

Tema 5

Problemas

Alfonso V. Ramallo

[1] Una partícula que se mueve en el plano xy tiene la siguiente función de onda:

$$\psi(x, y, t) = \frac{\sqrt{2}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \cos(3x) e^{-4iy - \frac{5}{2}it} .$$

Si medimos el momento \vec{p} y la energía E de esta partícula, ¿ qué valores obtendríamos?.

Solucion

Expresemos la función de onda en términos de exponenciales complejas:

$$\psi(x, y, t) = \frac{1}{\sqrt{2}(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left[e^{3ix - 4iy - \frac{5}{2}it} + e^{-3ix - 4iy - \frac{5}{2}it} \right] \equiv \psi_1(x, y, t) + \psi_2(x, y, t) .$$

Estas exponenciales complejas son ondas planas con valor bien definido de la energía y el momento. Efectivamente, según la ecuación de Schrödinger:

$$H\psi = i\hbar \partial_t \psi = \frac{5\hbar}{2} \psi .$$

Es decir:

$$\text{energía} = \frac{5\hbar}{2}$$

Por otra parte si hacemos actuar el operador $\vec{P} = -i\hbar\nabla$ sobre $\psi_{1,2}$ obtenemos:

$$\vec{P}\psi_{1,2} = -i\hbar(\partial_x, \partial_y, \partial_z)\psi_{1,2} = (\pm 3\hbar, -4\hbar, 0)\psi_{1,2} ,$$

lo que implica que los dos posibles valores de \vec{p} son:

$$\vec{p} = (\pm 3\hbar, -4\hbar, 0)$$

[2] Considérese la función de onda

$$\psi(x) = A e^{-B(x-C)^2 + iDx},$$

donde A, B, C, D son constantes reales.

a) Normalízese la función de onda.

b) Calcúlese $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$, Δx , Δp , $\langle xp \rangle$, $\langle px \rangle$, $\langle xp + px \rangle$.

c) Obtengase la función de onda en la representación- p

Solucion

En este ejercicio necesitaremos las siguientes integrales gaussianas:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx x e^{-ax^2} = 0, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 e^{-ax^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{2a^{\frac{3}{2}}}.$$

La segunda de estas integrales se anula debido al carácter impar del integrando, mientras que la última integral se puede obtener a partir de la primera de ellas derivándola respecto a a .

a) Normalicemos la función de onda:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) \psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx A^2 e^{-2B(x-C)^2} = A^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-2Bx^2},$$

donde en el último paso hemos hecho el cambio de variable $x \rightarrow x - C$. Así pues:

$$\langle \psi | \psi \rangle = A^2 \sqrt{\frac{\pi}{2B}},$$

y la condición $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ implica que:

$$A^2 = \sqrt{\frac{2B}{\pi}} \implies A = \left(\frac{2B}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}}.$$

Entonces, la función de onda normalizada es:

$$\psi(x) = \left(\frac{2B}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-B(x-C)^2 + iDx}$$

b) El valor medio de la coordenada x es:

$$\langle x \rangle = \langle \psi | x | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) x \psi(x) = \left(\frac{2B}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x e^{-2B(x-C)^2} .$$

Hagamos en la ultima de estas integrales en cambio de variable $\bar{x} = x - C$. Entonces:

$$\langle x \rangle = \left(\frac{2B}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{x} (\bar{x} + C) e^{-2B\bar{x}^2} = \left(\frac{2B}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} C \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{x} e^{-2B\bar{x}^2} ,$$

donde hemos tenido en cuenta que la parte impar del integrando no contribuye a la integral. Efectuando la integral gaussiana, obtenemos:

$$\boxed{\langle x \rangle = C}$$

Calculemos ahora $\langle x^2 \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \left(\frac{2B}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^2 e^{-2B(x-C)^2} = \left(\frac{2B}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{x} (\bar{x} + C)^2 e^{-2B\bar{x}^2} = \\ &= \left(\frac{2B}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{x} (\bar{x}^2 + 2\bar{x}C + C^2) e^{-2B\bar{x}^2} . \end{aligned}$$

