Universidad Central de Venezuela
Facultad de Ciencias
Escuela de Física

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

Tarea 7
Aplicando los postulados de la mecánica cuántica
http://fisica.ciens.ucv.ve/~svincenz/mc_t7.pdf

1°) Consideremos la forma polar de la función de onda $\Psi = \Psi(x,t)$ (esta es la llamada substitución de Madelung-de Broglie):

$$\Psi(x,t) = R(x,t)\exp\left(\mathrm{i}\frac{S(x,t)}{\hbar}\right), \tag{1.1}$$

donde $R = R(x,t)$ y $S = S(x,t)$ son funciones reales. (a) Inserte la expresión (1.1) en la ecuación de Schrödinger

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t), \tag{1.2}$$

y obtenga las siguientes dos ecuaciones:

$$\frac{\partial}{\partial t}S(x,t) + \frac{1}{2\mathrm{m}}\left(\frac{\partial}{\partial x}S(x,t)\right)^2 + Q(x,t) + V(x) = 0, \tag{1.3}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(R(x,t)\right)^2 + \frac{1}{\mathrm{m}}\frac{\partial}{\partial x}\left(\left(R(x,t)\right)^2\frac{\partial}{\partial x}S(x,t)\right) = 0, \tag{1.4}$$

donde $Q = Q(x,t)$ es el llamado potencial cuántico de Bohm

$$Q \equiv -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}}\frac{1}{R(x,t)}\frac{\partial^2}{\partial x^2}R(x,t). \tag{1.5}$$

Las ecuaciones (1.3) y (1.4) son (esencialmente) equivalentes a la ecuación de Schrödinger. (b) la ecuación (1.3) es llamada la ecuación de Hamilton-Jacobi cuántica. Nótese que en el límite clásico ($\hbar \to 0$), la función $S(x,t)$ se convierte en la acción para la ecuación de Hamilton-Jacobi clásica. Identifique a la ecuación (1.4) ¿Qué ecuación es? (c) Ayuda: verifique que la densidad de probabilidad $\rho(x,t)$, así como la densidad de corriente de probabilidad $j(x,t)$ son respectivamente dadas por

$$\rho(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 = \left(R(x,t)\right)^2, \tag{1.6}$$

$$j(x,t) = \frac{1}{\mathrm{m}}\left(R(x,t)\right)^2\frac{\partial}{\partial x}S(x,t). \tag{1.7}$$

2°) Considere un solenoide infinitamente largo y delgado, perpendicular al eje $x-y$. Como usted sabe, bajo condiciones idealizadas, el campo magnético esta confinado enteramente al interior del solenoide y

se anula fuera de este. Sin embargo, ya que el potencial vector $\mathbf{A}$ se relaciona con el campo magnético por $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, este no puede anularse en todas partes fuera del solenoide. En efecto, la integral de línea de $\mathbf{A}$ a lo largo de una curva que rodee el solenoide es igual al flujo Φ en el solenoide:

$$\oint_{\text{camino}} \mathbf{A} \cdot \mathrm{d}\mathbf{r} = \int_{\text{superficie}} (\nabla \times \mathbf{A}) \cdot \mathrm{d}\mathbf{S} = \Phi. \tag{2.1}$$

(a) Suponga que las componentes de $\mathbf{A}$ en coordenadas cilíndricas vienen dadas por

$$A_r = 0,\ A_\phi = \Phi \frac{g(\phi)}{r},\ A_z = 0, \tag{2.2}$$

donde $g(\phi)$ es una función arbitraria de ϕ. Demuestre a partir de la relación (2.1) que la función $g(\phi)$ debe además satisfacer la relación

$$\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi\, g(\phi) = 1. \tag{2.3}$$

(b) Verifique que el campo magnético $\mathbf{B}$ es nulo en todas partes, excepto en $r = 0$.

