Universidad de los Andes-Dpto. de Física Mecánica Cuántica I-2014/II

Solución Tarea 4

Antes de empezar a solucionar estos ejercicios debe leer completamente el capítulo 1 del texto Cohen-Tannoudji et al..

1. Se mide la posición sobre el eje x de una partícula con una pequeña incertidumbre ε. Un tiempo t más tarde, se realiza otra medición de la posición. Se pretende conocer la incertidumbre en la segunda medición de la posición. Con este fin aproximar la función de onda inmediatamente después de la primera medición (t = 0) por una Gaussiana

$$\psi(x,0) = Ae^{-\frac{x^2}{4\epsilon^2}} \tag{1}$$

(a) Normalizar $\psi(x,0)$.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \mid \psi(x,0) \mid^{2} = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx A^{2} e^{-\frac{x^{2}}{2\epsilon^{2}}} = 1$$

$$A^{2} \epsilon \sqrt{2\pi} = 1$$
(2)

Por lo tanto $A=(2\pi\epsilon^2)^{-1/4}$, lo que deja

$$\psi(x,0) = \frac{1}{(2\pi\epsilon^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{4\epsilon^2}} \tag{3}$$

(b) Calcular el producto de incertidumbres de posición (Δx) y momentum lineal (Δp) a t=0 y verificar que satisface la relación de incertidumbre de Heisenberg como una igualdad.

$$(\Delta x)^{2} = \langle x^{2} \rangle - \langle x \rangle^{2}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx x^{2} |\psi(x,0)|^{2} - \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx x |\psi(x,0)|^{2}\right)^{2}$$

$$= \epsilon^{2} - 0$$
(4)

en donde se ha empleado el resultado $\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-\frac{x^2}{2\epsilon^2}} = \sqrt{2\pi}\epsilon^3$. Se obtiene $\Delta x = \epsilon$.

Para calcular la incertidumbre en momentum lineal lo mejor es expresar la función de onda en representación p

$$\psi(p,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx \psi(x,0) e^{-\frac{ipx}{\hbar}}$$

$$= \sqrt[4]{\frac{2\epsilon^2}{\pi\hbar^2}} e^{-\frac{p^2\epsilon^2}{\hbar^2}}$$
(5)

Entonces

$$(\Delta p)^{2} = \langle p^{2} \rangle - \langle p \rangle^{2}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dp p^{2} |\psi(p, 0)|^{2} - \left(\int_{-\infty}^{\infty} dp p |\psi(p, 0)|^{2} \right)^{2}$$

$$= \frac{\hbar^{2}}{4\epsilon^{2}} - 0$$
(6)

Por lo tanto $\Delta p = \frac{\hbar}{2\epsilon}$. El producto de incertidumbres resulta ser $\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$, lo mínimo de acuerdo a Heisenberg.

(c) Suponiendo que la partícula es LIBRE (energía potencial nula) calcular la función de onda en representación p al tiempo t. Demostrar que la incertidumbre en p, Δp , no cambia con el tiempo.

La ecuación de Schrödinger de una partícula libre en representación p es

$$i\hbar \frac{\partial \psi(p,t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(p,t)$$

$$= \frac{p^2}{2m}\psi(p,t)$$
(7)

Esta es una ecuación diferencial muy sencilla de primer orden en t con solución

$$\psi(p,t) = \psi(p,0)e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t} \tag{8}$$

De esta expresión para $\psi(p,t)$ se aprecia que el tiempo sólo interviene en el factor de fase global $e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}$. Por lo tanto al calcular la incertidumbre Δp , como en la Ec.(6), se obtiene que el tiempo desaparece y en consecuencia el valor $\Delta p = \frac{\hbar}{2\epsilon}$ se mantiene constante en el tiempo.

(d) Encuentre la función de onda en representación x al tiempo t. Calcule la incertidumbre en x como función del tiempo. Usando MATHEMATICA grafique la densidad de probabilidad $\mathcal{P}(x,t) = |\psi(x,t)|^2$ para 5 instantes equidistantes en tiempo. Qué observa?

