Universidad Central de Venezuela
Facultad de Ciencias
Escuela de Física

MECÁNICA CUÁNTICA (2431)
http://fisica.ciens.ucv.ve/~svincenz/mecanicacuantica.html

Tarea 1
Preliminares
http://fisica.ciens.ucv.ve/~svincenz/mc_t1.pdf

1°) Un cuerpo rígido con momento de inercia I_z rota libremente en el plano $x-y$. Sea φ el ángulo entre el eje x y el eje del rotor (no el eje de rotación). (a) Encuentre el Hamiltoniano $\hat{H}$ para este sistema. Ayuda: aquí tiene la respuesta

$$\hat{H} = \frac{1}{2I_z}\hat{L}_z^2 \tag{1.1}$$

¡Justifique este resultado! Nota: recuerde que $\hat{L}_z = -\mathrm{i}\hbar\,\mathrm{d}/\mathrm{d}\varphi$. (b) Encuentre los autovalores y las correspondientes autofunciones $\psi(\varphi)$ de $\hat{H}$. Por supuesto, ya que la función de onda debe ser "single-valued", se debe cumplir la condición $\psi(\varphi) = \psi(\varphi + 2\pi)$.

2°) Encuentre una solución esféricamente simétrica y que vaya a cero en el infinito para cada una de las siguientes ecuaciones diferenciales parciales:

$$\text{(a)} \quad \nabla^2\psi(\mathbf{r}) = -4\pi\delta(\mathbf{r}). \tag{2.1}$$

Respuesta:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{r}. \tag{2.2}$$

$$\text{(b)} \quad (\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{r}) = -4\pi\delta(\mathbf{r}). \tag{2.3}$$

Respuesta:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{r}\left\{\exp(\mathrm{i}kr) + A\left[\exp(\mathrm{i}kr) - \exp(-\mathrm{i}kr)\right]\right\}, \tag{2.4}$$

donde A es una constante.

$$\text{(c)} \quad \left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\psi(\mathbf{r},t) = -4\pi f(t)\delta(\mathbf{r}). \tag{2.5}$$

Respuesta:

$$\psi(\mathbf{r},t) = \frac{1}{r}f\left(t - \frac{r}{c}\right). \tag{2.6}$$

3°) Consideremos ecuaciones diferenciales lineales de orden n-ésimo que tienen la forma $a_0(x)u^{(n)}(x) + a_1(x)u^{(n-1)}(x) + \ldots + a_n(x)u(x) = f(x)$, donde $u^{(r)}(x)$ denota la derivada r-ésima de $u(x)$. Llamaremos $\hat{D}$ al operador diferenciación y $\hat{L} \equiv a_0(x)\hat{D}^n + a_1(x)\hat{D}^{n-1} + \ldots + a_n(x)$, donde las $a_i(x)$

$(i = 0, 1, \ldots, n)$ son funciones suaves. Con estas definiciones nuestra ecuación lineal puede escribirse así:

$$\hat{L}u(x) = f(x). \tag{3.1}$$

Se debe insistir en que los coeficientes $a_i(x)$ sean suaves para que el producto de la "distribución" $\hat{D}^i u(x)$ y la función $a_i(x)$ esté bien definido (vea la Def. 3.1 al final del problema). Nota: de todas formas, si uno usa una especie de regla de multiplicación extendida entonces si podría tratar con ecuaciones que tienen coeficientes no-suaves (vea la [Ref. 3.1] al final del problema).

Si se considera que (3.1) es una ecuación diferencial para la función generalizada $u(x)$, entonces existen diversos tipos de soluciones de esa ecuación. Estas soluciones se clasifican de la siguiente manera:

Definición 3.2:

(i) Cualquier distribución que satisface la ecuación (3.1) es llamada una **solución generalizada**.

(ii) Una **solución clásica** de (3.1) es una función ordinaria la cual es diferenciable n veces y la satisface (y por lo tanto, genera una distribución regular la cual satisface (3.1) en el sentido generalizado).

(iii) Una **solución débil** es una función ordinaria la cual podría no ser n veces diferenciable, y por lo tanto no es una solución clásica, sin embargo, ésta genera una distribución regular que es una solución generalizada.

