-\rangle$.
(Solució: $\cos(\beta/2)|+\rangle + \sin(\beta/2)e^{i\alpha}|-\rangle$)

- 5.- Repetir el problema anterior considerant l'estat d'espí màxim en direcció $\hat{n}$ per un sistema d'espí 1.
- 6.- Un sistema d'espí 1/2 es troba en un autoestat de $\vec{S} \cdot \hat{n}$ amb autovalor $\hbar/2$, amb $\hat{n}$ un vector unitari en el pla xz i fent un angle γ amb l'eix z positiu.
 - a) Mesurar S_x . Quina és la probabilitat d'obtenir $+\hbar/2$?
 - b) Quina és la dispersió de S_x , es a dir $\langle (S_x - \langle S_x \rangle)^2 \rangle$? (comprovar els casos $\gamma = 0, \pi/2$ i π).
- 7.- Un feix d'àtoms d'espí 1/2 passa per una sèrie d'aparells d'Stern-Gerlach amb les següents condicions
 - a) la primera mesura fa un filtratge deixant passar únicament àtoms amb $s_z = \hbar/2$
 - b) la segona filtra els àtoms amb $s_n = \hbar/2$, essent s_n l'autovalor de $\vec{S} \cdot \hat{n}$, amb $\hat{n}$ en el pla xz i d'angle β respecte a l'eix z .
 - c) la tercera accepta àtoms de $s_z = -\hbar/2$ únicament.
 Quina és la intensitat del feix final $s_z = -\hbar/2$ si la intensitat del feix que surt de a) era la unitat ? Com hem d'orientar el segon aparell SG per maximitzar la intensitat final ?
- 8.- Dos observables incompatibles A_1 i A_2 , que no depenen del temps explícitament, conmuten amb l'Hamiltonià; $[H, A_1] = [H, A_2] = 0$. Provar que els autoestats d'energia són en general degenerats. Hi ha excepcions ? (Comparar amb el pou central $H = \vec{p}^2/2m + V(r)$, amb $A_1 = L_z, A_2 = L_x$).
- 9.- Avaluar el producte $\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle$ per una partícula unidimensional confinada pel pou

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 < x < a \\ \infty & \text{en altre cas} \end{cases}$$

- 10.- Provar que

$$\langle p' | x | \alpha \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \langle p' | \alpha \rangle$$

$$\langle \beta | x | \alpha \rangle = \int dp' \phi_\beta^*(p') i\hbar \frac{\partial}{\partial p'} \phi_\alpha(p')$$

on $\phi_\alpha(p') = \langle p' | \alpha \rangle$ i $\phi_\beta(p') = \langle p' | \beta \rangle$ són funcions d'ona a l'espai de moments.

- 11.- a) Considerar una col·lectivitat pura d'espí 1/2. Suposar coneguts $\langle S_x \rangle$, $\langle S_z \rangle$ i el signe de $\langle S_y \rangle$. Mostrar que amb això es pot determinar el ket de l'estat.
 b) Considerar una col·lectivitat mescla d'espí 1/2. Suposar conegudes les mitjanes $[S_x]$, $[S_y]$ i $[S_z]$. Mostrar com es pot construir la matriu 2×2 que caracteritza la col·lectivitat.

- 12.- a) Provar que l'evolució temporal de l'operador densitat ρ en la imatge d'Schrödinger és

$$\rho(t) = \mathcal{U}(t, t_0) \rho(t_0) \mathcal{U}^\dagger(t, t_0) ,$$

essent $|\alpha, t_0; t\rangle = \mathcal{U}(t, t_0) |\alpha, t_0\rangle$.

- b) Demostrar que si a $t = 0$ la col·lectivitat és pura, no pot convertir-se per evolució temporal en col·lectivitat mescla. Suposar l'evolució governada per l'equació d'Schrödinger.
- 13.- Considerar una col·lectivitat de sistemes d'espí 1. Quants paràmetres reals i independents fan falta per especificar l'estat (i.e., la seva matriu densitat)? Que hem de conèixer ademés de $[S_x]$, $[S_y]$ i $[S_z]$?
- 14.- Una col·lectivitat d'espí 1/2 ve descrita pel ket $|+\rangle$. A continuació la preparam realitzant una mesura no selectiva de $\vec{S} \cdot \hat{n}$, on $\hat{n} \equiv (1, 1, 1)/\sqrt{3}$. Determinar:
 a) La puresa de la col·lectivitat abans i després de la preparació. Predir també les probabilitats d'obtenir $+\hbar/2$ i $-\hbar/2$ en una mesura de S_z en cada cas.
 b) Quins $\hat{n}$'s fan que els resultats de l'apartat a) siguin els mateixos abans i després de la preparació?
- 15.- Una col·lectivitat d'espí 1/2 ve caracteritzada per

