

Mecánica Cuántica: Tarea 3

Tomás Ricardo Basile Álvarez
316617194

1 de julio de 2021

Problema 1

Para los estados estacionarios del pozo de potencial infinito, donde fuera del pozo la función de onda es cero y dentro es $\psi_n = Ae^{iE_nt/\hbar} \sin(\frac{n\pi}{a}x)$ con $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$

- a) Confirma el valor que debe tener A para que ψ_n esté normalizada (te debe de dar $\sqrt{\frac{2}{a}}$ salvo por una fase

Para que la función esté normalizada, por definición se debe de cumplir que $\int_{\mathbb{R}} |\psi_n(x)|^2 dx = \int_{\mathbb{R}} \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx = 1$. Desarrollamos $\int_{\mathbb{R}} \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx$ para encontrar la condición para A (tomando en cuenta que sólo hay que realizar la integral entre 0 y a , pues fuera de este intervalo la función de onda del pozo infinito vale 0):

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}} \psi_n^*(x)\psi_n(x)dx &= \int_0^a \left(Ae^{iE_nt/\hbar} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\right)^* \left(Ae^{iE_nt/\hbar} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)\right) dx \\&= \int_0^a A^* e^{-iE_nt/\hbar} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) A e^{iE_nt/\hbar} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\&= \int_0^a AA^* e^{-iE_nt/\hbar + iE_nt/\hbar} \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\&= |A|^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \\&= |A|^2 \int_0^a \frac{1 - \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)}{2} dx \quad \text{por la identidad trigonométrica de seno cuadrado} \\&= |A|^2 \left[\int_0^a \frac{1}{2} dx - \int_0^a \frac{\cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)}{2} dx \right] \\&= |A|^2 \left[\frac{1}{2}x \Big|_0^a - \frac{a}{2n\pi} \frac{\sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)}{2} \Big|_0^a \right] \\&= |A|^2 \left[\frac{a}{2} - \frac{a}{4n\pi} (\sin(2n\pi) - \sin(0)) \right] \\&= |A|^2 \left[\frac{a}{2} - \frac{a}{4n\pi} (0 - 0) \right] \quad \text{como } n \text{ es natural, } \sin(2n\pi) = 0 \\&= |A|^2 \frac{a}{2}\end{aligned}$$

Por lo dicho al principio, para que la función de onda esté normalizada, esta integral debería de dar 1. Por lo tanto, igualamos este resultado a 1:

$$|A|^2 \frac{a}{2} = 1 \Rightarrow \boxed{|A| = \sqrt{\frac{2}{a}}}$$

Y obtenemos el resultado mencionado en el enunciado. A debe de tener una norma de $|A| = \sqrt{\frac{2}{a}}$ (es decir, tiene el valor $\sqrt{\frac{2}{a}}$ salvo alguna fase).

b) **Considera que el sistema esté descrito por ψ_n y calcula $\langle x \rangle$ y su varianza**

Usamos la expresión para el valor esperado de x que vimos en clase:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{\mathbb{R}} x |\psi_n|^2 dx = \int_0^a x |\psi_n|^2 dx \quad \text{porque la función de onda vale 0 fuera de } [0, a] \\ &= \int_0^a x \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = \int_0^a x \left(A e^{iE_n t/\hbar} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right)^* \left(A e^{iE_n t/\hbar} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right) dx \\ &= |A|^2 \int_0^a x \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx = |A|^2 \int_0^a x \left(\frac{1}{2} - \frac{\cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)}{2} \right) dx \\ &= \frac{1}{2} |A|^2 \left(\int_0^a x dx + \int_0^a x \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) dx \right) \\ &= \frac{1}{2} |A|^2 \left(\int_0^a x + \frac{a}{2n\pi} \frac{x \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)}{2} \Big|_0^a - \frac{a}{2n\pi} \int_0^a \frac{\sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)}{2} dx \right) \quad \text{la 2da integral por partes} \\ &= \frac{1}{2} |A|^2 \left(\frac{x^2}{2} \Big|_0^a + \frac{a}{2n\pi} \frac{x \sin\left(\frac{2n\pi}{a}x\right)}{2} \Big|_0^a + \frac{a^2}{8n^2\pi^2} \cos\left(\frac{2n\pi}{a}x\right) \Big|_0^a \right) \\ &= \frac{1}{2} |A|^2 \left(\frac{a^2}{2} + \frac{a^2 \sin(2n\pi)}{4n\pi} - \frac{a^2 \sin(0)}{4n\pi} + \frac{a^2}{8n^2\pi^2} (\cos(2n\pi) - \cos(0)) \right) \\ &= \frac{1}{2} |A|^2 \left(\frac{a^2}{2} \right) \quad \text{porque los senos valen 0 y los cosenos se cancelan} \\ &= \frac{1}{2} \frac{2}{a} \frac{a^2}{2} \quad \text{por el valor de A del inciso anterior} \\ &= \boxed{\frac{a}{2}} \end{aligned}$$

Calculamos ahora el valor esperado de x^2 para usarlo para conseguir la varianza.