Hemos obtenido

$$\psi(p,t) = \psi(p,0)e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}
= \sqrt[4]{\frac{2\epsilon^2}{\pi\hbar^2}}e^{-\frac{p^2\epsilon^2}{\hbar^2}}e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}$$
(9)

Para encontrar $\psi(x,t)$ hacemos transformada inversa de Fourier de la expresión anterior para $\psi(p,t)$. Resulta

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \psi(p,t) e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt[4]{\frac{2\epsilon^2}{\pi\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{-\frac{p^2\epsilon^2}{\hbar^2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t} e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

$$= \sqrt[4]{\frac{2}{\pi}} \frac{\sqrt{m\epsilon}}{\sqrt{i\hbar t + 2m\epsilon^2}} e^{-\frac{mx^2}{2(i\hbar t + 2m\epsilon^2)}}$$
(10)

Esta última integral se puede hacer en MATHEMATICA o analíticamente por integración en un contorno apropiado en el plano complejo. Para la distribución de probabilidad en x, t, $\mathcal{P}(x,t) = |\psi(x,t)|^2$, obtenemos

$$\mathcal{P}(x,t) = |\psi(x,t)|^2 = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{m\epsilon}{\sqrt{\hbar^2 t^2 + 4m^2 \epsilon^4}} e^{-\frac{2m^2 \epsilon^2 x^2}{\hbar^2 t^2 + 4m^2 \epsilon^4}}$$
(11)

que resulta ser una función Gaussiana con un ancho que crece con el tiempo (la altura disminuye con t para mantener la normalización). Esto se va a ver reflejado en un aumento con t de la incertidumbre en x

$$(\Delta x)^{2}(t) = \langle x^{2} \rangle (t) - \langle x \rangle (t)^{2}$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx x^{2} |\psi(x,t)|^{2} - (\int_{-\infty}^{\infty} dx x |\psi(x,t)|^{2})^{2}$$

$$= (\epsilon^{2} + \frac{\hbar^{2} t^{2}}{4m^{2} \epsilon^{2}}) - 0$$
(12)

Finalmente,

$$\Delta x(t) = \sqrt{\epsilon^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \epsilon^2}} \tag{13}$$

A tiempos muy cortos la incertidumbre en x se mantiene prácticamente constante $\Delta x(t) \sim \epsilon$, mientras que a tiempos muy largos $\Delta x(t) \sim t$.

- 2. Una partícula confinada en un anillo de circunferencia L y en ausencia de potencial tiene funciones de onda estacionarias relativamente simples. Represente la posición a lo largo del anillo por x, de tal forma que x y x + L indican el mismo punto.
 - (a) Encuentre el conjunto completo de funciones estacionarias $\psi_n(x)$ y sus energías correspondientes, E_n . Será conveniente dejar el índice n correr en pasos enteros entre $-\infty$ y $+\infty$, con E_n aumentando a medida que |n| aumenta. Demuestre explícitamente que el conjunto de las $\{\psi_n(x)\}$ es un conjunto ortonormal.

No hay término de energía potencial, V(x) = 0. La ecuación de valores y vectores propios para el Hamiltoniano es en este caso (en representación x)

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \tag{14}$$

y debe ser resuelta con condiciones de frontera

$$\psi(0) = \psi(L)$$
 , $\frac{d\psi(x)}{dx}|_{x=0} = \frac{d\psi(x)}{dx}|_{x=L}$ (15)

La solución general de la Ec.(14) tiene la forma

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{16}$$

con $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$. Las condiciones de frontera en la Ec.(15) son equivalentes y dan

$$e^{ikL} = 1 \implies kL = 2n\pi \implies k_n = \frac{2n\pi}{L}$$
 (17)

donde n sólo puede tomar valores enteros y 0. Como los valores de k_n están cuantizados así será también para los valores de la energía que resultan ser

$$E_n = \frac{2n^2\pi^2\hbar^2}{mL^2} \tag{18}$$

Se aprecia que cada nivel de energía con $n \neq 0$ es doblemente degenerado: $n \neq -n$ corresponden a la misma energía. Por lo tanto la función de onda estacionaria asociada al estado con energía E_n es la superposición general

$$\psi_n(x) = Ae^{ik_n x} + Be^{-ik_n x} = A\phi_n(x) + B\phi_{-n}(x) \quad , \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$
 (19)

donde

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{i2n\pi x}{L}} \quad , \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$$
 (20)

Los coeficientes A y B quedan determinados por la normalización de $\psi_n(x)$. Ahora hay que demostrar que estas funciones $\phi_n(x)$ son ortonormales

$$\int_{0}^{L} dx \, \phi_{n}^{*}(x) \phi_{n}(x) = \int_{0}^{L} dx \, \frac{1}{\sqrt{L}} e^{-\frac{i2n\pi x}{L}} \frac{1}{\sqrt{L}} e^{\frac{i2n\pi x}{L}}$$

$$= \frac{1}{L} \int_{0}^{L} dx \, e^{-\frac{i2(n-m)\pi x}{L}}$$

$$= \delta_{m,n} \tag{21}$$

lo que inmediatamente asegura que las funciones $\psi_n(x)$ $(n \ge 0)$ son también ortonormales.