Usando de nuevo el valor de las integrales gaussianas, obtenemos:

$$\langle x^2 \rangle = \left(\frac{2B}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \left[\frac{\sqrt{\pi}}{2(2B)^{\frac{3}{2}}} + C^2 \left(\frac{\pi}{2B} \right)^{\frac{1}{2}} \right] .$$

Simplificando, llegamos a:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{4B} + C^2 .$$

Asi pues:

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{1}{4B} .$$

Entonces:

$$\boxed{\Delta x = \frac{1}{2\sqrt{B}}}$$

Calculemos a continuacion el valor esperado del momento p :

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) P \psi(x) = \left(\frac{2B}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-B(x-C)^2 - iDx} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) e^{-B(x-C)^2 + iDx} = \\ &= -i\hbar \left(\frac{2B}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-2B(x-C)^2} (-2B(x-C) + iD) = \\ &= \hbar D \left(\frac{2B}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-2B(x-C)^2} = \hbar D , \end{aligned}$$

donde, en el ultimo paso hemos tenido en cuenta que $\langle x - C \rangle = 0$. Es decir, el valor medio de p vale:

$$\boxed{\langle p \rangle = \hbar D}$$

De forma similar:

$$\langle p^2 \rangle = \left(\frac{2B}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-B(x-C)^2 - iDx} (-i\hbar)^2 \frac{d^2}{dx^2} e^{-B(x-C)^2 + iDx} .$$

Tengamos ahora en cuenta que:

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} e^{-B(x-C)^2 + iDx} &= \frac{d}{dx} \left[[-2B(x-C) + iD] e^{-B(x-C)^2 + iDx} \right] = \\ &= \left[-2B + [-2B(x-C) + iD]^2 \right] e^{-B(x-C)^2 + iDx} , \end{aligned}$$

que implica que:

$$\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \left(\frac{2B}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-2B(x-C)^2} \left[-2B + 4B^2(x-C)^2 - D^2 - 2iBD(x-C) \right] .$$

Tengamos ahora en cuenta, de nuevo, que $\langle x - C \rangle = 0$. Entonces:

$$\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \left[-2B + 4B^2 \langle (x-C)^2 \rangle - D^2 \right] .$$

Ahora bien:

$$\langle (x-C)^2 \rangle = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = (\Delta x)^2 = \frac{1}{4B} .$$

Por lo tanto:

$$\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \left[-2B + 4B^2 \frac{1}{4B} - D^2 \right] .$$

Simplificando, obtenemos:

$$\boxed{\langle p^2 \rangle = \hbar^2 (B + D^2)}$$

La incertidumbre al cuadrado de p es pues:

$$(\Delta p)^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \hbar^2 (B + D^2) - \hbar^2 D^2 = \hbar^2 B .$$

Entonces:

$$\boxed{\Delta p = \hbar \sqrt{B}}$$

Por consiguiente:

$$\Delta x \Delta p = \frac{1}{2\sqrt{B}} \hbar \sqrt{B} = \frac{\hbar}{2} ,$$

es decir en este estado se satura la desigualdad de Heisenberg.

Calculemos ahora $\langle xp \rangle$:

$$\begin{aligned}\langle xp \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi^*(x) x P \psi(x) = -i\hbar \left(\frac{2B}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-B(x-C)^2 - iDx} x \frac{d}{dx} e^{-B(x-C)^2 + iDx} = \\ &= -i\hbar \left(\frac{2B}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-2B(x-C)^2} x [-2B(x-C) + iD] .\end{aligned}$$

Este resultado puede escribirse en terminos de $\langle x \rangle$ y $\langle x^2 \rangle$:

$$\langle xp \rangle = -i\hbar [-2B\langle x^2 \rangle + (2BC + iD)\langle x \rangle] .$$