$$[S_x] = 3\hbar/8, \quad [S_y] = \sqrt{3}\hbar/8, \quad [S_z] = \hbar/4$$

- a) Determinar si se tracta d'una col·lectivitat pura o no.
 b) Realitzam una mesura no selectiva de S_x . A la col·lectivitat resultant, quina és la probabilitat d'obtenir $+\hbar/2$ en una mesura de S_z ? i el valor de $[S_z]$?
- 16.- Siguin Λ_n i Λ_{b_i} els projectors sobre els espais propis dels observables H (Hamiltonià) i B amb valors propis E_n i b_i , respectivament. La col·lectivitat es troba en un estat en que mesures successives de H han proporcionat sempre el mateix resultat E_n .
 a) Quin és l'operador densitat ρ ?
 b) Realitzam ara una mesura no selectiva de B . Quin serà el nou operador densitat ρ' ?
 c) Quina era la probabilitat d'obtenir b_j en una mesura de ρ ? I de ρ' ? Comparar-les.
 d) Mesuram H de bell nou. Quina probabilitat tenim de reobtenir E_n ? Comparar-la amb la probabilitat a partir de l'estat inicial ρ .
 e) Sigui A un tercer observable amb valors propis a_i i projectors Λ_{a_i} . Calcular les probabilitats d'obtenir a_j als estats ρ i ρ' . Quan coincidiran?
- 17.- Sigui una col·lectivitat quasi-pura de moment descrita per l'operador

$$\rho(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp' \int_{-\infty}^{+\infty} dp'' f_\epsilon(p' - p) f_\epsilon^*(p'' - p) |p'\rangle \langle p''| ,$$

amb

$$f_\epsilon(p' - p) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{\epsilon}}{p' - p - i\epsilon} , \quad (\epsilon > 0)$$

(distribució de moments de Lorentz).

Calcular la densitat de probabilitat de l'operador de posició i la probabilitat d'obtenir un valor a l'interval $x_0 - \frac{\Delta x}{2} < x < x_0 + \frac{\Delta x}{2}$. Discutir el resultat obtingut.

(Utilitzar integració al pla complex.)

18.- Considerar l'autoestat de moment angular orbital $|\ell = 2, m = 0\rangle$. Suposar que aquest estat és rotat un angle β al voltant de l'eix y . Calcular la probabilitat de trobar al nou estat $m = 0, \pm 1, \pm 2$. (Utilitzar els harmònics esfèrics).

19.- Demostrar la fórmula, coneguda com de *sèries de Clebsch-Gordan*,

$$\mathcal{D}_{m_1 m'_1}^{(j_1)}(R) \mathcal{D}_{m_2 m'_2}^{(j_2)}(R) = \sum_{j m m'} C(j_1 j_2 j | m_1 m_2 m) C(j_1 j_2 j | m'_1 m'_2 m') \mathcal{D}_{m m'}^{(j)}(R).$$

Utilitzar la base acoplada $|j_1 j_2 j m\rangle$ i expressar-la en funció de $|j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$ i de coeficients de Clebsch-Gordan. Deduir la integral $\int d\Omega Y_{\ell m}^* Y_{\ell_1 m_1} Y_{\ell_2 m_2}$.

20.- Avaluar, per qualsevol j

$$\sum_{m=-j}^j |d_{mm'}^{(j)}(\beta)|^2 m.$$

Comprovar el resultat per $j = 1/2$ a partir de la matriu 2×2 de $d^{(1/2)}$.

21.- Considerar un sistema amb $j = 1$.

a) Trobar la matriu $\langle j m' | J_y | j m \rangle$.

b) Mostrar que per aquesta j

$$e^{-i J_y \beta / \hbar} = 1 - i \left(\frac{J_y}{\hbar} \right) \sin \beta - \left(\frac{J_y}{\hbar} \right)^2 (1 - \cos \beta).$$

c) Trobar la matriu de $d^{(1)}$.