(b) Un operador que da información sobre en cuál mitad del anillo se encuentra la partícula es $\hat{C} = \cos(2\pi \hat{x}/L)$. Demostrar que $<\hat{C}>=0$ en cualquier estado $\psi_n(x)$. Por qué?. Encuentre una combinación lineal de dos $\psi_n(x)$ para la cual $<\hat{C}>>0$ y evalúelo.

En cualquier estado $\phi_n(x)$ se tiene

$$\langle C \rangle_n = \int_0^L dx \cos(\frac{2\pi x}{L}) |\phi_n(x)|^2$$
$$= \frac{1}{L} \int_0^L dx \cos(\frac{2\pi x}{L})$$
$$= 0 \tag{22}$$

dado que en uno de estos estados la probabilidad $|\phi_n(x)|^2$ es independiente de x. Considere la siguiente superposición NO-estacionaria

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_0(x) + \phi_1(x))$$

$$= \sqrt{\frac{1}{2L}} (1 + e^{i\frac{2\pi x}{L}})$$
(23)

En este estado

$$<\hat{C}> = \int_{0}^{L} dx \cos(\frac{2\pi x}{L}) |\Psi(x)|^{2}$$

 $= \int_{0}^{L} dx \cos(\frac{2\pi x}{L}) \frac{1}{2L} 2\cos^{2}(\frac{\pi x}{L})$
 $= \frac{1}{4}$ (24)

3. Considere una partícula confinada en un pozo infinito de potencial (1-dimensión) entre x = 0 y = x = a, con energías E_n y funciones de onda estacionarias $\psi_n(x)$.

(a) Cuál de los siguientes operadores: \hat{X} , \hat{P}_x , \hat{P}_x^2 tiene como funciones propias a las $\psi_n(x)$?. Explique.

El operador posición \hat{X} no tiene como funciones propias las $\psi_n(x)$. Hay por lo menos dos formas de justificarlo: (i) En representación x las funciones propias de \hat{X} son deltas de Dirac $\langle x \mid x' \rangle = \delta(x-x')$ (ver Cohen-Tannoudji et al., capítulo II, E.1.c). Estas funciones son bien distintas a las $\psi_n(x) \sim \text{sen}(\frac{n\pi x}{a})$. (ii) Al aplicar \hat{X} sobre una $\psi_n(x)$, el resultado es $\sim x \text{sen}(\frac{n\pi x}{a})$ que no es de la forma $\text{sen}(\frac{n'\pi x}{a})$ para ningún n'.

Para el operador posición \hat{P}_x sus funciones propias (expresadas en la representación x) son $\sim e^{ipx/\hbar}$ (ver Cohen-Tannoudji et al., capítulo II, E.1.c) que no corresponden a ninguna de las $\psi_n(x)$.

Las $\psi_n(x)$ SI SON funciones propias de \hat{P}_x^2 como se puede verificar fácilmente en representación x

$$\hat{P}_x^2 \operatorname{sen}(\frac{n\pi x}{a}) = -\hbar^2 \frac{d^2 \operatorname{sen}(\frac{n\pi x}{a})}{dx^2} = (\frac{\hbar n\pi}{a})^2 \operatorname{sen}(\frac{n\pi x}{a})$$
 (25)

con valor propio $(\frac{\hbar n\pi}{a})^2$.

(b) Calcule las incertidumbres en posición y momentum lineal en un estado estacionario cualquiera $\psi_n(x)$.

Valor medio de la posición

$$\langle x \rangle = \int_0^a dx \, \psi_n^*(x) \, x \, \psi_n(x) = \frac{2}{a} \int_0^a dx \, x \, \text{sen}^2(\frac{n\pi x}{a}) = \frac{a}{2}$$
 (26)

Valor medio de la posición al cuadrado

$$\langle x^2 \rangle = \int_0^a dx \, \psi_n^*(x) \, x^2 \, \psi_n(x) = \frac{2}{a} \int_0^a dx \, x^2 \, \text{sen}^2(\frac{n\pi x}{a}) = \frac{a^2}{3} - \frac{a^2}{2n^2\pi^2}$$
 (27)

La incertidumbre en posición es entonces

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = a\sqrt{\frac{1}{12} - \frac{1}{2n^2\pi^2}}$$
 (28)

Valor medio del momentum lineal

$$\langle p \rangle = \int_0^a dx \, \psi_n^*(x) \, \hat{P}_x \, \psi_n(x)$$

$$= \frac{2}{a} \int_0^a dx \, \text{sen}(\frac{n\pi x}{a}) \left[-i\hbar \frac{d}{dx} \text{sen}(\frac{n\pi x}{a}) \right]$$

$$= -i\hbar \frac{2}{a} \frac{n\pi}{a} \int_0^a dx \, \text{sen}(\frac{n\pi x}{a}) \cos(\frac{n\pi x}{a})$$

$$= 0$$
(29)