Si ahora colocamos a una partícula en un ancho tubo circular de radio $r = a$ alrededor del origen, la partícula (de masa m) esta obligada a moverse sobre un círculo. La Hamiltoniana del sistema clásico viene dada por

$$H = \frac{1}{2}\mathrm{m}(a\dot{\phi})^2. \tag{2.4}$$

(c) El momentum generalizado correspondiente a la coordenada $a\phi$ es la componente tangencial del momentum

$$p_\phi = \mathrm{m}\, a\dot{\phi} + QA_\phi, \tag{2.5}$$

donde Q es la carga de la partícula. Por lo tanto,

$$H = \frac{1}{2\mathrm{m}}(p_\phi - QA_\phi)^2 \tag{2.6}$$

¡Compruébelo!

En la mecánica cuántica, el operador Hamiltoniano obviamente viene dado por

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mathrm{m}}(\hat{p}_\phi - QA_\phi)^2 = \frac{1}{2\mathrm{m}}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}a}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\phi} - QA_\phi\right)^2 \tag{2.7}$$

(donde A_ϕ esta evaluado en $r = a$), y por lo tanto, la ecuación de Schrödinger (independiente del tiempo) es

$$\frac{1}{2\mathrm{m}}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}a}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\phi} - QA_\phi\right)^2 \psi(\phi) = E\psi(\phi). \tag{2.8}$$

Es decir,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}a^2}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\phi} - \frac{\mathrm{i}Q}{\hbar}\Phi g(\phi)\right]^2 \psi(\phi) = E\psi(\phi). \tag{2.9}$$

(d) Demuestre que esta última ecuación la resuelve la función

$$\psi = \psi(\phi) = \text{const} \cdot \exp\left[\mathrm{i}\,\mu\phi + \mathrm{i}\,\frac{Q}{\hbar}\Phi \int_0^\phi \mathrm{d}y\, g(y)\right], \tag{2.10}$$

con el autovalor de la energía

$$E = \frac{\hbar^2 \mu^2}{2\mathrm{m}a^2}. \tag{2.11}$$

(e) Si se invoca la condición de frontera periódica (o más apropiadamente, "the single-valuedness condition")

$$\psi(0) = \psi(2\pi), \tag{2.12}$$

se obtiene de (2.10) la relación

$$2\pi\mu + \frac{Q}{\hbar}\Phi \int_0^{2\pi} \mathrm{d}y\, g(y) = 2\pi n, \tag{2.13}$$

donde n debe ser un entero ¡Compruébelo! (f) Finalmente, demuestre que la función de onda puede ser escrita como

$$\psi = \psi(\phi) = \mathrm{const} \cdot \exp\left\{ \mathrm{i}\, n\phi + \mathrm{i}\, \frac{Q}{\hbar}\Phi \left[\int_0^{\phi} \mathrm{d}y\, g(y) - \frac{\phi}{2\pi} \right] \right\}, \tag{2.14}$$

y los autovalores de la energía son

$$E = \frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}a^2} \left(n - \frac{Q\Phi}{2\pi\hbar} \right)^2. \tag{2.15}$$

3°) Suponga que se desea encontrar la energía para el estado base del oscilador armónico unidimensional. El Hamiltoniano del sistema es

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mathrm{m}} \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}\mathrm{m}\omega^2 x^2. \tag{3.1}$$

Escoja una función de onda gaussiana como función de prueba,

$$\psi(x) = A \exp(-bx^2), \tag{3.2}$$

donde b es una constante y A se determina de la condición de normalización $\|\psi\| = 1$. (a) Determine A y luego el valor medio de $\hat{H}$ en el estado ψ. Aquí tiene los resultados:

$$A = \left(\frac{2b}{\pi} \right)^{1/4}, \qquad \langle \hat{H} \rangle = \frac{\hbar^2 b}{2\mathrm{m}} + \frac{\mathrm{m}\omega^2}{8b}. \tag{3.3}$$

(b) Minimice $\langle \hat{H} \rangle$ con respecto a b y obtenga $\langle \hat{H} \rangle_{\text{mín}}$ ¿Qué puede concluir?

