Universidad Central de Venezuela
Facultad de Ciencias
Escuela de Física

Mecánica Cuántica (2431)
`http://fisica.ciens.ucv.ve/~svincenz/mecanicacuantica.html`

Tarea 6
Las herramientas matemáticas de la Mecánica Cuántica
Los postulados de la Mecánica Cuántica
`http://fisica.ciens.ucv.ve/~svincenz/mecanicacuantica(t6).pdf`

1°) El llamado método de factorización fué introducido por Schrödinger en 1940 y esencialmente consiste en factorizar operadores de segundo orden. Por supuesto que este método puede también usarse para resolver la ecuación de Schrödinger y determinar los autovalores de la energía en sistemas cuánticos. Como usted sabe, en una dimensión esta ecuación se escribe así

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x), \tag{1.1}$$

donde $V(x)$ es el potencial, $\psi(x)$ es la autofunción y E el autovalor de la energía. A partir de aquí consideraremos por simplicidad que $\hbar = 2m = 1$. La ecuación (1.1) también se puede escribir como

$$(\hat{H}\psi)(x) = E\psi(x). \tag{1.2}$$

Cuando se usa el método de factorización para obtener soluciones de la ecuación de Schrödinger, el Hamiltoniano $\hat{H}$ en (1.2) se sustituye por una combinación de dos operadores de primer orden. De esta forma, dado un operador diferencial de segundo orden, el objetivo del método es encontrar dos operadores

$$\hat{A} = \frac{d}{dx} + \beta(x) \qquad \text{y} \qquad \hat{A}^\dagger = -\frac{d}{dx} + \beta(x) \tag{1.3}$$

(con $\beta(x) \in \mathbb{R}$), tales que el Hamiltoniano pueda ser escrito como

$$\hat{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) = \hat{A}^\dagger \hat{A} + E. \tag{1.4}$$

(a) Sustituya los operadores dados en (1.3) en la ecuación (1.4) y obtenga la ecuación diferencial que debe satisfacer la función $\beta(x)$. Aquí tiene la respuesta:

$$-\frac{d}{dx}\beta(x) + \beta^2(x) + E = V(x). \tag{1.5}$$

Esta ecuación es la famosa ecuación de Ricatti. (b) Una vez encontrada la solución $\beta(x)$ de la ecuación (1.5), uno puede encontrar las autofunciones a partir de la ecuación $(\hat{A}\psi)(x) = 0$ ¿Por qué? Ayuda: las autofunciones $\psi(x)$ en función de $\beta(x)$ se obtienen a partir de la relación

$$\psi(x) \propto \exp\left(-\int^x dy\, \beta(y)\right). \tag{1.6}$$

(c) Demuestre el resultado (1.6). (d) Considere el potencial de pozo cuadrado finito

$$V(x) = V_0\left(\Theta\left(-x - \frac{a}{2}\right) + \Theta\left(x - \frac{a}{2}\right)\right), \tag{1.7}$$

donde $\Theta(x)$ es la función salto de Heaviside ($\Theta(x > 0) = 1$ y $\Theta(x < 0) = 0$). Suponga que cada autofunción $\psi(x)$ y su primera derivada $\psi'(x)$ son continuas en $x = a/2$ y $x = -a/2$ (esto también es cierto para la función $\beta(x)$). Además, cada autofunción es normalizable, por lo que se satisface la condición $\lim_{x\to\pm\infty} \psi(x) = 0$. Siga el procedimiento que se explicó en (b) y encuentre la $\psi(x)$ para este problema en las regiones externas al pozo: $x \geq a/2$ y $x \leq -a/2$ y luego dentro del pozo $-a/2 < x < a/2$. (e) Identifique las expresiones para E en las regiones externas al pozo y en el interior del pozo e iguale estas expresiones (esto es obvio). Despeje la constante arbitraria (la que tenga) luego de esta igualación. Ahora podrá escribir las autofunciones, las de paridad par y aquellas de paridad impar, y sus correspondientes autovalores (Si le interesó el problema, le recomiendo consultar la referencia: G. B. Freitas, R. G. Veigas y E. Drigo Filho, Rev. Bras. Ens. de Fis. **32**, 1502 (2010)). Nota sobre la ecuación de Ricatti: la ecuación de Ricatti tiene la forma

$$y'(x) + p(x)(y(x))^2 + q(x)y(x) + r(x) = 0, \tag{1.8}$$

que es de orden uno y no lineal. Suponiendo que se tiene una solución particular $y_p(x)$ de (1.8), la solución general se encuentra usando el cambio

$$y(x) = y_p(x) + (u(x))^{-1}, \tag{1.9}$$

mediante el cual la ecuación se transforma en una lineal de orden uno. Ejemplo: sea la ecuación $y' + y^2 + 3y + 2 = 0$, en este caso una solución particular es claramente cualquier solución de la ecuación polinómica $x^2 + 3x + 2 = 0$, es decir, $y_p = -1$ o bien $y_p = -2$. Escogiendo $y_p = -1$ se tiene que el cambio (1.9) es $y = -1 + u^{-1}$. Sustituyendo este cambio en la ecuación original se obtiene $u' - u = 1$, cuya solución general es $u(x) = c\exp(x) - 1$ (donde c es una constante arbitraria). Finalmente, la solución de la ecuación de Ricatti es $y(x) = -1 + (c\exp(x) - 1)^{-1}$.