$$\begin{aligned}
\langle x^2 \rangle &:= \int_{\mathbb{R}} x^2 |\psi_n|^2 dx = \int_0^a x^2 |\psi_n|^2 dx \\
&= |A|^2 \int_0^a x^2 \sin^2\left(\frac{n\pi}{a}x\right) dx \quad \text{el valor de } |\psi_n|^2 \text{ es el mismo que calculamos antes} \\
&= |A|^2 \frac{a^3}{n^3 \pi^3} \int_0^{n\pi} u^2 \sin^2 u du \quad \text{hacemos el cambio } u = \frac{n\pi}{a}x \Rightarrow dx = \frac{a}{n\pi} du, \quad u \in [0, n\pi] \\
&= |A|^2 \frac{a^3}{n^3 \pi^3} \int_0^{n\pi} u^2 \left(\frac{1}{2} - \frac{\cos(2u)}{2} \right) du \\
&= |A|^2 \frac{a^3}{2n^3 \pi^3} \left(\int_0^{n\pi} u^2 du - \int_0^{n\pi} u^2 \cos(2u) du \right) \\
&= |A|^2 \frac{a^3}{n^3 \pi^3} \left(\int_0^{n\pi} u^2 du - \frac{u^2 \sin(2u)}{2} \Big|_0^{n\pi} + \int_0^{n\pi} u \sin(2u) du \right) \\
&= |A|^2 \frac{a^3}{n^3 \pi^3} \left(\int_0^{n\pi} u^2 du - \frac{u^2 \sin(2u)}{2} \Big|_0^{n\pi} - \frac{u \cos(2u)}{2} \Big|_0^{n\pi} + \int_0^{n\pi} \frac{\cos(2u)}{2} du \right) \\
&= |A|^2 \frac{a^3}{n^3 \pi^3} \left(\frac{u^3}{3} \Big|_0^{n\pi} - \frac{u^2 \sin(2u)}{2} \Big|_0^{n\pi} - \frac{u \cos(2u)}{2} \Big|_0^{n\pi} + \frac{\sin(2u)}{4} \Big|_0^{n\pi} \right) \\
&= |A|^2 \frac{a^3}{n^3 \pi^3} \left(\frac{n^3 \pi^3}{3} - \frac{n\pi \cos(2n\pi)}{2} \right) \\
&= \frac{2}{a} \frac{a^3}{n^3 \pi^3} \left(\frac{n^3 \pi^3}{3} - \frac{n\pi}{2} \right) \\
&= \boxed{a^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2(n\pi)^2} \right)}
\end{aligned}$$

Entonces, la varianza de x se calcula como:

$$\begin{aligned}
\sigma_x^2 &= \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = a^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2(n\pi)^2} \right) - \left(\frac{a}{2} \right)^2 \\
&= \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{4} - \frac{a^2}{2(n\pi)^2} \\
&= \boxed{\frac{a^2}{4} \left(\frac{1}{3} - \frac{2}{(n\pi)^2} \right)}
\end{aligned}$$

Y la desviación estándar es $\sigma_x = \sqrt{\frac{a^2}{4} \left(\frac{1}{3} - \frac{2}{(n\pi)^2} \right)}$

■ $\langle p \rangle$ y su varianza

Recordamos que $\langle p \rangle$ se define como $\langle p \rangle = m \frac{d\langle x \rangle}{dt}$

Pero en el inciso anterior calculamos que $\langle x \rangle = \frac{a}{2} = cte$. Por lo que su derivada con

respecto al tiempo vale 0.

Entonces $\langle p \rangle = 0$

Para calcular σ_p^2 primero calculamos $\langle p^2 \rangle$.

Para ello, recordamos que el operador de momento es $\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$ y usamos la expresión vista en clase para calcular el valor esperado de un operador.

$$\begin{aligned}\langle p^2 \rangle &= \int_{\mathbb{R}} \psi_n^* \hat{p}^2 \psi_n dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} \psi_n^* \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \right)^2 \psi_n dx \\ &= -\hbar^2 \int_{\mathbb{R}} \psi_n^* \frac{d^2}{dx^2} \psi_n dx\end{aligned}$$

No hace falta sustituir la expresión para ψ_n , pues podemos recordar que esta función se obtiene resolviendo la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo para el pozo infinito, que es: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} = E_n \psi$

Entonces, despejando notamos que $\frac{d^2 \psi_n}{dx^2} = -\frac{2mE_n}{\hbar^2} \psi_n$

Con ello encontramos una expresión para la segunda derivada de ψ_n y la podemos sustituir en la integral que teníamos:

$$\begin{aligned}\langle p^2 \rangle &= -\hbar^2 \int_{\mathbb{R}} \psi_n^* \frac{d^2}{dx^2} \psi_n dx \\ &= -\hbar^2 \int_{\mathbb{R}} \psi_n^* \left(-\frac{2mE_n}{\hbar^2} \psi_n \right) dx \\ &= 2mE_n \int_{\mathbb{R}} \psi_n^* \psi_n dx \\ &= 2mE_n(1) \quad \text{porque } \psi_n \text{ está normalizado} \\ &= 2mE_n\end{aligned}$$