22.- Considerar el tensor esfèric de rang 1 (es a dir, un vector) $V_0^{(1)} = V_z$, $V_{\pm 1}^{(1)} = \mp(V_x \pm i V_y)/\sqrt{2}$. Utilitzant l'expressió de $d^{(1)}$ del problema anterior avaluar

$$\sum_{q'} d_{qq'}^{(1)}(\beta) V_{q'}^{(1)}$$

i demostrar que el resultat coincideix amb la transformació per una rotació al voltant de l'eix y de $V_{x,y,z}$.

23.- Construir un tensor esfèric de rang 1 a partir dels vectors (U_x, U_y, U_z) i (V_x, V_y, V_z) . Escriure explícitament les components $T_q^{(1)}$ en funció de $U_{x,y,z}$ i $V_{x,y,z}$. Repetir el problema per rang 2.

24.- Suposar una partícula sense espín en un potencial central. Amb únicament el teorema de Wigner-Eckart relacionar tant com es pugui els elements de matriu $\langle n' \ell' m' | \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(x \pm i y) | n \ell m \rangle$ i $\langle n' \ell' m' | z | n \ell m \rangle$. Repetir el plantejament amb funcions d'ona $\psi(\vec{x}) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$.

25.- Escriure xy, xz i $(x^2 - y^2)$ com a components d'un tensor de rang 2. Es defineix el moment quadrupolar

$$Q = e \langle \alpha, j, m = j | (3z^2 - r^2) | \alpha, j, m = j \rangle.$$

Expressar $e \langle \alpha, j, m' | (x^2 - y^2) | \alpha, j, m = j \rangle$ en funció de Q i coeficients de Clebsch-Gordan.

26.- Avaluar els elements de matriu reduïts

$$\langle \ell' || Y_L || \ell \rangle, \quad \langle j || 1 || j' \rangle, \quad \langle j || \vec{J} || j' \rangle.$$

- 27.- Sigui $\mathcal{T}(\vec{d})$ l'operador de translació (desplaçament $\vec{d}$); $\mathcal{D}(\hat{n}, \phi)$ l'operador de rotació (amb eix $\hat{n}$ i angle ϕ), i π l'operador de paritat. Dir quines de les següents parelles conmuten i perquè:
- $\mathcal{T}(\vec{d})$ i $\mathcal{T}(\vec{d}')$ amb $\vec{d}$ i $\vec{d}'$ diferents.
 - $\mathcal{D}(\hat{n}, \phi)$ i $\mathcal{D}(\hat{n}', \phi)$, amb $\hat{n}$ i $\hat{n}'$ diferents.
 - $\mathcal{T}(\vec{d})$ i π
 - $\mathcal{D}(\hat{n}, \phi)$ i π

- 28.- Un estat mecano-quàntic Ψ és simultàneament autoestat de dos operadors Hermítics A i B que anticonmuten

$$AB + BA = 0 .$$

Què es pot dir dels autovalors d' A i B ? Discutir el cas dels operadors paritat i moment lineal.

- 29.- Degut a les interaccions febles (de corrents neutres) hi ha una contribució que viola la simetria de paritat al potencial d'interacció entre un electró atòmic i el nucli, de la forma

$$V = \lambda \left[\delta^{(3)}(\vec{x}) \vec{s} \cdot \vec{p} + \vec{s} \cdot \vec{p} \delta^{(3)}(\vec{x}) \right] ,$$

on $\vec{s}$ i $\vec{p}$ són l'espín i l'operador moment de l'electró, i el nucli és suposa a l'origen de coordenades. Això fa que per un àtom alcalí (amb un electró de valència) els estats habituals $|n, \ell, j, m\rangle$ siguin de fet superposicions

$$|n, \ell, j, m\rangle \longrightarrow |n, \ell, j, m\rangle + \sum_{n' \ell' j' m'} C_{n' \ell' j' m'} |n', \ell', j', m'\rangle .$$

Amb consideracions de simetria únicament, quins $(n' \ell' j' m')$ donaran contribució no nul·la? Com es calcula $C_{n \ell j m}$? Suposar conegudes totes les funcions d'ona i energies $(n \ell j m)$.