2°) Considere la expansión de un estado $|\psi\rangle$ en la base (continua) de autovectores de algún operador $|w_\alpha\rangle$, donde $-\infty < \alpha < +\infty$,

$$|\psi\rangle = \mathbf{1}\,|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha\ |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha|\,|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\alpha\ \langle\, w_\alpha \mid \psi\rangle\,|w_\alpha\rangle\,. \tag{2.1}$$

Los coeficientes de la expansión (2.1) deben ser de cuadrado integrable. Por ejemplo, si $|w_\alpha\rangle = |x\rangle$, es decir, si consideramos a los autovectores del operador X (que conforman a la llamada representación $|x\rangle$ o representación de la posición) entonces $\langle\, w_\alpha \mid \psi\rangle = \langle\, x \mid \psi\rangle = \psi(x)$ y decimos que $\psi(x)$ *es el estado en la representación de la posición*, además $\psi(x) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$. Nota: la representación de la posición resulta del isomorfismo entre $\mathcal{F} \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ y $\mathcal{E}_x \subset \mathcal{E}$. De la misma forma, los autovectores del operador P son los $|w_\alpha\rangle = |p\rangle$, entonces $\langle\, w_\alpha \mid \psi\rangle = \langle\, p \mid \psi\rangle = \phi(p)$ *es el estado en la representación de los momenta* (por cierto, $\phi(p)$ es la transformada de Fourier de $\psi(x)$). (a) Encuentre los autovectores de X y P en la representación de la posición y en la representación de los momenta. (b) Como otro ejemplo de representación, considere el siguiente operador (que interpola linealmente entre el operador posición y el operador momentum):

$$S = \alpha X + (1 - \alpha)P, \tag{2.2}$$

donde $\alpha \in [0, 1]$ (en la escritura de (2.2) no hemos colocado los factores de escala que permiten que X y P sean adimensionales). Supongamos que los autovectores de S son los $|w_\alpha\rangle = |s\rangle$, entonces $\langle\, w_\alpha \mid \psi\rangle = \langle\, s \mid \psi\rangle = \eta(s)$ *es el estado en esta nueva representación.* Encuentre los autovectores de S en la representación de la posición. Ayuda: para evitar un excesivo uso de los símbolos que involucran a las representaciones, es conveniente escribir el problema de autovectores y autovalores para S así:

$$S\,|\psi_s\rangle = s\,|\psi_s\rangle\,, \tag{2.3}$$

por lo tanto,

$$\langle x|\,S\,|\psi_s\rangle = \langle x|\,\alpha X + (1-\alpha)P\,|\psi_s\rangle = \alpha\,\langle x|\,X\,|\psi_s\rangle + (1-\alpha)\,\langle x|\,P\,|\psi_s\rangle = s\,\langle\, x \mid \psi_s\rangle\,, \tag{2.4}$$

donde (haciendo $\hbar = 1$)

$$\langle x|\,X\,|\psi_s\rangle = x\,\langle\, x \mid \psi_s\rangle = x\,\psi_s(x)\,, \qquad \langle x|\,P\,|\psi_s\rangle = -i\frac{d}{dx}\,\langle\, x \mid \psi_s\rangle = -i\frac{d}{dx}\psi_s(x). \tag{2.5}$$

Sustituyendo estos resultados en la expresión (2.4) se obtiene una ecuación diferencial para las autofunciones de S en la representación de la posición, $\psi_s(x)$:

$$\left[\alpha x - i(1-\alpha)\frac{d}{dx}\right]\psi_s(x) = s\,\psi_s(x). \tag{2.6}$$

Resuelva esta ecuación y obtenga el valor de la constante arbitraria en $\psi_s(x)$ de tal forma que el autovector tienda al límite correcto cuando $\alpha \to 0$ y $\alpha \to 1$ (módulo una fase global). Use algunos de los resultados obtenidos en (a). Aquí tiene la respuesta:

$$\psi_s(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\sqrt{1-\alpha}}\exp\left[i\left(\frac{s^2}{2\alpha} + \frac{\pi}{4}\right)\right]\exp\left[-\frac{i}{2}\frac{\alpha}{1-\alpha}\left(x - \frac{s}{\alpha}\right)^2\right].$$

3°) Considere un pozo de potencial delta de Dirac en movimiento:

$$V(x,t) = -\alpha\delta(x - vt), \tag{3.1}$$

donde $\alpha > 0$ es una constante y v es la velocidad constante del pozo. (a) Verifique que la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo admite la siguiente solución (normalizada)

$$\Psi(x,t) = \frac{\sqrt{m\alpha}}{\hbar}\exp\left(-\frac{m\alpha}{\hbar^2}\,|x - vt|\right)\exp\left\{-\frac{i}{\hbar}\left[\left(E + \frac{1}{2}mv^2\right)t - mvx\right]\right\}, \tag{3.2}$$

donde $E = -m\alpha^2/2\hbar^2$ es la energía del estado ligado para el potencial (3.1) con $v = 0$. (b) Encuentre el valor medio del Hamiltoniano en este estado ¿Esperaba ese resultado? (Tomado de la Ref. [10], pag. 72).