4°) Deseamos encontrar la energía para el estado base correspondiente al potencial delta de Dirac:

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

(a) Use la misma función de prueba del problema anterior (Ec. (4.2)) y obtenga $\langle \hat{H} \rangle_{\text{mín}}$. Aquí tiene la respuesta:

$$\langle \hat{H} \rangle_{\text{mín}} = -\frac{\mathrm{m}g^2}{\pi\hbar^2}. \tag{4.2}$$

Compare su resultado con la energía para el único estado ligado que posee el Hamiltoniano $\hat{H}$.

5°) Compruebe que las matrices de Pauli satisfacen las siguientes relaciones: (a) $\det(\hat{\sigma}_j) = -1$ y $\mathrm{Tr}(\hat{\sigma}_j) = 0$, con $j = 1, 2, 3$ (o bien x, y, z). (b) $\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \hat{1}$. (c) $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y = -\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_x = \mathrm{i}\hat{\sigma}_z$. (d) Las relaciones en (b) y (c) se pueden condensar en la forma

$$\hat{\sigma}_j\hat{\sigma}_k = \delta_{jk}\mathbf{1} + \mathrm{i}\sum_l \epsilon_{jkl}\hat{\sigma}_l, \tag{5.1}$$

donde ϵ_{jkl} es el símbolo de Levi-Civita, el cual tiene los valores: $+1$ si $jkl = 123$, 231 o 312; -1 si $jkl = 132$, 213 o 321; 0 en cualquier otro caso ¡Demuestre esta relación! (e) $\hat{\sigma}_x\hat{\sigma}_y\hat{\sigma}_z = \mathrm{i}\hat{1}$. (f) Mencionemos también una identidad que, en ocasiones, es muy útil en la mecánica cuántica. Si $\boldsymbol{A}$ y $\boldsymbol{B}$ representan vectores cuyas componentes son operadores que conmutan con todos los operadores que actúan en el espacio de estados de espín de dimensión dos, entonces

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\boldsymbol{A}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\boldsymbol{B}}) = \hat{\boldsymbol{A}} \cdot \hat{\boldsymbol{B}} + \mathrm{i}\,\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot (\hat{\boldsymbol{A}} \times \hat{\boldsymbol{B}}) \tag{5.2}$$

¡Verifique esta relación! (g) En la mecánica cuántica no-relativista -en el sistema internacional (SI)- se toma en cuenta la interacción entre el momento magnético del espín del electrón con el campo magnético $\boldsymbol{B}$ añadiendo al Hamiltoniano usual el término

$$\hat{H}_s = -\frac{e}{\mathrm{m}}\frac{\hbar}{2}\,\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \boldsymbol{B} \tag{5.3}$$

como fue hecho originalmente por W. Pauli (para un electrón $e = -1,6 \times 10^{-19}$ C). Este procedimiento parece algo artificial, sobretodo si uno está de acuerdo con quienes dicen que las interacciones fundamentales son aquellas que se generan con la sustitución (relativista) $p_\mu \to p_\mu - eA_\mu$. Existe, sin embargo, una forma ligeramente *ad hoc* de introducir la interacción debida al momento magnético del espín. En el tratamiento usual para el electrón, el operador energía cinética en ausencia de un potencial vector es

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mathrm{m}}\hat{\boldsymbol{p}}^2. \tag{5.4}$$

Sin embargo, para una partícula de espín $1/2$ pudimos haber arrancado con la expresión

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mathrm{m}}(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\boldsymbol{p}})(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}). \tag{5.5}$$

Demuestre, usando la relación que demostró en (f), que esta última forma es indistinguible de la primera cuando no hay potencial vector. (h) Cuando existe un potencial vector $\boldsymbol{A}$ debemos hacer la sustitución $\hat{\boldsymbol{p}} \to \hat{\boldsymbol{p}} - e\boldsymbol{A}$ en el último operador. Demuestre que

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mathrm{m}}(\hat{\boldsymbol{p}} - e\boldsymbol{A})^2 - \frac{e}{\mathrm{m}}\frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \boldsymbol{B}. \tag{5.6}$$

Ayuda: No olvide que el operador $\hat{\boldsymbol{p}}$ actúa sobre todo lo que está a la derecha. Tenga cuidado. Comentario final: El momento magnético de espín generado con este procedimiento tiene la razón giromagnética $\gamma \equiv e/\mathrm{m} = eg/2\mathrm{m}$, donde $g = 2$. Históricamente todo esto fue obtenido por primera vez trabajando el límite no-relativista de la teoría de Dirac. Por esta razón, la mayoría de los libros de texto dicen que $g = 2$ se obtiene naturalmente a partir de la teoría de Schrödinger-Pauli si arrancamos con el operador energía cinética. Este punto fue particularmente enfatizado por R. Feynman.