(iv) Una **solución distribucional** es una distribución singular que satisface (3.1).

Se puede mencionar que toda solución es, o bien clásica, o debil, o distribucional; además, si la función $f(x)$ en (3.1) es una distribución singular, entonces todas las soluciones deben ser distribucionales o débiles. El asunto más destacable es que, admitiendo a las funciones generalizadas, estas pueden conducir a nuevas soluciones de ecuaciones que son incluso enteramente clásicas, es decir, ecuaciones que no contienen distribuciones singulares.

(a) Demuestre que la ecuación $xu'(x) = 0$ tiene la solución clásica $u(x) = \mathrm{const}$. Sin embargo, $u(x) = a\,\Theta(x) + b$, donde $\Theta(x)$ es la función de Heaviside, es una solución débil para las constantes (arbitrarias) a y b. Nota: si lo ha demostrado, entonces podrá concluir que se pueden tener soluciones no-clásicas las cuales no cumplen la "regla" que una ecuación de primer orden tiene una solución general con una sola constante arbitraria. Este fenómeno es bien conocido en la teoría clásica de ecuaciones diferenciales y esa solución débil no es realmente algo nuevo. Sin embargo, tenemos derecho a considerarla una solución generalizada propia de nuestra ecuación, aunque clasicamente no es diferenciable y por lo tanto no es una solución clásica, los matemáticos clásicos deben hacer algunas contorsiones para discutir este tipo de soluciones.

(b) Demuestre que la ecuación $x^2u'(x) = 0$ tiene la misma solución clásica y la misma solución débil que la ecuación $xu'(x) = 0$, pero también se tiene la solución distribucional $u(x) = a\,\delta(x) + b\,\Theta(x) + c$, para cualesquiera constantes a, b y c. Este tipo de soluciones no tienen análogo en la teoría clásica.

Nota final: es algo sorprendente que algunas ecuaciones diferenciales que son perfectamente convencionales puedan tener nuevas soluciones, y algunas de estas son singulares cuando se permiten funciones generalizadas. Es natural preguntarse si tales nuevas soluciones distribucionales existen para todas las ecuaciones diferenciales (si la respuesta es sí, nos quedaría la desagradable sensación que entonces tendríamos que rehacer completamente la teoría de ecuaciones diferenciales lineales). Afortunadamente, la respuesta es no. En efecto, las soluciones distribucionales de las ecuaciones diferenciales clásicas sólo surgen cuando el coeficiente "lider", $a_0(x)$, se anula, y las soluciones tienen singularidades en los ceros de $a_0(x)$. La teoría elemental de ecuaciones lineales, y la mayoría de sus aplicaciones, tienen que ver con ecuaciones cuyos respectivos coeficientes $a_0(x)$ no se anulan, lo que asegura que las únicas soluciones son las clásicas. En este caso, la teoría de distribuciones no añade nada nuevo.

Anexo: Definición 3.1: Una función $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ se dice que es n veces continuamente diferenciable si sus primeras n derivadas existen y son continuas. La función f se dice que es suave o infinitamente diferenciable si sus derivadas de todos los órdenes existen y son continuas.

[Referencia 3.1] D. H. Griffel, Applied Functional Analysis (Dover, New York, 2002), p. 39 (El texto de este problema fue tomado, en buena parte, de esta excelente referencia).

4°) Como usted sabe, si dos (o más) soluciones diferentes de la ecuación de autovectores $(\hat{A}\psi)(x) = a\psi(x)$ tienen el mismo autovalor, estos estados se dice que están degenerados. Considere el Hamiltoniano de Schrödinger en una dimensión espacial

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x). \tag{4.1}$$

Si dos soluciones diferentes de la ecuación (independiente del tiempo) de Schrödinger $(\hat{H}\psi)(x) = E\psi(x)$ tienen la misma energía E, estos estados están degenerados. Por ejemplo, los estados para la partícula libre ($V(x) = 0$) están doblemente degenerados. (a) ¡Demuéstrelo! Surge ahora la siguiente pregunta ¿habrán soluciones degeneradas normalizables en una dimensión espacial? (b) Pruebe el siguiente teorema: "En una dimensión no hay estados ligados degenerados". Ayuda: Suponga que hay dos soluciones, ψ_1 y ψ_2, con la misma energía E. Multiplique por ψ_2 a la ecuación de Schrödinger para ψ_1, y por ψ_1 a la ecuación de Schrödinger para ψ_2, réstelas y muestre que hay un término que se mantiene constante. (c) Le pregunto ¿es esto siempre así en la mecánica cuántica unidimensional? Si su respuesta es no ¿puede dar algún ejemplo que ilustre su respuesta?

