Sol_HW_3

February 13, 2018

1 Mecánica Cuántica 1 - 201820

1.1 Tarea # 3 - Solución

Elaborada por Daniel Forero

```
In [1]: from sympy import *
        init_printing(use_latex='mathjax')
        from IPython.display import display
```

1.2 Problema 3.4

Nuestra función inicial $\psi(x)$ tiene $\Delta p = \sigma$ y $\langle p \rangle = q$. Si aplicamos una transformación

$$\phi(x) = \exp\left(\frac{ip_0 x}{\hbar}\right)\psi(x). \quad p_0 = \hbar k_0$$

Esta transformada de Fourier se escribiría

$$\hat{\phi}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \exp(ik_0 x)\psi(x)\exp(-ikx)dk,$$

$$\hat{\phi}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\exp(-i(k-k_0)x)dk, \quad k - k_0 = k'$$

$$\hat{\phi}(k' + k_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)\exp(-ik'x)dk'$$

De esta forma vemos que la transformación en el espacio es equivalente a una translación en espacio de momentum. Esta translación, claramente, afecta el valor esperado, ya que la distribución se encuentra ahora centrada en $q + p_0$. Este será el valor esperado.

Por otro lado, la translación no modifica la forma de la distribución, de manera que $\Delta p = \sigma$.

1.3 Problema 3.6

```
In [2]: A,B,C,D = symbols('A B C D')
        q, k, x, a = symbols('q k x a', real=True)
        psi_1 = exp(I*k*x) + A*exp(-I*k*x)
        psi_2 = B*exp(I*q*x) + C*exp(-I*q*x)
        psi_3 = D*exp(I*k*x)
```

```
# En x = -a
step_1=simplify(psi_1.subs(x,-a)-psi_2.subs(x,-a))
display('En x= -a',Eq(step_1,0))
step_1d=simplify(diff(psi_1,x).subs(x,-a)\
                 -diff(psi_2,x).subs(x,-a))
display('En x= -a',Eq(step_1d,0))
# En x = a
step_11=simplify(psi_2.subs(x,a)-psi_3.subs(x,a))
display('En x= a',Eq(step_11,0))
step_11d=simplify(diff(psi_2,x).subs(x,a)\
                  -diff(psi_3,x).subs(x,a))
display('En x= a',Eq(step_11d,0))
```

'En x= -a'

$$Ae^{iak} - Be^{-iaq} - Ce^{iaq} + e^{-iak} = 0$$

'En x= -a'

$$-iAke^{iak} - iBqe^{-iaq} + iCqe^{iaq} + ike^{-iak} = 0$$

'En x= a'

$$Be^{iaq} + Ce^{-iaq} - De^{iak} = 0$$

'En x= a'

$$iBqe^{iaq} - iCqe^{-iaq} - iDke^{iak} = 0$$

```
In [3]: sols =solve([step_1, step_1d, step_11, step_11d])[0]
```

```
In [4]: R = trigsimp(expand(sols[A]*conjugate(sols[A]))\
                  .rewrite(sin)).collect(cos(4*a*q))
        display(Eq(Symbol('R'),R))
```

$$R = \frac{(-k+q)^2 (k+q)^2 (\cos(4aq) - 1)}{-k^4 - 6k^2q^2 - q^4 + (k^4 - 2k^2q^2 + q^4)\cos(4aq)}$$

$$R = \frac{(k^2 - q^2)^2(\cos(4qa) - 1)}{-(k^4 + (8-2)k^2q^2 + q^2) + (k^2 - 2k^2q^2 + q^4)\cos(4qa)}$$

$$R = \frac{(k^2 - q^2)^2(\cos(4qa) - 1)}{(k^4 - 2k^2q^2 + q^4)(\cos(4qa) - 1) - 8k^2q^2}$$

$$R = \frac{(k^2 - q^2)^2(\cos(4qa) - 1)}{(k^2 - q^2)^2(\cos(4qa) - 1) - 8k^2q^2}$$

In [5]:
```
T = trigsimp(expand((sols[D]*conjugate(sols[D]))\
                    .rewrite(sin))).collect(cos(4*a*q))
display(Eq(Symbol('T'),T))
```

$$T = \frac{8k^2q^2}{k^4 + 6k^2q^2 + q^4 + (-k^4 + 2k^2q^2 - q^4)\cos(4aq)}$$

$$T = \frac{8k^2q^2}{(k^4 + (8-2)k^2q^2 + q^4) - (k^4 - 2k^2q^2 + q^4)\cos(4aq)}$$

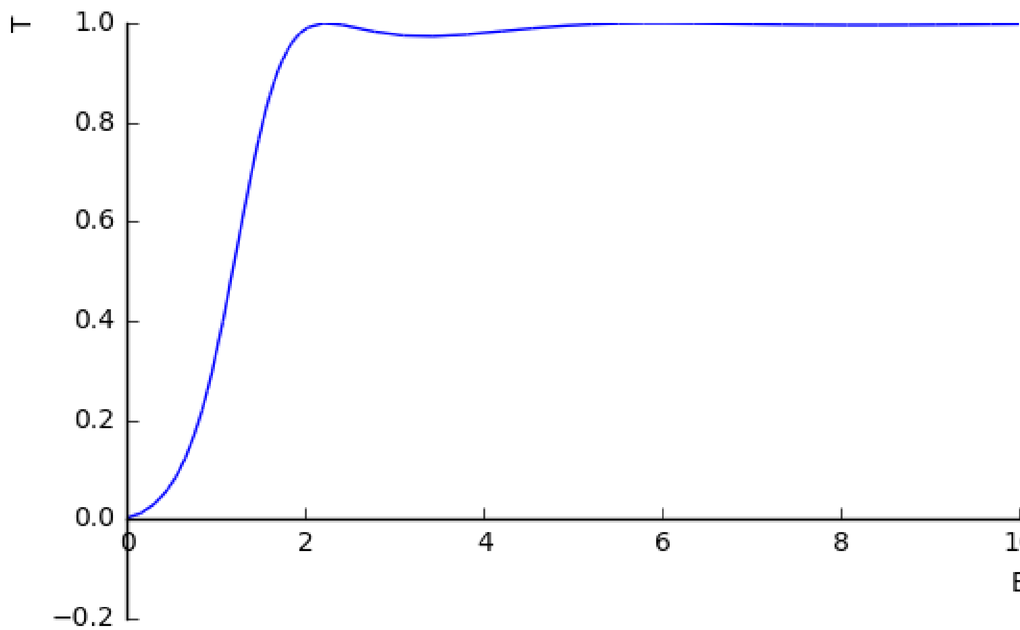
$$T = \frac{8k^2q^2}{8k^2q^2 + (k^2 - q^2)^2(1 - \cos(4aq))}$$

