Macías Márquez Misael Iván

1. Antes de publicar la ecuación que lleva su nombre, Schrodinger consideró la ecuación

$$\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{m^2c^2}{\hbar^2}\Psi$$

para describir una partícula de masa m. Tomando en cuenta que Ψ es una solución general de dicha ecuación, encuentre la ecuación de conservación de la cantidad

$$\varrho = \frac{i}{2}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right)$$

¿La cantidad ϱ es admisible como densidad de probabilidad de esta teoría?

Sol:

$$\frac{\partial\varrho}{\partial t} = \frac{i}{2}\frac{\partial}{\partial t}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right) = \frac{i}{2}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} - \Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial t^2} + \cancel{\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\frac{\partial\Psi}{\partial t} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\frac{\partial\Psi}{\partial t}}\right)$$

ahora como Ψ es solución general de la ec. mencionada, entonces

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = c^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \frac{m^2c^4}{\hbar^2}\Psi$$

$$\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial t^2} = c^2\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2} - \frac{m^2c^4}{\hbar^2}\Psi^*$$

que sustituyendo

$$\frac{\partial\varrho}{\partial t} = \frac{i}{2}\left(\Psi^*\left(c^2\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \cancel{\frac{m^2c^4}{\hbar^2}}\Psi\right) - \Psi\left(c^2\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2} - \cancel{\frac{m^2c^4}{\hbar^2}}\Psi^*\right)\right)$$

$$= \frac{c^2 i}{2}\left(\Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} - \Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2}\right)$$

por regla de la cadena se tiene

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right) = \Psi^*\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial\Psi}{\partial x}\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}$$

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right) = \Psi\frac{\partial^2\Psi^*}{\partial x^2} + \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\frac{\partial\Psi}{\partial x}$$

y sustituyendo

$$\frac{\partial\varrho}{\partial t} = \frac{c^2 i}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}\right) - \frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right) + \cancel{\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\frac{\partial\Psi}{\partial x}}\right)$$

$$= \frac{c^2 i}{2}\frac{\partial}{\partial x}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right) = \frac{\partial}{\partial x}J$$

$$\therefore \qquad \frac{\partial \varrho}{\partial t} - \frac{\partial J}{\partial x} = 0$$

con $J = \frac{c^2 i}{2}\left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\right)$, ϱ es admisible como densidad de probabilidad siempre y cuando Ψ y $\frac{\partial \Psi}{\partial x}$ tiendan a cero cuando x tiende a $\pm\infty$

2. Considerando $\psi_1, \psi_2, \phi_1, \phi_2 \in \mathcal{H}$, $\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_1 \in C$, demuestre la propiedad del producto interior

$$< \alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2, \beta_1\phi_1 + \beta_2\phi_2 >= \alpha_1^*\beta_1 < \psi_1, \phi_1 > + \alpha_1^*\beta_2 < \psi_1, \phi_2 > + \alpha_2^*\beta_1 < \psi_2, \phi_1 > + \alpha_2^*\beta_2 < \psi_2, \phi_2 >$$

Sol:

Recordando que el producto interior que usamos es

$$< \psi_1, \psi_2 >= \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^* \psi_2$$

entonces

$$< \alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2, \beta_1\phi_1 + \beta_2\phi_2 >= \int_{-\infty}^{\infty} dx (\alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2)^*(\beta_1\phi_1 + \beta_2\phi_2)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx (\alpha_1^*\psi_1^* + \alpha_2^*\psi_2^*)(\beta_1\phi_1 + \beta_2\phi_2) = \int_{-\infty}^{\infty} (\alpha_1^*\psi_1^*\beta_1\phi_1 + \alpha_1^*\psi_1^*\beta_2\phi_2 + \alpha_2^*\psi_2^*\beta_2\phi_2 + \alpha_2^*\psi_2^*\beta_1\phi_1)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx \alpha_1^*\psi_1^*\beta_1\phi_1 + \int_{-\infty}^{\infty} dx \alpha_1^*\psi_1^*\beta_2\phi_2 + \int_{-\infty}^{\infty} dx \alpha_2^*\psi_2^*\beta_2\phi_2 + \int_{-\infty}^{\infty} dx \alpha_2^*\psi_2^*\beta_1\phi_1$$

$$= \alpha_1^*\beta_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^*\phi_1 + \alpha_1^*\beta_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_1^*\phi_2 + \alpha_2^*\beta_2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_2^*\phi_2 + \alpha_2^*\beta_1 \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi_2^*\phi_1$$

$$= \alpha_1^*\beta_1 < \psi_1, \phi_1 > + \alpha_1^*\beta_2 < \psi_1, \phi_2 > + \alpha_2^*\beta_2 < \psi_2, \phi_2 > + \alpha_2^*\beta_1 < \psi_2, \phi_1 >$$

$$\therefore < \alpha_1\psi_1 + \alpha_2\psi_2, \beta_1\phi_1 + \beta_2\phi_2 >= \alpha_1^*\beta_1 < \psi_1, \phi_1 > + \alpha_1^*\beta_2 < \psi_1, \phi_2 > + \alpha_2^*\beta_2 < \psi_2, \phi_2 > + \alpha_2^*\beta_1 < \psi_2, \phi_1 >$$