6°) Suponga que uno tiene inicialmente una función de onda "espinorial" que es autovector de $\hat{S}_x$ con autovalor $+\hbar/2$, es decir, suponga que uno sabe que el espín apunta a lo largo de la dirección x;

esto corresponde al estado

$$|+\rangle_x(0) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{6.1}$$

(a) Demuestre que si se aplica un campo magnético uniforme en la dirección z, la evolución temporal de este espinor viene dada por

$$|+\rangle_x(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \exp(\mathrm{i}\,\omega t) \\ \exp(-\mathrm{i}\,\omega t) \end{pmatrix}. \tag{6.2}$$

(b) ¿Quien es ω? Ayudas: recuerde que el vector momento magnético para una partícula de espín $1/2$ puede ser escrito así $\hat{\boldsymbol{M}} = \gamma\hat{\boldsymbol{S}} = (eg/2\mathrm{m})\hat{\boldsymbol{S}}$, donde $g = 2$ para el electrón. La interacción entre el momento magnético del espín con el campo magnético externo $\boldsymbol{B}$ es entonces

$$\hat{H}_s = -\hat{\boldsymbol{M}}\cdot\boldsymbol{B} = -\frac{eg}{2\mathrm{m}}\frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}}\cdot\boldsymbol{B}. \tag{6.3}$$

La ecuación de movimiento para el espinor $|+\rangle_x$ es simplemente la ecuación

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|+\rangle_x = \hat{H}_s|+\rangle_x. \tag{6.4}$$

(c) Calcule los valores medios de $\hat{S}_x$ y de $\hat{S}_y$ en el estado $|+\rangle_x(t)$ ¿Qué puede concluir?

7°) Construya las matrices de espín ($\hat{S}_x$, $\hat{S}_y$ y $\hat{S}_z$) para una partícula de espín 1. Ayuda: ¿Cuantos autoestados de $\hat{S}_z$ hay? Determine la acción de $\hat{S}_z$, $\hat{S}_+$ y $\hat{S}_-$ sobre cada uno de estos estados. Siga el procedimiento que usamos en clase para la partícula de espín $1/2$.

8°) (a) Compruebe que las matrices de Pauli verifican la siguiente relación: $\mathrm{Tr}(\hat{\sigma}_i\hat{\sigma}_j) = 2\delta_{ij}$, donde $i,\ j = 1,2,3$ (o bien $i,\ j = x,y,z$). (b) Si vemos la matriz identidad $\hat{1}$ como la matriz "cero" de Pauli ($\hat{1} \equiv \hat{\sigma}_0$), podemos escribir la siguiente relación: $\mathrm{Tr}(\hat{\sigma}_\alpha\hat{\sigma}_\beta) = 2\delta_{\alpha\beta}$, donde $\alpha,\ \beta = 0,1,2,3$. Verifique también esta relación. (c) Ya que cualquier matriz $\hat{M}$, 2×2, tiene solo cuatro grados de libertad independientes (complejos), ésta podría ser escrita así:

$$\hat{M} = \sum_{\alpha=0}^{3} m_\alpha\hat{\sigma}_\alpha. \tag{8.1}$$

Para encontrar a los cuatro coeficientes (complejos) m_β, multiplique la expresión (8.1) por $\hat{\sigma}_\beta$ y tome la traza ¿Que encontró? Ayuda: aquí tiene la respuesta, pero usted lo debe demostrar

$$m_\alpha = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}(\hat{M}\hat{\sigma}_\alpha). \tag{8.2}$$

(d) Exprese la siguiente matriz $\hat{M}$ en términos de la matrices de Pauli

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}. \tag{8.3}$$

Ayuda: use la fórmula (8.2) para encontrar los coeficientes m_α que están en la expresión (8.1). Nota: recuerde que $\alpha = 0,1,2,3$.