Recordando ahora que $\langle x^2 \rangle = \frac{1}{2B} + C^2$ y que $\langle x \rangle = C$, llegamos a:

$$\langle xp \rangle = -i\hbar \left[-2B\left(\frac{1}{2B} + C^2\right) + (2BC + iD)C \right] .$$

Simplificando esta expresion obtenemos:

$$\boxed{\langle xp \rangle = \hbar DC + \frac{i\hbar}{2} = \langle x \rangle \langle p \rangle + \frac{i\hbar}{2}}$$

Observemos que $\langle xp \rangle$ no es real, debido a que el operador XP no es hermitico. En efecto, se verifica facilmente que $(XP)^\dagger = PX$ y esto no implica que XP sea hermitico debido a la no conmutatividad de X y P . Por otra parte, para calcular $\langle px \rangle$ necesitamos conocer:

$$PX\psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} [x e^{-B(x-C)^2 + iDx}] = -i\hbar [1 + x(-2B(x-C) + iD)] e^{-B(x-C)^2 + iDx} .$$

Comparando este resultado con el obtenido en el calculo de $\langle xp \rangle$, concluimos que:

$$\langle px \rangle = -i\hbar + \langle xp \rangle = -i\hbar + \hbar DC + \frac{i\hbar}{2} = \hbar DC - \frac{i\hbar}{2} .$$

Es decir:

$$\boxed{\langle xp \rangle + \langle px \rangle = 2\hbar DC = 2\langle x \rangle \langle p \rangle}$$

que es real, como corresponde al hecho que $XP + PX$ es un operador hermitico.

c) La funcion de onda en la representacion- p es:

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar} px} \psi(x) .$$

En nuestro caso esta expresion general se convierte en:

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{2B}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{i}{\hbar} px} e^{-B(x-C)^2 + iDx} .$$

Para calcular esta integral hagamos el cambio de variable $\bar{x} = x - C$. Entonces:

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \left(\frac{2B}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{i(D-\frac{p}{\hbar})C} \int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{x} e^{i(D-\frac{p}{\hbar})\bar{x}-B\bar{x}^2} .$$

Tengamos ahora en cuenta que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{ikx-a^2x^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{a} e^{-\frac{k^2}{4a^2}} .$$

Aplicando esta ultima formula con $a = \sqrt{B}$ y $k = D - \frac{p}{\hbar}$, obtenemos:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\bar{x} e^{i(D-\frac{p}{\hbar})\bar{x}-B\bar{x}^2} = \frac{\sqrt{\pi}}{\sqrt{B}} e^{-\frac{(D-\frac{p}{\hbar})^2}{4B}} ,$$

y la funcion de onda en la representacion- p es:

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}(2\pi B)^{\frac{1}{4}}} e^{-\frac{(p-\hbar D)^2}{4\hbar^2 B} - \frac{iC}{\hbar}(p-\hbar D)}$$

Observemos que esta funcion de onda es una gaussiana centrada en $p = \hbar D$. En general una gaussiana en la variable y del tipo $N e^{-a^2(y-b)^2}$ esta centrada en $y = b$ y tiene como valor medion $\langle y \rangle = b$ y como dispersion $\Delta y = \frac{1}{2\sqrt{a}}$. Aplicando este resultado a $\tilde{\psi}(p)$ es facil concluir que $\langle p \rangle = \hbar D$ y que $\Delta p = \hbar\sqrt{B}$, de acuerdo con el calculo hecho de estas cantidades en la representacion de posicion.

[3] Sea la función de onda asociada a una función $\phi(\vec{k})$ arbitraria:

$$\phi(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-i\hbar k^2 t/(2m)} \phi(\vec{k}).$$

a) Demuéstrese que es una solución a la ecuación de Schrodinger de una partícula libre.

b) Considérese el caso $\phi(\vec{k}) = N e^{-\alpha(\vec{k}-\vec{k}_0)^2/2}$. Calcúlese $\phi(\vec{r}, t)$. Compruébese que se trata de un paquete de ondas con centro en $\vec{r}_0 = \hbar\vec{k}_0 t/m$. Estúdiase la evolución con el tiempo de $\Delta\vec{r}$ y $\Delta\vec{p}$.