Valor medio del momentum lineal al cuadrado

$$\langle p^{2} \rangle = \int_{0}^{a} dx \, \psi_{n}^{*}(x) \hat{P}_{x}^{2} \, \psi_{n}(x)$$

$$= \frac{2}{a} \int_{0}^{a} dx \, \operatorname{sen}(\frac{n\pi x}{a}) \left[-\hbar^{2} \frac{d^{2}}{dx^{2}} \, \operatorname{sen}(\frac{n\pi x}{a}) \right]$$

$$= \hbar^{2} \frac{2}{a} \left(\frac{n\pi}{a} \right)^{2} \int_{0}^{a} dx \, \operatorname{sen}^{2}(\frac{n\pi x}{a})$$

$$= \left(\frac{n\pi \hbar}{a} \right)^{2}$$

$$(30)$$

La incertidumbre en momentum lineal es entonces

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \frac{n\pi\hbar}{a} \tag{31}$$

(c) Para una partícula clásica con rapidez distinta de cero en la misma situación, cuál es la posición promedio y la incertidumbre en posición si se realiza una serie de observaciones a distintos tiempos?. Compare estos resultados con los del caso cuántico obtenidos en (b). Existe algún caso límte donde estos coincidan?.

Recuerde que fuerza es el gradiente de la energía potencial. Dentro del pozo no hay energía potencial, por tanto la partícula está libre. El sistema es conservativo, por lo tanto al chocar con un extremo del pozo la rapidez se mantiene constante. Por lo tanto clásicamente la partícula se mueve con rapidez constante en el pozo, de donde se concluye que empleará el mismo tiempo en recorrer idénticos intervalos espaciales. Entonces la densidad de probabilidad clásica (ya normalizada) de encontrar la partícula en cualquier x es constante, $\mathcal{P}_{cl}(x) = 1/a$. El valor medio clásico de la posición es

$$\langle x \rangle_{cl} = \int_0^a dx \mathcal{P}_{cl}(x) x = \frac{a}{2}$$
 (32)

idéntico al resultado cuántico en un estado estacionario.

El valor medio clásico de la posición al cuadrado es

$$\langle x^2 \rangle_{cl} = \int_0^a dx \mathcal{P}_{cl}(x) x^2 = \frac{a^2}{3}$$
 (33)

La incertidumbre clásica en posición es entonces

$$\Delta x_{cl} = \sqrt{\langle x^2 \rangle_{cl} - \langle x \rangle_{cl}^2} = a\sqrt{\frac{1}{12}}$$
(34)

Comparando con la Ec.(28), se ve que los resultados cuánticos y clásicos para la incertidumbre en posición coinciden en el límite de grandes números cuánticos n ("principio" de correspondencia de Bohr).

4. Considere los estados ligados (E < 0) de una partícula en el potencial

$$V(x) = -\alpha[\delta(x-b) + \delta(x+b)]$$
(35)

con $\alpha > 0$. Defina $\kappa = \sqrt{\frac{-2mE}{\hbar^2}} \ y \ \gamma = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$.

(a) Por la aplicación de exigencias de continuidad en la función de onda en todas partes y discontinuidad en sus derivadas en $x = \pm b$, encuentre una relación entre $\frac{\kappa}{\gamma}$ y $e^{-\kappa b}$ que debe ser satisfecha por cualquier función de onda estacionaria para esta partícula.

Soluciones generales a la ecuación de valores propios del Hamiltoniano en las tres regiones de interés son

$$\psi_{I}(x) = A_{1}e^{\kappa x} + B_{1}e^{-\kappa x} , \quad -\infty < x < -b
\psi_{II}(x) = A_{2}e^{\kappa x} + B_{2}e^{-\kappa x} , \quad -b < x < b
\psi_{III}(x) = A_{3}e^{\kappa x} + B_{3}e^{-\kappa x} , \quad b < x < \infty$$
(36)

Para garantizar que la función de onda global sea normalizable se debe tener que $B_1 = 0$ y $A_3 = 0$, en las expresiones anteriores.