5°) Como se demostró en clase, la delta de Dirac puede escribirse así:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}k\, \exp(\mathrm{i}kx). \tag{5.1}$$

En este problema intentaremos otra demostración de (5.1). (a) Defina la siguiente función de x y demuestre que es real:

$$F(x) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}k\, \exp(\mathrm{i}kx). \tag{5.2}$$

(b) Integre a $F(x)$ desde $x = -A$ hasta $x = +B$, donde $A > 0$ y $B > 0$ y obtenga el siguiente resultado preliminar:

$$\int_{-A}^{+B} \mathrm{d}x\, F(x) = \int_{-A}^{+B}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}k\, \mathrm{d}x\, \cos(kx) = \lim_{\alpha\to\infty}\lim_{\beta\to\infty}\int_{-A}^{+B}\int_{-\alpha}^{+\beta} \mathrm{d}k\, \mathrm{d}x\, \cos(kx), \tag{5.3}$$

donde $\alpha > 0$ y $\beta > 0$. Ahora resuelva la integral en k y obtenga el resultado que sigue:

$$\int_{-A}^{+B} \mathrm{d}x\, F(x) = \lim_{\beta\to\infty}\int_{-A}^{+B} \mathrm{d}x\, \frac{\sin(\beta x)}{x} + \lim_{\alpha\to\infty}\int_{-A}^{+B} \mathrm{d}x\, \frac{\sin(\alpha x)}{x}. \tag{5.4}$$

(c) Haga el cambio $u = \beta x$ en la primera integral y $u = \alpha x$ en la segunda integral, entonces los límites pasan a ser $-\beta A$ a βB y $-\alpha A$ a αB, respectivamente. Compruebe que se obtiene el siguiente resultado:

$$\int_{-A}^{+B} \mathrm{d}x\, F(x) = 2\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}u\, \frac{\sin(u)}{u} = 2\pi. \tag{5.5}$$

Note que este resultado es independiente de los valores de A y B mientras $A > 0$ y $B > 0$. Ya que A y B pueden hacerse tan pequeños como queramos, toda contribución al valor de la integral debe provenir del punto $x = 0$ y ya que A y B son arbitrarios, todos los puntos $x \neq 0$ no deben tener ninguna

contribución a la integral, por lo tanto

$$F(x) = 2\pi\delta(x) \tag{5.6}$$

¿Que le pareció el método?

6°) (a) Demuestre que la integral de normalización

$$\|\psi\|^2 \equiv \int_{\mathbb{R}^3} \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}\, |\psi(\boldsymbol{r})|^2 \tag{6.1}$$

existe, solo si, para grandes distancias ($r \to \infty$) la solución ψ tiende a cero al menos como

$$\psi \propto r^{-\frac{3}{2}-\epsilon}, \tag{6.2}$$

donde $\epsilon > 0$. (b) Encuentre un resultado similar, pero no igual, para la integral de normalización en $\mathbb{R}^2$,

$$\|\psi\|^2 \equiv \int_{\mathbb{R}^2} \mathrm{d}^2\boldsymbol{r}\, |\psi(\boldsymbol{r})|^2 \,. \tag{6.3}$$

(c) Encuentre un resultado similar, pero no igual, para la integral de normalización en $\mathbb{R}^1$,

$$\|\psi\|^2 \equiv \int_{\mathbb{R}^1} \mathrm{d}^1 x\, |\psi(x)|^2 \,. \tag{6.4}$$

7°) (a) Encuentre la transformada de Fourier de la función signo $\mathrm{sgn}(x)$. (b) Deduzca la transformada de Fourier de la función de Heaviside $\Theta(x)$ a partir del resultado obtenido en (a). Ayuda: recuerde que $\mathrm{sgn}(x) = 2\Theta(x) - 1$. (c) Deduzca la transformada de Fourier de $x\Theta(x)$ a partir de la de $\Theta(x)$.