In [6]:
```
#Comprobamos que se cumpla R+T=1
simplify(R+T)
```

Out[6]:

$$1$$

In [7]:
```
#Para ver que el coeficiente de transmisión se hace 1, lo graficamos.
#Asumimos todas las constantes iguales a 1.
E, m, h, V0 = symbols('E m hbar V_0', real=True,\
                      positive=True)
T_graph=T.subs(k,sqrt(2*m*E/(h**2))).\
subs(q, sqrt(2*m*(E-V0)/(h**2)))\
.subs(m,1).subs(h,1).subs(V0,1).\
subs(a,1)
R_graph=R.subs(k,sqrt(2*m*E/(h**2)))\
.subs(q, sqrt(2*m*(E-V0)/(h**2)))\
.subs(m,1).subs(h,1).subs(V0,1).subs(a,1)
p1=plot(T_graph, label='T', color='b',\
        ylabel='T', xlim=(0,10))
display(solve(T.subs(k,sqrt(2*m*E/(h**2))).\
              subs(q, sqrt(2*m*(E-V0)/(h**2))),E))
```



[]

In [8]:
```
#Hallamos para cuales energías se obtiene T=1.
E_T1=solve(Eq(T.subs(k,sqrt(2*m*E/(h**2))).\
                subs(q, sqrt(2*m*(E-V0)/(h**2))),1),E)[0]
display(Eq(E,E_T1))
```

$$E = V_0 + \frac{\pi^2\hbar^2}{8a^2m}$$

In [9]:
```
#La profundidad del potencial está dada por
import scipy.constants as sc
N(E_T1.subs(a,0.1e-9).subs(h**2,sc.hbar**2)\
  .subs(m,sc.m_e)-0.7*sc.e)  #=0
```

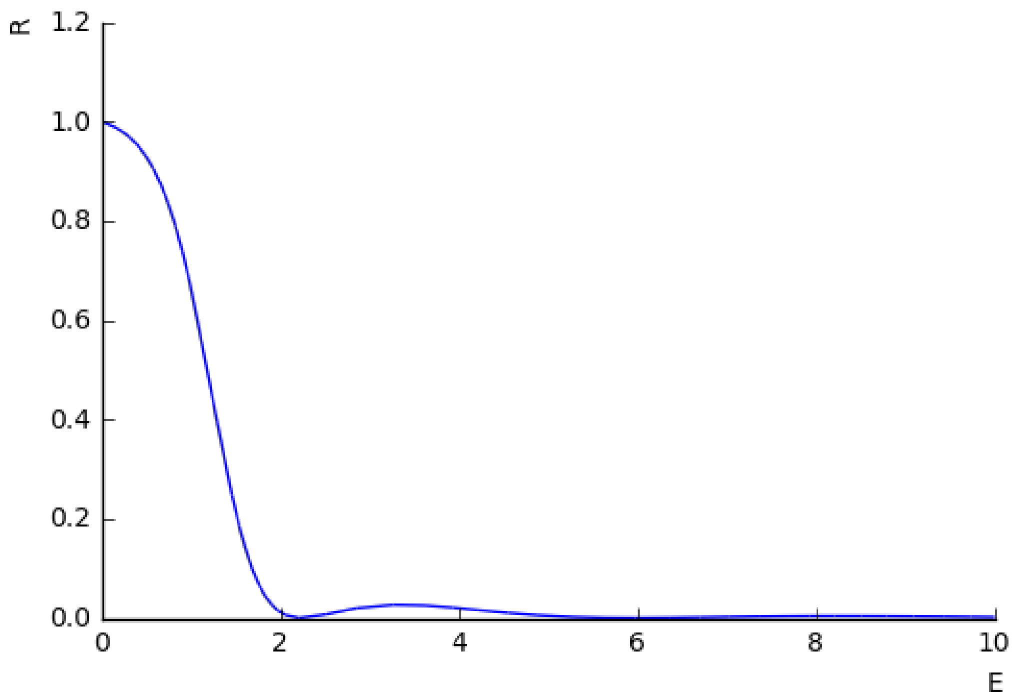
Out[9]:

$$V_0 + 1.39401446049131 \cdot 10^{-18}$$

Entonces la profundidad del potencial es

$$V_0 = -1.39 \times 10^{-18} J = -8.7\, eV$$

In [10]:
```
p2=plot(R_graph, label='R', color='r',\
        ylabel='R', xlim=(0,10))
```



El fenómeno puede explicarse mirando la gráfica del coeficiente de reflexión arriba, cuando lo átomos van muy despacio (baja energía) serán siempre reflejados por la barrera de potencial ($R = 1$).

```
In [ ]:
```