Exigir continuidad de la función de onda en $x = \mp b$

$$\psi_{I}(-b) = \psi_{II}(-b) \implies A_{1}e^{-\kappa b} = A_{2}e^{-\kappa b} + B_{2}e^{\kappa b}$$

$$\psi_{II}(b) = \psi_{III}(b) \implies A_{2}e^{\kappa b} + B_{2}e^{-\kappa b} = B_{3}e^{-\kappa x}$$
(37)

La presencia de las singularidades de los potenciales de Dirac en $x = \mp b$ implica que deben existir saltos (discontinuidades) en las derivadas de la función de onda estacionaria en $x = \mp b$

$$\psi'_{II}(-b) - \psi'_{I}(-b) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^{2}}\psi_{I}(-b) \implies A_{2}e^{-\kappa b}\kappa - B_{2}e^{\kappa b}\kappa - A_{1}e^{-\kappa b}\kappa = -2\gamma A_{1}e^{-\kappa b}$$

$$\psi'_{III}(b) - \psi'_{II}(b) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^{2}}\psi_{III}(b) \implies -B_{3}e^{-\kappa b}\kappa - A_{2}e^{\kappa b}\kappa + B_{2}e^{-\kappa b}\kappa = -2\gamma B_{3}e^{-\kappa b}$$
(38)

Tenemos entonces cuatro incógnitas A_1, A_2, B_2 y B_3 , en las cuatro ecuaciones algebraicas homogéneas Ecs.(37) y (38). Soluciones no triviales sólo se pueden esperar cuando el determinante de ese sistema de ecuaciones sea 0. Al desarrollar ese determinante e igualarlo a 0 se obtiene

$$\frac{\kappa}{\gamma} = 1 \pm e^{-2\kappa b} \tag{39}$$

(b) Demuestre que las funciones de onda estacionarias pueden ser clasificadas de acuerdo a su simetría bajo la reflexión $x \longrightarrow -x$. Cuál es la simetría del estado fundamental?.

Tres de las incógnitas anteriores pueden ser expresadas en términos de la cuarta, por ejemplo en términos de B_2 . La función de onda que resulta en cada una de las tres regiones se puede escribir

$$\psi_{I}(x) = \frac{\kappa}{\gamma} e^{2\kappa b} B_{2} e^{\kappa x}$$

$$\psi_{II}(x) = \left(\frac{\kappa}{\gamma} - 1\right) e^{2\kappa b} B_{2} e^{\kappa x} + B_{2} e^{-\kappa x}$$

$$\psi_{III}(x) = \left(\left(\frac{\kappa}{\gamma} - 1\right) e^{4\kappa b} + 1\right) B_{2} e^{-\kappa x}$$
(40)

donde finalmente B_2 queda determinada por la condición de normalzación de la función de onda en todo el espacio. De acuerdo con la condición en Ec.(39) vemos que si allí se escoge el valor de κ/γ con el signo + y se lleva a las Ecs.(40) se obtienen funciones de onda simétricas bajo la reflexión $x \longrightarrow -x$, es decir $\psi_I(x) = \psi_{III}(-x)$ y $\psi_{II}(x) = \psi_{II}(-x)$. Por el contrario si se hubiera escogido el signo – para κ/γ , se obtienen funciones de onda anti-simétricas bajo la reflexión $x \longrightarrow -x$, es decir $\psi_I(x) = -\psi_{III}(-x)$ y $\psi_{II}(x) = -\psi_{II}(-x)$.

Como se tiene

$$E = -\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} \tag{41}$$

el estado fundamental, el estado de más baja energía, corresponde al máximo valor de κ . Por lo tanto, se ve de la Ec.(39) que este valor se encuentra con el signo +. Por lo tanto el estado fundamental siempre ha de ser simétrico.

(c) Resuelva la ecuación obtenida en (a) gráficamente (use MATHEMATICA) y determine cuántos estados ligados existen. Demuestre que este número depende de qué tan lejos estén las dos deltas. Cúal es el valor crítico de b que separa estos dos regímenes?.

La recta κ/γ siempre cortará a la curva $1+e^{-2\kappa b}$ en un valor κ_0 dando una función de onda simétrica. Como se dijo antes, ésta será la función de onda del estado fundamental con energía $E_{FUND}=-\frac{\hbar^2\kappa_0^2}{2m}$.

La recta κ/γ sólo cortará a la curva $1-e^{-2\kappa b}$ si la pendiente de κ/γ es menor que la pendiente de $1-e^{-2\kappa b}$ en $\kappa=0$, es decir si $1/\gamma<2b$ o en forma equivalente si $b>\frac{\hbar^2}{2m\alpha}$.

En conclusión, existirán dos estados ligados si $b > \frac{\hbar^2}{2m\alpha}$ y sólo uno cuando $b \leq \frac{\hbar^2}{2m\alpha}$. El valor crítico es $b_c = \frac{\hbar^2}{2m\alpha}$.