- 30.- a) Sigui $\psi(\vec{x}, t)$ la funció d'ona d'una partícula sense espín en tres dimensions corresponent a una ona plana. Demostrar que $\psi^*(\vec{x}, -t)$ és la funció d'ona d'una ona plana amb moment invertit.
b) Sigui $\chi(\hat{n})$ l'autoespínor de dues components de $\vec{\sigma} \cdot \hat{n}$ d'autovalor $+1$. Usant la forma explícita de $\chi(\hat{n})$ en termes dels angles polar i azimutal α i β verificar que $-i\sigma_2 \chi^*(\hat{n})$ és l'autoespínor amb direcció invertida.
- 31.- Sigui $\Phi(\mathbf{p}') = \langle \mathbf{p}' | \alpha \rangle$ la funció d'ona a l'espai de moments de l'estat $|\alpha\rangle$. Demostrar de la funció d'ona de l'estat invertit temporalment $\Theta|\alpha\rangle$ és $\Phi^*(-\mathbf{p}')$.
- 32.- Suposar una partícula sense espín lligada en un pou de potencial $V(\vec{x})$ tan asimètric que cap nivell és degenerat. Utilitzant l'invariança per inversió temporal demostrar que

$$\langle \mathbf{L} \rangle = 0$$

per qualsevol autoestat. Això es coneix com la 'reducció' del moment angular orbital. Si la funció d'ona d'un autoestat no degenerat s'expandeix com

$$\sum_{\ell m} F_{\ell m}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi) ,$$

quines restriccions obtenim sobre les $F_{\ell m}$?

- 33.- L'Hamiltonià per un sistema d'espí 1 és

$$H = AS_z^2 + B(S_x^2 - S_y^2) .$$

Trobar els autovectors i autovalors exactes. És l'Hamiltonià invariant per inversió temporal ? Com es transformen per inversió temporal els autoestats obtinguts ?

34.- Amb el teorema de Wick, calcular el següent element de matriu entre estats partícula-forat $|m(i)^{-1}\rangle = a_m^+ a_i |v\rangle$, essent $|v\rangle$ l'estat fonamental de Hartree-Fock:

$$\langle m(i)^{-1} | T | n(j)^{-1} \rangle, \quad \text{essent} \quad T = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} a_{\alpha}^+ a_{\beta} \quad \text{un operador a un cos.}$$

35.- Repetir el problema anterior per

$$\langle m(i)^{-1} | V | n(j)^{-1} \rangle, \quad \text{essent} \quad V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v_{\alpha\beta\gamma\delta} a_{\alpha}^+ a_{\beta}^+ a_{\delta} a_{\gamma} \quad \text{un operador a dos cossos.}$$

36.- Amb els resultats dels problemes 33 i 34 i les equacions de Hartree-Fock comprovar l'expressió donada per $\langle m(i)^{-1} | H | n(j)^{-1} \rangle$, amb $H = T + V$.

37.- Sigui $W = \sum_{\alpha\beta} w_{\alpha\beta} a_{\alpha}^+ a_{\beta}$ un operador a un cos i $O_{\lambda}^+ = \sum_{mi} Y_{mi}(\lambda) a_m^+ a_i - Z_{mi}(\lambda) a_i^+ a_m$ l'operador RPA per l'excitació $|\lambda\rangle$. Avaluar el següent element de matriu de transició, aproximant-lo dins la RPA en la forma indicada

$$\langle \lambda | W | \tilde{0} \rangle \approx \langle v | [O_{\lambda}, W] | v \rangle .$$

38.- De forma anàloga al problema anterior, Avaluar dins la RPA

$$\langle k | \lambda \rangle \approx \langle v | [O_k, O_{\lambda}^+] | v \rangle .$$

39.- Tenim un sistema de tres nivells $(\varepsilon_i, i = 1, 2, 3)$, amb els dos primer ocupats i el tercer buit (figura). Suposar que els elements de matriu de la interacció venen donats per $V_{ijkl} = \lambda(i-j)(\ell-k)$, on λ és constant i els índex de nivell estan en l'ordenació anteriorment indicada: $i, j, k, \ell \equiv 1, 2, 3$. Escriu l'equació pels estats excitats en funció de les ε_i 's i de λ en els models de Tamm-Dancoff i RPA.