8°) Siendo $f(x)$ y su transformada de Fourier $\mathcal{TF}[f] \equiv g(u)$,

$$f(x) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}u\, \exp\left(\mathrm{i}\frac{ux}{\hbar}\right) g(u)\,, \quad g(u) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, \exp\left(-\mathrm{i}\frac{ux}{\hbar}\right) f(x). \tag{8.1}$$

(a) Demuestre que

$$f(x) = (2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}} g(\hat{p})\delta(x)\,, \quad g(p) = (2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}} f(\hat{x})\delta(p), \tag{8.2}$$

donde

$$g(\hat{p}) = g\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right) \quad \text{y} \quad f(\hat{x}) = f\left(-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\right) \tag{8.3}$$

son operadores (y actúan sobre lo que tienen a su derecha), y también

$$\delta(x) = \delta(-x) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p\, \exp\left(\mathrm{i}\frac{px}{\hbar}\right). \tag{8.4}$$

(b) A partir de (8.1)-(8.4), demuestre que

$$\frac{1}{2\pi\hbar} = \delta(\hat{p})\delta(x) \quad \text{y} \quad \frac{1}{2\pi\hbar} = \delta(\hat{x})\delta(p). \tag{8.5}$$

Este es, sin duda, un resultado muy bonito. Si le gusta el tema le recomiendo consultar la siguiente referencia: A. Kempf, D. M. Jackson and A. H. Morales, New Dirac delta function based methods with

applications to perturbative expansions in quantum field theory, J. Phys. A: Math. Theor. **47** (2014) 415204.

Notas sobre la transformada de Fourier de una función: como usted sabe, si $f(x)$ es una función (real o compleja) de la variable x, su transformada de Fourier, si esta existe, es la función

$$g(u) \equiv \mathcal{TF}[f] = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \, \exp(-\mathrm{i}\,\alpha u\, x) f(x), \tag{N.1}$$

donde α es una constante que se fija una vez (por ejemplo, en la mecánica cuántica es común escribir $\alpha = 1/\hbar$). Con la condición que ciertas condiciones de convergencia se satisfagan, $f(x)$ se deduce de $g(u)$ por medio de la transformación de Fourier inversa

$$f(x) \equiv (\mathcal{TF})^{-1}[g] = \left(\frac{\alpha}{2\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}u \, \exp(\mathrm{i}\,\alpha x\, u) g(u). \tag{N.2}$$

Dicho esto, un resultado que todo físico debe saber es el siguiente: cualquier función $f(x)$ absolutamente integrable (ver nota al final, justo antes de las preguntas del ejercicio), es decir, cualquier función que satisface la condición

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \, |f(x)| < \infty, \tag{N.3}$$

tiene una transformada de Fourier $g(u) \equiv \mathcal{TF}[f]$. Por otro lado, la transformada de Fourier satisface las siguientes propiedades: (*i*) Es continua. (*ii*) Es acotada:

$$|\, g(u)| \leq \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \, |f(x)| < \infty, \tag{N.4}$$

para cualquier u. (*iii*) Tiende a cero en el infinito:

$$g(u) \underset{|u|\to\infty}{\longrightarrow} 0. \tag{N.5}$$

Además: (*iv*) Si $f(x)$ es N veces continuamente diferenciable, y si sus N derivadas son integrables, entonces

$$\mathcal{TF}[f^{(N)}] = (\mathrm{i}\alpha u)^N g(u). \tag{N.6}$$

(*v*) Si $x^N f(x)$ es integrable, entonces $g(u)$ es N veces continuamente diferenciable, y además

$$g^{(N)}(u) = \mathcal{TF}[(-\mathrm{i}\alpha x)^N f(x)]. \tag{N.7}$$

Por cierto, las propiedades de la transformación $(\mathcal{TF})^{-1}$ se pueden deducir de las anteriores cambiando i por $-\mathrm{i}$ en todas las fórmulas. Nota: si una función es absolutamente integrable, entonces es integrable, es decir,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \, f(x) < \infty \tag{N.8}$$

(lo contrario no siempre es verdad). Si lo desea, puede intentar demostrarlo.