Ahora usamos la expresión que nos dan en el enunciado de la energía para la partícula en el pozo $E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$

$$\text{Y entonces } \langle p^2 \rangle = 2mE_n = 2m \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = \boxed{\frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{a^2}}$$

Entonces, la varianza de p está dada por:

$$\begin{aligned}\sigma_p^2 &= \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 \\ &= \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{a^2} - 0 = \boxed{\frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{a^2}}\end{aligned}$$

Por lo que la desviación estándar es de $\sigma_p = \frac{n\pi\hbar}{a}$

- d) **Considera ahora un estado dado $\psi = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_n + \psi_m)$. Dado que ya normalizaste a las ψ_n . ¿Está ψ correctamente normalizado?**

Para ver si está normalizado, calculamos $\int_{\mathbb{R}} |\psi|^2 dx$:

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}} |\psi|^2 dx &= \int_{\mathbb{R}} \psi^* \psi dx \\&= \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_n + \psi_m) \right)^* \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_n + \psi_m) \right) dx \\&= \int_{\mathbb{R}} \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_n^* + \psi_m^*) \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_n + \psi_m) \right) dx \\&= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} \psi_n^* \psi_n + \psi_n^* \psi_m + \psi_m^* \psi_n + \psi_m^* \psi_m dx \\&= \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}} |\psi_n|^2 + \psi_n^* \psi_m + \psi_n \psi_m^* + |\psi_m|^2 dx \\&= \frac{1}{2} \left(\int_{\mathbb{R}} |\psi_n|^2 dx + \int_{\mathbb{R}} \psi_n^* \psi_m dx + \int_{\mathbb{R}} \psi_n \psi_m^* dx + \int_{\mathbb{R}} |\psi_m|^2 dx \right)\end{aligned}$$

Como ψ_n y ψ_m están normalizadas, las integrales $\int_{\mathbb{R}} |\psi_n|^2 dx$ y $\int_{\mathbb{R}} |\psi_m|^2 dx$ valen 1. Por otro lado, en clase vimos que se tiene una relación de ortonormalidad en las soluciones, es decir: $\int_0^a \psi_k^* \psi_j dx = \delta_{kj}$. Por lo que si $m \neq n$, tendremos que las integrales $\int_{\mathbb{R}} \psi_n^* \psi_m dx$ y $\int_{\mathbb{R}} \psi_n \psi_m^* dx$ valen ambas 0.

Entonces, la expresión que teníamos antes nos queda como:

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}} |\psi|^2 dx &= \frac{1}{2} (1 + 0 + 0 + 1) \\&= 1\end{aligned}$$

Por lo que ψ está normalizada.

- e) **Calcula $\langle x \rangle$ y $\langle p \rangle$ para esta ψ**

Primero obtenemos una expresión para $|\psi|$ que vamos a necesitar luego:

$$\begin{aligned}
|\psi|^2 &= \psi^* \psi = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_n + \psi_m) \right)^* \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_n + \psi_m) \right) \\
&= \frac{1}{2} (\psi_n^* \psi_n + \psi_m^* \psi_n + \psi_n^* \psi_m + \psi_m^* \psi_m) \\
&= \frac{1}{2} (|\psi_n|^2 + (\psi_m^* \psi_n) + (\psi_m^* \psi_n)^* + |\psi_m|^2) \\
&= \frac{1}{2} (|\psi_n|^2 + 2\text{Re}(\psi_m^* \psi_n) + |\psi_m|^2) \quad \text{usando la propiedad: } z^* + z = 2\text{Re}(z) \\
&= \frac{1}{2} |\psi_n|^2 + \text{Re}(\psi_m^* \psi_n) + \frac{1}{2} |\psi_m|^2
\end{aligned}$$

Ahora ya nos ponemos a calcular $\langle x \rangle$ a partir de su definición (y considerando que sólo hay que integrar en $[0, a]$ pues fuera las funciones valen 0)

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \int_0^a x |\psi|^2 dx \\
&= \int_0^a x \left(\frac{1}{2} |\psi_n|^2 + \text{Re}(\psi_m^* \psi_n) + \frac{1}{2} |\psi_m|^2 \right) dx \\
&= \frac{1}{2} \int_0^a x |\psi_n|^2 + \int_0^a x \text{Re}(\psi_m^* \psi_n) dx + \frac{1}{2} \int_0^a x |\psi_m|^2 \quad (1)
\end{aligned}$$

La primera y última integral son los valores esperados $\langle x \rangle$ para una partícula en el estado n y en el estado m . Como vimos en el inciso b), en ambos casos el valor es $\frac{a}{2}$.