Solucion

a) Calculemos las derivadas temporales y espaciales de $\phi(\vec{r}, t)$:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} \left[-\frac{i\hbar k^2}{2m} \right] e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{-i\hbar k^2 t / (2m)} \phi(\vec{k}),$$

$$\nabla^2 \phi = \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} (-k^2) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{-i\hbar k^2 t / (2m)} \phi(\vec{k}).$$

Entonces:

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi = \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} \left[i\hbar \left(-\frac{i\hbar k^2}{2m} \right) - \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \right] e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{-i\hbar k^2 t / (2m)} \phi(\vec{k}) = 0.$$

Es decir:

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \phi,$$

que es la ecuación de Schrödinger para la partícula libre que queremos comprobar.

b) Tomamos ahora como función $\phi(\vec{k})$ la siguiente:

$$\phi(\vec{k}) = N e^{-\frac{\alpha}{2} (\vec{k} - \vec{k}_0)^2},$$

siendo \vec{k}_0 un vector constante y $\alpha, N \in \mathbb{R}$. La función $\phi(\vec{r}, t)$ es:

$$\phi(\vec{r}, t) = N \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{-i\hbar k^2 t / (2m)} e^{-\frac{\alpha}{2} (\vec{k} - \vec{k}_0)^2}.$$

Tratemos de completar cuadrados en el argumento de la exponencial, es decir busquemos dos números complejos A y C y un vector \vec{B} que verifiquen:

$$i\vec{k} \cdot \vec{r} - \frac{i\hbar k^2}{2m} t - \frac{\alpha}{2} (\vec{k} - \vec{k}_0)^2 = -A(\vec{k} - \vec{B})^2 + C.$$

Desarrollando los cuadrados en los dos miembros de esta última expresión, obtenemos:

$$i\vec{k} \cdot \vec{r} - \frac{i\hbar k^2}{2m} t - \frac{\alpha}{2} (k^2 + k_0^2 - 2\vec{k} \cdot \vec{k}_0) = -A(k^2 + B^2 - 2\vec{k} \cdot \vec{B}) + C.$$

Igualando los términos con k^2 de ambos miembros, obtenemos el valor de A :

$$A = \frac{1}{2} \left(\alpha + i \frac{\hbar t}{m} \right).$$

Igualando los términos lineales en \vec{k} , llegamos a:

$$2A\vec{B} = i\vec{r} + \alpha\vec{k}_0 \quad \implies \quad \vec{B} = \frac{1}{2A} (i\vec{r} + \alpha\vec{k}_0).$$

Finalmente, de los terminos independientes de k deducimos:

$$-A\vec{B} + C = -\frac{\alpha}{2}k_0^2 \quad \Longrightarrow \quad C = -\frac{\alpha}{2}k_0^2 + \frac{(i\vec{r} + \alpha\vec{k}_0)^2}{4A}.$$

Teniendo en cuenta estos resultados, podemos escribir:

$$\phi(\vec{r}, t) = N e^C \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} e^{-A(\vec{k}-\vec{B})^2}.$$

En esta integral podemos hacer el cambio de variable $\vec{k} \rightarrow \vec{k} + \vec{B}$ y usar el resultado de la integral gaussiana tridimensional:

$$\int d^3\vec{k} e^{-Ak^2} = \left[\frac{\pi}{A}\right]^{\frac{3}{2}}.$$

Entonces $\phi(\vec{r}, t)$ toma la forma:

$$\phi(\vec{r}, t) = \frac{N e^C}{(2\pi)^{3/2}} \left[\frac{\pi}{A}\right]^{\frac{3}{2}}.$$