9°) Considere una partícula libre sobre el intervalo $x \in [-a, +a]$. El Hamiltoniano para esta partícula es

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}\cdot\hat{p} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 = \frac{1}{2m}\left(-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}. \tag{9.1}$$

(a) Verifique que $\hat{p}$ es hermítico en el dominio

$$D(\hat{p}) = \{\psi(x) \in C^1 \mid \psi(+a) = -\psi(-a)\}, \tag{9.2}$$

donde C^1 se refiere a las funciones cuya primera derivada es continua.
(b) Demuestre que el conjunto completo de autofunciones normalizadas de $\hat{p}$ viene dado por

$$\psi_n(x) = \sqrt{1/2a}\, \exp\left[\, \mathrm{i}(2n+1)\pi x/2a \,\right], \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \tag{9.3}$$

con los autovalores $p_n = \pi\hbar(2n+1)/2a$ ¿Están degenerados los autovalores de $\hat{p}$?
(c) Verifique que las autofunciones $\psi_n(x)$ satisfacen las siguientes relaciones

$$\psi_n(x) = \psi_{-(n+1)}(-x)\,, \quad \psi_n^*(x) = \psi_{-(n+1)}(x), \tag{9.4}$$

donde el asterisco sobre ψ corresponde a la conjugación compleja.
(d) Siendo $\hat{\pi}$ el operador paridad ($(\hat{\pi}\chi)(x) = \chi(-x)$) y $\hat{T}$ el operador inversión temporal ($(\hat{T}\chi)(x) = \chi^*(x)$), use las relaciones (9.4) para escribir la acción de $\hat{\pi}$ y $\hat{T}$ sobre las autofunciones de $\hat{p}$.
(e) Calcule la acción de $\hat{H}$ sobre $\psi_n(x)$ y $\psi_{-(n+1)}(x)$ ¿Qué puede concluir? ¿Están degenerados los autovalores de la energía?
(f) Verifique que los operadores $\hat{H}$, $\hat{\pi}$ y $\hat{T}$ conmutan. Ayuda: vea la acción de estos operadores sobre una función arbitraria.
(g) Compruebe ahora que las autofunciones de $\hat{H}$ correspondientes al estado base *no* son autofunciones ni de $\hat{\pi}$ ni de $\hat{T}$ (a pesar del resultado mencionado en (f)). Nota: de esta manera, podemos decir que las simetrías de paridad y de inversión temporal están espontáneamente rotas. Sin embargo, estas simetrías se pueden restaurar.
(h) Defina los siguientes estados

$$\phi_n(x) \equiv \sqrt{1/2}\,[\,\psi_n(x) + \psi_{-(n+1)}(x)\,]\,, \quad \chi_n(x) \equiv \sqrt{1/2}\,[\,-\psi_n(x) + \psi_{-(n+1)}(x)\,]. \tag{9.5}$$

Verifique que las autofunciones en (9.5) (incluyendo las correspondientes al estado base) son autoestados comunes a los tres operadores $\hat{H}$, $\hat{\pi}$ y $\hat{T}$. De esta forma, la paridad y la inversión temporal ya no son simetrías rotas (las hemos restaurado al considerar las autofunciones en (9.5)); sin embargo, ahora veremos que en este proceso ha sido rota otra importante simetría.
(i) Verifique que a pesar que los operadores $\hat{p}$ y $\hat{H}$ conmutan, los autoestados de $\hat{H}$ en (9.5) (incluyendo los correspondientes al estado base) ya no son autoestados del operador momentum. Es decir, la simetría traslacional ha sido espontáneamente rota. Nota final: suponga que uno tiene un operador $\hat{A}$ que corresponde a alguna operación de simetría y que conmuta con el Hamiltoniano del sistema. Si además el estado base de $\hat{H}$ también es autoestado de $\hat{A}$, entonces $\hat{A}$ genera una simetría del sistema. Inversamente, una operación de simetría correspondiente a $\hat{A}$ se considera espontáneamente rota, si el estado base no es un autoestado de $\hat{A}$. Este es, sin duda, un problema muy interesante. Si le gusta el tema le recomiendo consultar la siguiente referencia: A. Z. Capri, Self-adjointness and spontaneously broken symmetry, Am. J. Phys. **45** (1977) 823.