Por otro lado, necesitamos calcular la integral del centro:

$$\begin{aligned}
\int_0^a x \text{Re}(\psi_m^* \psi_n) dx &= \int_0^a x \text{Re} \left[\left(\sqrt{\frac{2}{a}} e^{-iE_m t/\hbar} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \right)^* \left(\sqrt{\frac{2}{a}} e^{-iE_n t/\hbar} \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \right) \right] dx \\
&= \frac{2}{a} \int_0^a \text{Re} \left[x e^{it(E_m - E_n)/\hbar} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \right] dx \\
&= \frac{2}{a} \int_0^a x \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \text{Re} \left[e^{it(E_m - E_n)/\hbar} \right] dx \\
&= \frac{2}{a} \int_0^a x \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) \cos(t(E_m - E_n)/\hbar) dx \\
&= \frac{2}{a} \cos(t(E_m - E_n)/\hbar) \int_0^a x \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) dx \quad (2)
\end{aligned}$$

Resolvemos la integral que nos queda:

$$\begin{aligned}
& \int_0^a x \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \sin\left(\frac{m\pi}{a}x\right) dx \\
&= \frac{1}{2} \int_0^a x \left[\cos\left(\frac{\pi x}{a}(n-m)\right) - \cos\left(\frac{\pi x}{a}(n+m)\right) \right] dx \quad \text{Por identidad de producto a suma} \\
&= \frac{1}{2} \int_0^a x \cos\left(\frac{\pi x}{a}(n-m)\right) dx - \int_0^a x \cos\left(\frac{\pi x}{a}(n+m)\right) dx
\end{aligned}$$

Resolvemos ambas integrales por partes:

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \left[\frac{a}{\pi(n-m)} x \sin\left(\frac{\pi x}{a}(n-m)\right) \Big|_0^a - \int_0^a \frac{a}{\pi(n-m)} \sin\left(\frac{\pi x}{a}(n-m)\right) dx \right. \\
&\quad \left. - \frac{a}{\pi(n+m)} x \sin\left(\frac{\pi x}{a}(n+m)\right) \Big|_0^a + \int_0^a \frac{a}{\pi(n+m)} \sin\left(\frac{\pi x}{a}(n+m)\right) dx \right]
\end{aligned}$$

Las partes tachadas velen 0 porque $\sin(c\pi) = 0$ para c entero y m-n, m+n son enteros

$$\begin{aligned}
&= -\frac{1}{2} \int_0^a \frac{a}{\pi(n-m)} \sin\left(\frac{\pi x}{a}(n-m)\right) dx + \frac{1}{2} \int_0^a \frac{a}{\pi(n+m)} \sin\left(\frac{\pi x}{a}(n+m)\right) dx \\
&= \frac{1}{2} \frac{a^2}{\pi^2(n-m)^2} \cos\left(\frac{\pi x}{a}(n-m)\right) \Big|_0^a - \frac{1}{2} \frac{a^2}{\pi^2(n+m)^2} \cos\left(\frac{\pi x}{a}(n+m)\right) \Big|_0^a \\
&= \frac{1}{2} \frac{a^2}{\pi^2(n-m)^2} [\cos(\pi(n-m)) - 1] - \frac{1}{2} \frac{a^2}{\pi^2(n+m)^2} [\cos(\pi(n+m)) - 1]
\end{aligned}$$

Ahora usamos que $\cos(\pi c) = (-1)^c$ para c entero

$$= \frac{1}{2} \frac{a^2}{\pi^2(n-m)^2} [(-1)^{n-m} - 1] - \frac{1}{2} \frac{a^2}{\pi^2(n+m)^2} [(-1)^{n+m} - 1]$$

notamos que $(-1)^{n-m} = (-1)^{n+m}$ porque n-m y n+m tienen la misma paridad

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \frac{a^2}{\pi^2(n-m)^2} [(-1)^{n+m} - 1] - \frac{1}{2} \frac{a^2}{\pi^2(n+m)^2} [(-1)^{n+m} - 1] \\
&= \frac{a^2}{2\pi^2} [(-1)^{n+m} - 1] \left(\frac{1}{(n-m)^2} - \frac{1}{(n+m)^2} \right) \\
&= \frac{a^2}{2\pi^2} [(-1)^{n+m} - 1] \frac{4mn}{(n-m)^2(n+m)^2} \\
&= \frac{2mna^2}{\pi^2(n-m)^2(n+m)^2} [(-1)^{n+m} - 1] \\
&= \frac{2mna^2}{\pi^2(n^2 - m^2)^2} [(-1)^{n+m} - 1]
\end{aligned}$$

Ahora ya podemos sustituir esto en (2) para obtener la expresión de la integral:

$$\int_0^a x \operatorname{Re}(\psi_m^* \psi_n) dx = \frac{2}{a} \cos(t(E_m - E_n)/\hbar) \frac{2mna^2}{\pi^2(n^2 - m^2)^2} [(-1)^{n+m} - 1]$$

Y finalmente, sustituir esta integral y las otras dos (que ya habíamos dicho que valen $a/2$) en la expresión (1):

$$\begin{aligned}
\langle x \rangle &= \frac{1}{2} \int_0^a x |\psi_n|^2 + \int_0^a x \operatorname{Re}(\psi_m^* \psi_n) dx + \frac{1}{2} \int_0^a x |\psi_m|^2 \\
&= \frac{1}{2} \frac{a}{2} + \frac{2}{a} \cos(t(E_m - E_n)/\hbar) \frac{2mna^2}{\pi^2(n^2 - m^2)^2} [(-1)^{n+m} - 1] + \frac{1}{2} \frac{a}{2} \\
&= \boxed{\frac{a}{2} + 4a \frac{mn}{\pi^2(n^2 - m^2)^2} [(-1)^{n+m} - 1] \cos(t(E_m - E_n)/\hbar)}
\end{aligned}$$

Tenemos dos casos dependiendo de los valores de n, m .