Reescribamos C teniendo en cuenta la expresion de A :

$$\begin{aligned} C &= -\frac{\alpha}{2}k_0^2 + \frac{1}{2A} \left(-r^2 + \alpha^2 k_0^2 + 2i\alpha \vec{k}_0 \cdot \vec{r} \right) = \\ &= -\frac{1}{4A}r^2 + \frac{i\alpha}{2A} \vec{k}_0 \cdot \vec{r} + \left(\frac{\alpha}{4A} - \frac{1}{2} \right) \alpha k_0^2. \end{aligned}$$

Puesto que:

$$\frac{\alpha}{4A} - \frac{1}{2} = \frac{1}{4A}(\alpha - 2A) = -\frac{1}{4A} \frac{i\hbar t}{m},$$

podemos escribir:

$$C = \frac{1}{4A} \left[-r^2 + 2i\alpha \vec{k}_0 \cdot \vec{r} - \frac{i\alpha \hbar t k_0^2}{m} \right].$$

Asi pues la funcion de onda $\phi(\vec{r}, t)$ puede escribirse como:

$$\boxed{\phi(\vec{r}, t) = \mathcal{N}(t) \exp \left[-\frac{r^2 - 2i\alpha \vec{k}_0 \cdot \vec{r}}{2\left(\alpha + \frac{i\hbar t}{m}\right)} \right]}$$

siendo $\mathcal{N}(t)$ la siguiente funcion compleja de t (y no de \vec{r}):

$$\mathcal{N}(t) = \frac{N}{\left(\alpha + \frac{i\hbar t}{m}\right)^{\frac{3}{2}}} \exp \left[-\frac{i\hbar t k_0^2}{2m\left(\alpha + \frac{i\hbar t}{m}\right)} \right].$$

Para obtener $\langle \vec{r} \rangle$ solo necesitamos saber la dependencia en \vec{r} de $\phi(\vec{r}, t)$. Dicha dependencia es gaussiana. Para poder estudiarla mejor definamos

$$\beta(t) \equiv \frac{1}{2\left(\alpha + \frac{i\hbar t}{m}\right)} = \beta_R(t) + i\beta_I(t) ,$$

siendo β_R y β_I reales e iguales a:

$$\beta_R = \frac{\alpha}{2\left(\alpha^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2}\right)} , \quad \beta_I = -\frac{\hbar t}{2m\left(\alpha^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2}\right)} .$$

El argumento de la exponencial gaussiana es $-\beta r^2 + 2i\beta\alpha\vec{k}_0 \cdot \vec{r}$, cuya parte real es:

$$\text{Re}\left(-\beta r^2 + 2i\beta\alpha\vec{k}_0 \cdot \vec{r}\right) = -\beta_R r^2 - 2\alpha\beta_I\vec{k}_0 \cdot \vec{r} .$$

Observemos que la parte imaginaria del argumento de la exponencial no contribuye a los valores medios porque se cancela al multiplicar la funcion de onda por su complejo-conjugada. Completemos cuadrados en esta ultima ecuacion y escribamos:

$$-\beta_R r^2 - 2\alpha\beta_I\vec{k}_0 \cdot \vec{r} = -\beta_R\left(\vec{r} + \frac{\alpha\beta_I}{\beta_R}\vec{k}_0\right)^2 + \Delta ,$$

donde Δ es independiente de \vec{r} . Despues de reescribir el exponente de esta manera, la funcion $\phi(\vec{r}, t)$ depende de \vec{r} en la forma:

$$\phi(\vec{r}, t) \sim e^{-\beta_R\left(\vec{r} + \frac{\alpha\beta_I}{\beta_R}\vec{k}_0\right)^2} ,$$

es decir $\phi(\vec{r}, t)$ es una funcion gaussiana de \vec{r} centrada en $\vec{r} = -\frac{\alpha\beta_I}{\beta_R}\vec{k}_0$, que es precisamente su valor medio:

$$\langle \vec{r} \rangle = -\frac{\alpha\beta_I}{\beta_R}\vec{k}_0$$

Usando los valores de β_I y β_R obtenidos mas arriba, podemos concluir que:

$$\langle \vec{r} \rangle = \frac{\hbar\vec{k}_0}{m} t$$

Esta posicion corresponde a un paquete de ondas que se mueve con velocidad constante e igual a:

$$\langle \vec{v} \rangle = \frac{\hbar\vec{k}_0}{m} .$$

A este paquete podemos atribuirle un momento:

$$\langle \vec{p} \rangle = m\langle \vec{v} \rangle = \hbar\vec{k}_0$$

Calculemos ahora $\langle \vec{r}^2 \rangle = \langle x^2 \rangle + \langle y^2 \rangle + \langle z^2 \rangle$ y la correspondiente dispersion $(\Delta \vec{r})^2 = \langle \vec{r}^2 \rangle - \langle \vec{r} \rangle^2$. Para ello tendríamos que hacer las integrales correspondientes a dichos promedios. Dado que la función de onda $\phi(\vec{r}, t)$ puede escribirse como producto de tres funciones que dependen de x , y y z , esta claro que

$$(\Delta \vec{r})^2 = (\Delta x)^2 + (\Delta y)^2 + (\Delta z)^2 ,$$

y que el cálculo de Δx , Δy y Δz se reduce al problema de calcular estas dispersiones en un sistema unidimensional. En dicho problema unidimensional hemos probado en el ejercicio [2] mas arriba que la dispersion esta relacionada con el coeficiente que multiplica al cuadrado de la coordenada en el exponente de la gaussiana. Asi pues:

$$\Delta x = \Delta y = \Delta z = \frac{1}{2\sqrt{\beta_R}} .$$

Es decir la dispersion de las coordenadas crece con el tiempo en la forma:

$$\Delta x = \Delta y = \Delta z = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\alpha + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 \alpha}}$$

Equivalentemente

$$|\Delta \vec{r}| = \sqrt{\frac{3}{2}} \sqrt{\alpha + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 \alpha}}$$

Estudiemos ahora el valor medio y la dispersion del momento. Dado que:

$$\vec{P} \phi(\vec{r}, t) = -i \hbar \vec{\nabla} \phi(\vec{r}, t) = \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} e^{-i\hbar k^2 t / (2m)} \hbar \vec{k} \phi(\vec{k}) ,$$

el momento esta realizado en las funciones $\phi(\vec{k})$ como la multiplicacion por $\hbar \vec{k}$. Entonces:

$$\langle \vec{p} \rangle = \hbar \langle \vec{k} \rangle .$$

Ahora bien, $\phi(\vec{k})$ es una función gaussiana centrada en $\vec{k} = \vec{k}_0$, que por lo tanto es tambien el valor medio de \vec{k} . Es decir $\langle \vec{k} \rangle = \vec{k}_0$ y:

$$\langle \vec{p} \rangle = \hbar \vec{k}_0$$

Observese que este valor coincide con el momento que hemos atribuido al paquete mas arriba. Por otra parte, puesto que:

$$\phi(\vec{k}) \sim e^{-\frac{\alpha}{2} ((k_x - k_{0,x})^2 + (k_y - k_{0,y})^2 + (k_z - k_{0,z})^2)} ,$$

las componentes de \vec{k} estan distribuidas por una función gaussiana con coeficiente $\alpha/2$. De los resultados del problema [2] se sigue que:

$$\Delta k_x = \Delta k_y = \Delta k_z = \frac{1}{2\sqrt{\frac{\alpha}{2}}} = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} .$$

Por lo tanto:

$$\Delta p_x = \Delta p_y = \Delta p_z = \frac{\hbar}{\sqrt{2\alpha}}$$

y, en consecuencia:

$$|\Delta \vec{p}| = \sqrt{\frac{3}{2\alpha}} \hbar$$

Ademas, de los resultados obtenidos se sigue que:

$$\Delta x \Delta p_x = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 \alpha^2}} .$$

Asi pues, si $t = 0$ se verifica $\Delta x \Delta p_x = \frac{\hbar}{2}$, es decir se satura la desigualdad de Heisenberg y para $t > 0$ el producto de las dispersiones crece con el tiempo.