4°) Una partícula de masa m está confinada a la región unidimensional $0 \le x \le a$. En el tiempo $t = 0$ su función de onda normalizada viene dada por

$$\Psi(x,0) = \sqrt{\frac{8}{5a}}\left[1 + \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right]\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right). \tag{4.1}$$

(a) ¿Cual es la función de onda en un tiempo posterior t? (b) ¿Cuál es la energía promedio del sistema en $t = 0$ y en el tiempo t? (c) ¿Cuál es la probabilidad que la partícula se encuentre en el lado izquierdo de la caja (es decir, en la región $0 \le x \le a/2$) en el tiempo t?

5°) Una partícula de masa m se mueve no-relativisticamente en una dimensión en un potencial dado por $V(x) = -a\delta(x)$, donde $\delta(x)$ es la usual delta de Dirac. La partícula está ligada a este potencial. Encuentre el valor de x_0 para que la probabilidad de encontrar a la partícula en la región $|x| < x_0$ sea exactamente igual a 1/2.

6°) 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. (a) Encuentre el Hamiltoniano $\hat{H}$ para este sistema. Ayuda: aquí tiene la respuesta:

$$\hat{H} = \frac{1}{2I_z}\hat{L}_z^2 \tag{6.1}$$

¡Justifique este resultado! Nota: recuerde que $\hat{L}_z = -i\hbar\,\partial/\partial\phi$. (b) Encuentre los autovalores de la energía y las correspondientes autofunciones $\psi(\phi)$. (c) En el tiempo $t = 0$ el rotor es descrito por el paquete de ondas $\Psi(\phi, t = 0) = A\sin^2(\phi)$. Encuentre $\Psi(\phi, t)$ para $t > 0$.

7°) Trataremos de responder la siguiente pregunta: ¿Cuál es el paquete de ondas más general con incertidumbre mínima? Si usted regresa a la demostración (hecha en clase) del principio de incerteza

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle[A, B]\rangle\right)^2 \tag{7.1}$$

notará que en dos oportunidades se usaron desigualdades. Suponga que cada una de estas sea ahora una igualdad ¿Qué nos dice esto acerca de ψ? Veamos: La desigualdad de Schwarz se convierte en una igualdad cuando el ángulo entre los dos vectores es nulo, es decir, cuando uno es un múltiplo del otro: $|g\rangle = c\,|f\rangle$, para algún escalar c. De la misma forma, la otra desigualdad se convierte en una igualdad cuando $\mathrm{Re}(z) = 0$, es decir, si $\mathrm{Re}\,\langle f \mid g\rangle = \mathrm{Re}\,(c\,\langle f \mid f\rangle) = 0$. Pero $\langle f \mid f\rangle$ es evidentemente real, por lo tanto c debe ser imaginario puro. Finalmente, la condición necesaria y suficiente para una mínima incertidumbre es $|g\rangle = ia\,|f\rangle$, donde a es real. (a) Escriba esta última relación para el caso $A \equiv \hat{x}$ y $B \equiv \hat{p}$. (b) Resuelva la ecuación diferencial para $\psi(x)$ obtenida en (a). (c) Explique el resultado obtenido ¿Lo esperaba?

8°) Pruebe el famoso "principio de incerteza de (su nombre)", el cual relaciona la incertidumbre en la posición x con la incertidumbre en la energía $\hat{H} = (\hat{p}^2/2m) + V(x)$:

$$(\Delta\hat{x})(\Delta\hat{H}) \geq \frac{\hbar}{2m}\left|\langle\hat{p}\rangle\right|. \tag{8.1}$$

Para estados estacionarios este resultado no nos dice mucho ¿por qué? (Tomado de la Ref. [10], pag. 110).

9°) Considere un pozo cuadrado infinito de ancho $2L$ con una partícula de masa m moviéndose en su interior ($-L \leq x \leq +L$). La partícula se encuentra en su estado de energía más bajo. Suponga ahora que en $t = 0$ las paredes del pozo se mueven instantáneamente de tal forma que su ancho se duplica ($-2L \leq x \leq +2L$). Este cambio no afecta al estado de la partícula, el cual es el mismo antes e inmediatamente después del cambio. (a) Escriba la función de onda de la partícula para $t > 0$. Calcule la probabilidad de encontrar la partícula en un autoestado arbitrario del sistema modificado ¿Cuál es la probabilidad de encontrar la partícula en una autofunción impar? (b) Calcule el valor medio de la energía para $t > 0$. Ayuda: la siguiente serie le será de utilidad:

$$\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(2n+1)^2}{\left[(2n+1)^2 - 4\right]^2} = \frac{\pi^2}{16}. \tag{9.1}$$