9°) (a) Se tiene una partícula de masa m en el potencial para el oscilador armónico unidimensional $V(x) = \mathrm{m}\omega^2 x^2/2$. Escriba la solución más general para la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, $\Psi(x,t)$, en términos de los autoestados para el oscilador armónico $\psi_n(x)$. (b) Use la solución que obtuvo en (a) para demostrar que el valor medio del operador $\hat{x}$, considerado como una función del tiempo, puede escribirse como $A\cos(\omega t) + B\sin(\omega t)$, donde A y B son constantes.

10°) En el estado base del oscilador armónico: (a) ¿Cual es la probabilidad de encontrar la partícula fuera de la región clásicamente permitida? (b) ¿Cual es toda esa región? (c) Haga un dibujo mostrando esa región y explique por qué es clásicamente no permitida. Le será útil saber el siguiente resultado: La función error ($\mathrm{erf}(x)$) se define así:

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \mathrm{d}u \, \exp(-u^2) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{+\infty} \mathrm{d}u \, \exp(-u^2), \tag{10.1}$$

en particular:

$$\int_0^1 \mathrm{d}u \, \exp(-u^2) = 0,84270 \frac{\sqrt{\pi}}{2}. \tag{10.2}$$

11°) (a) A partir de los elementos de matriz $\langle n \mid \hat{P}^2 \mid m \rangle$ y $\langle n \mid \hat{X}^2 \mid m \rangle$, muestre que solo los elementos $H_{n,n}$ del Hamiltoniano para el oscilador armónico son distintos de cero ¿Tienen el valor que usted esperaba? (b) Evalúe $X_{n,n}$ y $P_{n,n}$ y luego muestre que el conmutador $[\hat{X}, \hat{P}] = \mathrm{i}\hbar$ es válido como una ecuación matricial.

12°) En el tiempo $t = 0$ una partícula en el potencial $V(x) = \mathrm{m}\omega^2 x^2/2$ viene descrita por la siguiente función de onda

$$\Psi(x,0) = A \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \right)^n \psi_n(x), \tag{12.1}$$

donde $\psi_n(x)$ son autoestados ortonormales de la energía con autovalores $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$. (a) Encuentre la constante de normalización A. (b) Encuentre una expresión para $\Psi(x,t)$ en $t > 0$. (c) Demuestre que $|\Psi(x,t)|^2$ es una función periodica del tiempo e indique cual es el máximo periodo τ. (d) Encuentre el valor medio de la energía en $t = 0$. Nota: De una respuesta concreta a cada una de las preguntas. El siguiente resultado podría serle útil al resolver la parte (d):

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{x^n} = \frac{x}{x-1}. \tag{12.2}$$

13°) De lo aprendido en clase, usted podrá comprobar que el Hamiltoniano para un oscilador armónico se puede escribir en forma adimensional ($\mathrm{m} = \hbar = \omega = 1$) como

$$\hat{H} = \hat{A}^\dagger \hat{A} + \frac{1}{2}, \tag{13.1}$$

donde $\hat{A} = (\hat{x} + \mathrm{i}\hat{p})/\sqrt{2}$. Una autofunción (no normalizada) de $\hat{H}$ es:

$$\psi_a(x) = \left(2x^3 - 3x\right) \exp\left(-\frac{1}{2}x^2\right). \tag{13.2}$$

(a) ¿Cual es esta autofunción? (b) Encuentre las dos autofunciones (no normalizadas) que están más

cerca en energía a $\psi_a(x)$ (es decir, la que sigue a $\psi_a(x)$ y la que precede a $\psi_a(x)$). Ayuda: las siguientes relaciones (demostradas en clase) le serán de utilidad:

$$\hat{A}\psi_n(x) = \sqrt{n}\,\psi_{n-1}(x)\,, \quad \hat{A}^\dagger\psi_n(x) = \sqrt{n+1}\,\psi_{n+1}(x). \tag{13.3}$$