Si $n + m$ es un número par (es decir, n y m tienen la misma paridad) entonces $[(-1)^{n+m} - 1] = [1 - 1] = 0$ y la expresión se simplifica a $\langle x \rangle = \frac{a}{2}$. Mientras que si $m + n$ es impar, entonces $[-(1)^{n+m} - 1] = [-1 - 1] = -2$ y la expresión queda como $\frac{a}{2} - 8a \frac{mn}{\pi^2(n^2 - m^2)^2} \cos(t(E_m - E_n)/\hbar)$

- **Si $n + m$ es par:** $\langle x \rangle = \frac{a}{2}$
- **Si $n + m$ es impar:** $\langle x \rangle = \frac{a}{2} - 8a \frac{mn}{\pi^2(n^2 - m^2)^2} \cos(t(E_m - E_n)/\hbar)$

Calculamos ahora $\langle p \rangle$, para lo que recordamos que $\langle p \rangle := M \frac{d}{dt} \langle x \rangle$, con M la masa de la partícula. Pero como la energía del estado n es $E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2Ma^2}$, podemos despejar de aquí M para no introducir la nueva constante M a nuestras expresiones: $M = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2E_n a^2}$.

Entonces, el valor esperado del momento es $\langle p \rangle = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2E_n a^2} \frac{d}{dt} \langle x \rangle$

Por lo que usamos los resultados de $\langle x \rangle$ recién obtenidos

- **Si $n + m$ es par:** $\langle p \rangle := \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2E_n a^2} \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2E_n a^2} \frac{d}{dt} \left(\frac{a}{2} \right) = \boxed{0}$
- **Si $n + m$ es impar:**

$$\begin{aligned}
\langle p \rangle &= \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2E_n a^2} \frac{d}{dt} \langle x \rangle \\
&= \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2E_n a^2} \frac{d}{dt} \left(\frac{a}{2} - 8a \frac{mn}{\pi^2(n^2 - m^2)^2} \cos(t(E_m - E_n)/\hbar) \right) \\
&= \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2E_n a^2} \left(8a \frac{mn}{\pi^2(n^2 - m^2)^2} \frac{E_m - E_n}{\hbar} \sin(t(E_m - E_n)/\hbar) \right) \\
&= \frac{4mn^3 \hbar (E_m - E_n)}{a E_n (n^2 - m^2)^2} \sin(t(E_m - E_n)/\hbar)
\end{aligned}$$

Ahora bien, como $E_n = kn^2$ (donde $k = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$ es una constante que no depende de n , entonces tenemos que $\frac{E_m - E_n}{E_n} = \frac{km^2 - kn^2}{kn^2} = \frac{m^2 - n^2}{n^2}$.
Entonces nos queda:

$$\begin{aligned}\langle p \rangle &= \frac{4mn^3 \hbar (m^2 - n^2)}{an^2(n^2 - m^2)^2} \sin(t(E_m - E_n)/\hbar) \\ &= \boxed{\frac{4mn \hbar}{a(m^2 - n^2)} \sin(t(E_m - E_n)/\hbar)}\end{aligned}$$

- f) **Para una combinación general $\psi = \sum_n C_n \psi_n$, demuestra la condición que deben de cumplir los coeficientes C_n para que ψ esté normalizada si las ψ_n lo están**

Primero encontramos una expresión para $|\psi|^2$:

$$\begin{aligned}|\psi|^2 &= \psi^* \psi \\ &= \left(\sum_n C_n \psi_n \right)^* \sum_m C_m \psi_m \\ &= \sum_n C_n^* \psi_n^* \sum_m C_m \psi_m \\ &= \sum_n \sum_m C_n^* C_m \psi_n^* \psi_m\end{aligned}$$

Ahora bien, para que ψ esté normalizada, se debe de cumplir que $\int_0^a |\psi|^2 = 1$, entonces, calculamos esta integral y luego imponemos la condición de que valga 1:

$$\begin{aligned}\int_0^a |\psi|^2 &= \int_0^a \sum_n \sum_m C_n^* C_m \psi_n^* \psi_m dx \\ &= \sum_n \sum_m C_n^* C_m \int_0^a \psi_n^* \psi_m dx \\ &= \sum_n \sum_m C_n^* C_m \delta_{nm} \quad \text{porque las } \psi \text{ son ortonormales}\end{aligned}$$

Por la aparición de la δ , los términos de la suma doble son distintos de cero solamente cuando $n = m$, entonces cambiamos m por n y ahora sumamos sólo sobre las n :

$$\begin{aligned}&= \sum_n C_n^* C_n \\ &= \sum_n |C_n|^2\end{aligned}$$

Para que ψ esté normalizada, se debía de cumplir que el valor de esta integral sea 1, por lo que llegamos a la conclusión que:

$$\sum_n |C_n|^2 = 1$$

Problema 2

Usando las funciones de onda que encontramos en clase $\psi_p = A_p e^{\frac{i}{\hbar}(px - E_p t)}$ para la partícula libre de energía $E_p = p^2/2m$ donde p puede tomar cualquier valor real:

- a) Verifica el valor que A_p debe tomar para que se cumpla la normalización $\int \psi_{p_2}^* \psi_{p_1} dx = \delta(p_1 - p_2)$ (debes obtener $1/\sqrt{2\pi\hbar}$, salvo por una fase)

Calculamos la integral en cuestión:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} \psi_{p_2}^* \psi_{p_1} dx &= \int_{\mathbb{R}} \left(A_{p_1} e^{\frac{i}{\hbar}(p_1 x - E_{p_1} t)} \right)^* \left(A_{p_2} e^{\frac{i}{\hbar}(p_2 x - E_{p_2} t)} \right) dx \\ &= \int_{\mathbb{R}} \left(A_{p_1}^* e^{-\frac{i}{\hbar}(p_1 x - E_{p_1} t)} \right) \left(A_{p_2} e^{\frac{i}{\hbar}(p_2 x - E_{p_2} t)} \right) dx \\ &= A_{p_1}^* A_{p_2} \int_{\mathbb{R}} e^{\frac{i}{\hbar}[(p_2 - p_1)x - (E_{p_2} - E_{p_1})t]} dx \\ &= A_{p_1}^* A_{p_2} e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{p_2} - E_{p_1})t} \int_{\mathbb{R}} e^{\frac{i}{\hbar}(p_2 - p_1)x} dx \quad (1) \end{aligned}$$

Ahora resolvemos la integral que nos queda $\int_{\mathbb{R}} e^{\frac{i}{\hbar}(p_2 - p_1)x} dx$.

Para resolverla, primer probamos una propiedad de la delta de dirac:

Proposición: $\delta(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} d\mathbf{k}$

Prueba: Para probarlo, primero vamos a calcular la transformada de Fourier de la delta de Dirac.

Recordando que la transformada de Fourier de una función $f(x)$ está definida por $F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx$, tenemos entonces que la transformada de la delta (que denotaremos por $F(k)$) es:

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) e^{-ikx} dx$$

Recordamos ahora que la delta cumple que $\int_{\mathbb{R}} g(x) \delta(x) = g(0)$ y lo aplicamos para este caso

$$\begin{aligned} &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} (e^{-ik(0)}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \end{aligned}$$

Entonces, la transformada de la función delta es $F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$

Aplicaremos ahora el teorema de inversión de la transformada de Fourier. El teorema

dice que si $F(k)$ es la transformada de $f(x)$, entonces podemos recuperar a la función $f(x)$ usando la transformada inversa como $f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{ikx} dk$

Aplicamos este teorema para $f(x) = \delta(x)$ y la transformada que acabamos de calcular:

$$\begin{aligned}\delta(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} F(k) e^{ikx} dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} dk \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk\end{aligned}$$

Y entonces ya probamos el teorema:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk$$

Ahora, intentando llegar a una expresión parecida a la integral que buscamos resolver, vemos que si en vez de evaluar en x , evaluamos en $p_2 - p_1$, tendremos que:

$$\delta(p_2 - p_1) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(p_2 - p_1)} dk$$

Ahora multiplicamos y dividimos el exponente por \hbar :

$$\delta(p_2 - p_1) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} k \hbar (p_2 - p_1)} dk$$

Y hacemos el cambio de variable $u = k\hbar \Rightarrow du = \hbar dk$ y como en la integral k se mueve de $-\infty$ a ∞ , $u = k/\hbar$ también lo hará (y en la misma dirección, pues $\hbar > 0$) Entonces, al hacer el cambio de variable nos queda:

$$\begin{aligned}\delta(p_2 - p_1) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} u (p_2 - p_1)} \frac{du}{\hbar} \\ \Rightarrow \delta(p_2 - p_1) &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} u (p_2 - p_1)} du \\ \Rightarrow 2\pi\hbar\delta(p_1 - p_2) &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} u (p_2 - p_1)} du\end{aligned}$$

Y listo, ésta es la integral que necesitábamos (sólo que con u en vez de x como variable de integración). Entonces, podemos sustituir en la expresión (1):

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}} \psi_{p_2}^* \psi_{p_1} dx &= A_{p_1}^* A_{p_2} e^{-\frac{i}{\hbar} (E_{p_2} - E_{p_1})t} \int_{\mathbb{R}} e^{\frac{i}{\hbar} (p_2 - p_1)x} dx \\ &= A_{p_1}^* A_{p_2} e^{-\frac{i}{\hbar} (E_{p_2} - E_{p_1})t} (2\pi\hbar \delta(p_1 - p_2))\end{aligned}$$

Si ignoramos la exponencial imaginaria que sólo introduce una fase, vemos que:

$$\int_{\mathbb{R}} \psi_{p_2}^* \psi_{p_1} dx = A_{p_1}^* A_{p_2} (2\pi\hbar \delta(p_1 - p_2))$$