3. Se dice que dos funciones $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{H}$ son ortogonales cuando se cumple

$$< \psi_1, \psi_2 >= 0$$

Dadas dos funciones $\phi_1, \phi_2 \in \mathcal{H}$ tal que

$$< \phi_1, \phi_2 >= a \in \mathcal{R}$$

encuentre combinaciones lineales de ϕ_1 y ϕ_2 que sean ortogonales a

Sean α, $\beta \in \mathcal{C}$

a) ϕ_1

Sol:

Suponiendo que $\alpha\phi_1 + \beta\phi_2$ es ortogonal a ϕ_1, entonces

$$< \phi_1, \alpha\phi_1 + \beta\phi_2 >= 0$$

y por el ejercicio 2 se tiene

$$< \phi_1, \alpha\phi_1 + \beta\phi_2 >= \alpha < \phi_1, \phi_1 > +\beta < \phi_1, \phi_2 >$$

ahora ya que ϕ_1 es una función cuadrado integrable, se debe tener que $< \phi_1, \phi_1 >= b$ con $b \in \mathcal{R}$, además por hipótesis

$$< \phi_1, \alpha\phi_1 + \beta\phi_2 >= b\alpha + \beta a = 0$$

por lo tanto $\alpha\phi_1 + \beta\phi_2$ es ortogonal a ϕ_1 si $\alpha \in \mathcal{C}$ y $\beta = -\frac{b}{a}\alpha = -\frac{<\phi_1,\phi_1>}{<\phi_1,\phi_2>}\alpha$

b) $\phi_1 + \phi_2$

Sol:

Suponiendo lo mismo tenemos que

$$< \phi_1 + \phi_2, \alpha\phi_1 + \beta\phi_2 >= 0$$

y por el ejercicio 2

$$< \phi_1 + \phi_2, \alpha\phi_1 + \beta\phi_2 >= \alpha < \phi_1, \phi_1 > +\beta < \phi_1, \phi_2 > +\alpha < \phi_2, \phi_1 > +\beta < \phi_2, \phi_2 >$$

ahora ya que ϕ_1 y ϕ_2 son funciones cuadrado integrables, se debe tener que $< \phi_1, \phi_1 >= b$ y $< \phi_2, \phi_2 >= c$ con $b, c \in \mathcal{R}$, además por hipótesis y propiedades del producto interior

$$< \phi_1 + \phi_2, \alpha\phi_1 + \beta\phi_2 >= b\alpha + a\beta + a^*\alpha + c\beta = 0$$

$$\beta(a + c) + \alpha(a + b) = 0$$

por lo tanto $\alpha\phi_1 + \beta\phi_2$ es ortogonal a $\phi_1 + \phi_2$ si $\alpha \in \mathcal{C}$ y $\beta = -\frac{a+b}{a+c}\alpha = -\frac{<\phi_1,\phi_1>+<\phi_1,\phi_2>}{<\phi_1,\phi_1>+<\phi_2,\phi_2>}\alpha$
$\beta = -\frac{<\phi_1,\phi_1>+<\phi_1,\phi_2>}{<\phi_1\phi_2,\phi_1\phi_2>}\alpha$

4. Para un hamiltoniano $\hat{H}$ de la forma

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x})$$

Demuestre la expresión

$$\frac{d}{dt} < \hat{x}\hat{p} >_\psi = 2 < \hat{T} >_\psi - \left\langle \hat{x}\frac{\partial \hat{V}}{\partial \hat{x}} \right\rangle_\psi$$

donde $\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$ es el operador de energía cinética en una dimensión. A partir de esta expresión, suponiendo dependencia temporal armónica para el esta ψ, deduzca la versión cuántica del teorema del virial

Sol:

Ya hemos demostrado que

$$\frac{d}{dt} < \hat{O} >_\Psi = \frac{1}{i\hbar} < [\hat{O}, \hat{H}] >_\Psi + < \frac{\partial \hat{O}}{\partial t} >_\Psi$$

entonces

$$\frac{d}{dt} < \hat{x}\hat{p} >_\Psi = \frac{1}{i\hbar} < [\hat{x}\hat{p}, \hat{H}] >_\Psi + < \cancel{\frac{\partial \hat{x}\hat{p}}{\partial t}} >_\Psi$$

$$= \frac{1}{i\hbar} < [\hat{x}\hat{p}, \hat{H}] >_\Psi$$

$$= \frac{1}{i\hbar} < \hat{x}\hat{p}\hat{H} - \hat{H}\hat{x}\hat{p} + \hat{x}\hat{H}\hat{p} - \hat{x}\hat{H}\hat{p}) = \frac{1}{i\hbar}(\hat{x}(\hat{p}\hat{H} - \hat{H}\hat{p}) + (\hat{x}\hat{H} - \hat{H}\hat{x})\hat{p} >_\Psi$$

$$= \frac{1}{i\hbar} < \hat{x}(\hat{p}(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x})) - (\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x}))\hat{p}) + (\hat{x}(\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x})) - (\frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{x}))\hat{x})\hat{p} >_\Psi$$

$$= \frac{1}{i\hbar} < \hat{x}\cancel{\frac{\hat{p}^3}{2m}} + \hat{x}\hat{p}\hat{V}(\hat{x}) - \hat{x}\cancel{\frac{\hat{p}^3}{2m}} - \cancel{\hat{x}\hat{V}(\hat{x})\hat{p}} + \hat{x}\frac{\hat{p}^2}{2m}\hat{p} + \cancel{\hat{x}\hat{V}(\hat{x}))\hat{p}} - \frac{\hat{p}^2}{2m}\hat{p}\hat{x} - \cancel{\hat{V}(\hat{x}))\hat{x}\hat{p}} >_\Psi$$

$$= \frac{1}{i\hbar} < \hat{x}\hat{p}\hat{V}(\hat{x}) + \frac{\hat{p}}{m}[\hat{x}, \hat{p}]\hat{p} >_\Psi = \frac{1}{i\hbar} < \hat{x}\hat{p}\hat{V}(\hat{x}) + \frac{i\hbar\hat{p}}{m}\hat{p} >_\Psi$$

$$= -\frac{i\hbar}{i\hbar} < \hat{x}\frac{\partial \hat{V}(\hat{x})}{\partial x} >_\Psi + \frac{i\hbar}{i\hbar} 2 < \hat{T} >_\Psi = 2 < \hat{T} >_\Psi - < \hat{x}\frac{\partial \hat{V}(\hat{x})}{\partial x} >_\Psi$$

5. Considere el operador

$$\hat{f}(\hat{x}) = \sum_{n=1}^{N} A_n \hat{x}^n$$

Muestre que si alguno de los coeficientes A_n es complejo, entonces $f(\hat{x})$ no es hermitiano

Sol:

Sea $\Psi \in \mathcal{H}$

Supongamos que $\hat{f}(\hat{x})$ es hermitiano ($< \hat{f}(\hat{x}) >_\Psi^* = < \hat{f}(\hat{x}) >_\Psi$) con $Im(A_i) \neq 0$ para algun $i \in (1, ..., N)$, entonces

$$< \hat{f}(\hat{x}) >_\Psi^* = < \hat{f}(\hat{x}) >_\Psi$$

$$< \Psi, \hat{f}(\hat{x})\Psi >^* = < \Psi, \hat{f}(\hat{x})\Psi >$$

$$\left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^* \hat{f}(\hat{x}) \Psi \right)^* = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^* \hat{f}(\hat{x}) \Psi$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi \hat{f}^*(\hat{x}) \Psi^* = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^* \hat{f}(\hat{x}) \Psi$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi \sum_{n=1}^{N} A_n^* x^{n*} \Psi^* = \int_{-\infty}^{\infty} dx \Psi^* \sum_{n=1}^{N} A_n x^n \Psi$$

$$\sum_{n=1}^{N} A_n^* \int_{-\infty}^{\infty} dx x^n \Psi^* \Psi = \sum_{n=1}^{N} A_n \int_{-\infty}^{\infty} dx x^n \Psi \Psi^*$$

$$\sum_{n=1}^{N} (A_n^* - A_n) \int_{-\infty}^{\infty} dx x^n |\Psi|^2 = 0$$

$$\therefore A_n^* - A_n = 0 \qquad \forall n \in (1, ..., N)$$

pero esto es una contradicción por lo tanto $\hat{f}^*(\hat{x})$ mo es hermitiano