Entonces, para que se cumpla la condición de normalización $\int_{\mathbb{R}} \psi_{p_2}^* \psi_{p_1} dx = \delta(p_1 - p_2)$, debemos de tener que $A_{p_1}^* A_{p_2} = \frac{1}{2\pi\hbar}$

En particular, para $p_2 = p_1 = p$, nos queda que $A_p^* A_p = \frac{1}{2\pi\hbar} \Rightarrow |A_p|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$

Por lo que, salvo por una fase, debemos de tener que $A_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$

- b) **Calcula la velocidad de grupo de ψ_p y verifica que coincide con la velocidad de una partícula libre de masa m con energía E_p , o momento p (la expresión para la velocidad de grupo que vimos en clase la puedes encontrar muy fácilmente en la literatura)**

Podemos ver que la función de onda $\psi_p = A_p e^{\frac{i}{\hbar}(px - E_p t)}$ tiene la forma de una onda viajera general $A e^{i(kx - \omega t)}$

Donde entonces identificamos que $k = \frac{p}{\hbar}$, $\omega = \frac{E_p}{\hbar}$

Para una onda viajera, la velocidad de grupo se obtiene como $v_g = \frac{d\omega}{dk}$.
Entonces, en este caso, la velocidad de grupo de ψ_p es:

$$\begin{aligned} v_g &= \frac{d\omega}{dk} \\ &= \frac{d\left(\frac{E_p}{\hbar}\right)}{d\left(\frac{p}{\hbar}\right)} \\ &= \frac{d}{d\left(\frac{p}{\hbar}\right)} \left(\frac{p^2}{2m\hbar} \right) \quad \text{usamos la expresión de energía cinética } E_p = \frac{p^2}{2m} \text{ pues no hay potencial} \\ &= \frac{d}{d(p/\hbar)} \left(\frac{p^2}{2m\hbar^2} \hbar \right) \\ &= \frac{d}{d(p/\hbar)} \left(\frac{\hbar}{2m} \left(\frac{p}{\hbar} \right)^2 \right) \\ &= \frac{\hbar}{2m} 2 \left(\frac{p}{\hbar} \right) \\ &= \boxed{\frac{p}{m}} \end{aligned}$$

Vemos que esto da el resultado esperado para una partícula libre con velocidad v y masa m . Pues en dicho caso, el momento es $p = mv \Rightarrow v = \frac{p}{m}$

Problema 3

Demuestre que, salvo para la función idénticamente cero, la norma de toda solución a la ecuación de Schrodinger con energía menor al mínimo global del potencial, y que se anule en $x \rightarrow -\infty$ ($x \rightarrow \infty$), crecerá de manera desmedida para algún valor de x , ya sea finito o conforme $x \rightarrow \infty$ ($x \rightarrow -\infty$). Argumenta que esto basta para ver que tales soluciones no son normalizables. Pista: La clave de la demostración radica en que la función $f(x) := V(x) - E$ es real y positiva para toda x , y considerar que la derivada de la función de onda debe existir y ser continua (C^1)

La ecuación de Schrodinger independiente del tiempo dice $\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\psi$

Definimos una función $f(x) = V(x) - E$

Como $E < V(x)$ para todo x , entonces $f(x) > 0$ para todo x y es una función real, puesto que tanto $V(x)$ como E son reales.

Entonces la ecuación toma la forma $\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}f(x)\psi$

Como $f(x) > 0$, automáticamente notamos que esto implica que $\psi''(x)$ y $\psi(x)$ tienen el mismo signo para todo x .

Dicho esto, intuitivamente el resultado tiene sentido, pues si $\psi(x)$ se anula en $x \rightarrow -\infty$, a menos que la función sea 0 en todo \mathbb{R} , debe de haber un punto en el que ψ se desprege del 0 y tome un valor distinto (digamos que toma un valor positivo).

En este punto, para despregar del 0 hacia un valor positivo, la pendiente de ψ tiene que ser positiva. Además, como ψ y ψ'' tienen el mismo signo, ψ'' también es positiva. Es decir, en este punto la función tiene una pendiente positiva y que aumenta. A partir de entonces, la función permanecerá siempre positiva por un ciclo vicioso, pues que ψ sea positiva implicará que ψ'' lo sea también, lo que hará que ψ' no pueda disminuir y se mantenga positiva, lo que finalmente implica que ψ siga aumentando. Y así sucesivamente.

Esta función nunca podría regresar al 0 conforme $x \rightarrow \infty$, por lo que no sería normalizable.

Aún así, procedemos a hacer una demostración un poco más formal.

Digamos que ψ es una solución a la ecuación que encontramos de Schrodinger $\frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}f(x)\psi$.

Primero, redefinimos $f(x)$ para incluir el factor $\frac{2m}{\hbar^2}$, es decir $f(x) \rightarrow \frac{2m}{\hbar^2}f(x)$, lo cual no cambia que sea una función estrictamente positiva.

Entonces, digamos que la función $\psi(x)$ es una solución a la ecuación diferencial $\frac{d^2\psi}{dx^2} = f(x)\psi(x)$.

Demostraremos que esta función no puede ser normalizable.

Para ello, consideramos una nueva función definida como $h(x) = |\psi(x)|^2$, que es real y ≥ 0 para todo x .

Y calculamos ahora su segunda derivada:

$$\begin{aligned}
\frac{d^2 h(x)}{dx^2} &= \frac{d^2}{dx^2} [\psi(x)\psi^*(x)] = \frac{d}{dx} \frac{d}{dx} [\psi(x)\psi^*(x)] \\
&= \frac{d}{dx} [\psi'(x)\psi^*(x) + \psi(x)\psi^{*'}(x)] \\
&= \psi''(x)\psi^*(x) + \psi'(x)\psi^{*'}(x) + \psi'(x)\psi^{*'}(x) + \psi(x)\psi^{*''}(x) \\
&= \psi''(x)\psi^*(x) + 2\psi'(x)\psi^{*'}(x) + \psi(x)\psi^{*''}(x) \\
&\text{usamos ahora que } \psi''(x) = f(x)\psi(x) \\
&= f(x)\psi(x)\psi^*(x) + 2\psi'(x)\psi^{*'}(x) + \psi(x)(f(x)\psi(x))^* \\
&= f(x)|\psi(x)|^2 + 2\psi'(x)\psi^{*'}(x) + \psi(x)f^*(x)\psi^*(x) \\
&= f(x)|\psi(x)|^2 + 2|\psi'(x)|^2 + f(x)|\psi(x)|^2 \quad \text{porque } f \text{ es real} \\
&= 2f(x)|\psi(x)|^2 + 2|\psi'(x)|^2 \\
&\geq 0
\end{aligned}$$

Esto último porque tanto $f(x)$ como los valores absolutos son positivos o 0.

Que la segunda derivada sea mayor o igual a 0 implica que h' es no decreciente en todo \mathbb{R} , es decir, si $x_0 < x_1$ entonces $h'(x_0) \leq h'(x_1)$.

Ahora supongamos que como dice el enunciado, $\psi(x)$ se anula cuando $x \rightarrow -\infty$.

Es decir, $h(x) = |\psi(x)|^2$ se anula cuando $x \rightarrow -\infty$

A menos que $h(x)$ sea 0 en todos los reales (lo cual nos daría la solución trivial $\psi(x) = 0$), debe de haber algún momento en que la función toma valores estrictamente positivo (recordar que $h(x) \geq 0$). En dicho momento, la función tiene una pendiente positiva (para despegarse del 0) y por tanto h' es positiva.

Como h' es no decreciente, de este momento en adelante se tendrá que h' es siempre positiva. Entonces, como se tiene una derivada positiva, $h(x)$ tiene que ser creciente a partir de este momento.

Eso implica que es imposible que $h = |\psi|^2$ regrese al 0 de nuevo. Es decir, habrá un valor $M > 0$ (finito o infinito) tal que $\lim_{x \rightarrow \infty} h(x) = M$.

Este límite existe (o es infinito) pero no podemos tener un límite que no exista por que la única forma de conseguir esto con una función continua es por oscilaciones y esta función no oscila por tener derivada siempre positiva.

Entonces, probaremos que $h = |\psi|^2$ no es normalizable.

Pues como $\lim_{x \rightarrow \infty} h(x) = M > 0$, entonces por definición del límite, se tiene que para todo

$\epsilon > 0$ existe $x_0 > 0$ tal que si $x > x_0$ entonces $|h(x) - M| < \epsilon$.

en particular, para $\epsilon = M/2 > 0 \Rightarrow |h(x) - M| < M/2 \Rightarrow -M/2 < h(x) - M < M/2 \Rightarrow M/2 < h(x)$

Es decir, para todo $x > x_0$ se tiene $h(x) > M/2$

Y por lo tanto, considerando sólo la media recta $[0, \infty)$:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty |\psi(x)|^2 dx &= \int_0^\infty h(x) dx = \int_0^{x_0} h(x) dx + \int_{x_0}^\infty h(x) dx \\ &\geq \int_{x_0}^\infty h(x) dx \quad , \text{pues como } h(x) \geq 0, \text{ entonces } \int_0^{x_0} h(x) \geq 0 \\ &> \int_{x_0}^\infty M/2 dx \quad \text{pues cuando } x > x_0 \text{ se tiene que } h(x) > M/2 \\ &= M/2 \int_{x_0}^\infty dx = \infty \end{aligned}$$

Si M no fuera finito, entonces $\epsilon = M/2$ no es válido, pero sabríamos que existe un x_0 tal que si $x > x_0$ entonces $h(x) > 1$ y el resto es igual con $M/2$ cambiado por 1.

Por otro lado, si como dice el otro caso del enunciado, la función ψ se anula en $x \rightarrow \infty$, podemos considerar la función $\tilde{\psi}(x) = \psi(-x)$.

Esta nueva función $\tilde{\psi}$ se anula en $x \rightarrow -\infty$ y entonces podemos aplicar todo lo usado en el caso anterior para concluir que $\tilde{\psi}$ crece de manera desmedida para algún valor de x o conforme $x \rightarrow \infty$. Por lo que ψ crece de manera desmedida para algún valor de x o conforme $x \rightarrow -\infty$.