[4] La función de onda de una partícula libre en el instante $t = 0$ es

$$\psi(x, 0) = N \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-|k|/k_0} e^{ikx},$$

donde N y k_0 son constantes.

- ¿Cuál es la probabilidad $P(p_1, 0)$ de que una medida del momento efectuada en $t = 0$ de como resultado un momento comprendido entre $-p_1$ y $+p_1$?
- Lo mismo para el instante t , $P(p_1, t)$.
- ¿Cuál es la forma del paquete de ondas en el instante $t = 0$? Calcúlese, en ese instante, el producto $\Delta x \Delta p$.

Solucion

Recordemos que la relacion entre las funciones en la representacion- x y en la representacion- p es

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

En nuestro caso, haciendo el cambio de variable $k = p/\hbar$, podemos escribir

$$\psi(x, 0) = \frac{N}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{-\frac{|p|}{\hbar k_0}} e^{\frac{i}{\hbar} p x} ,$$

y, tras comparar con la expresion general, obtenemos que $\tilde{\psi}(p, 0)$ es:

$$\tilde{\psi}(p, 0) = \frac{\sqrt{2\pi}}{\sqrt{\hbar}} N e^{-\frac{|p|}{\hbar k_0}} .$$

Normalicemos esta funcion de onda en el espacio de momentos:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \psi \rangle &= \frac{2\pi}{\hbar} |N|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{-\frac{2|p|}{\hbar k_0}} = \frac{4\pi}{\hbar} |N|^2 \int_0^{+\infty} dp e^{-\frac{2p}{\hbar k_0}} = \\ &= \frac{4\pi}{\hbar} |N|^2 \left(-\frac{\hbar k_0}{2} \right) e^{-\frac{2p}{\hbar k_0}} \Big|_{p=0}^{p=\infty} = 2\pi k_0 |N|^2 = 1 , \end{aligned}$$

que significa que podemos escoger la constante de normalizacion N como:

$$N = \frac{1}{\sqrt{2\pi k_0}} .$$

Entonces, la funcion de onda en el espacio de momentos a $t = 0$ es:

$$\tilde{\psi}(p, 0) = \frac{1}{\sqrt{\hbar k_0}} e^{-\frac{|p|}{\hbar k_0}} .$$

La probabilidad que nos piden es:

$$\begin{aligned} P(p_1, 0) &= \int_{-p_1}^{+p_1} |\tilde{\psi}(p)|^2 dp = \frac{1}{\hbar k_0} \int_{-p_1}^{+p_1} e^{-\frac{2|p|}{\hbar k_0}} dp = \frac{2}{\hbar k_0} \int_0^{p_1} e^{-\frac{2p}{\hbar k_0}} dp = \\ &= \frac{2}{\hbar k_0} \left(-\frac{\hbar k_0}{2} \right) e^{-\frac{2p}{\hbar k_0}} \Big|_{p=0}^{p=p_1} . \end{aligned}$$

Tomando los valores en los limites, obtenemos la probabilidad buscada:

$$P(p_1, 0) = 1 - e^{-\frac{2p_1}{\hbar k_0}}$$

b) Puesto que se trata de una partícula libre, su energía está relacionada con el momento como:

$$E(p) = \frac{p^2}{2m} .$$

En consecuencia, la función de onda en el espacio de momentos para un instante t arbitrario es:

$$\tilde{\psi}(p, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E(p)t} \tilde{\psi}(p, 0) ,$$

o, equivalentemente:

$$\tilde{\psi}(p, t) = \frac{1}{\sqrt{\hbar k_0}} e^{\frac{i p^2}{2m \hbar} t} e^{-\frac{|p|}{\hbar k_0}}$$

Entonces, la probabilidad para cualquier instante de tiempo t es:

$$P(p_1, t) = \int_{-p_1}^{+p_1} |\tilde{\psi}(p, t)|^2 dp = P(p_1, 0) = 1 - e^{-\frac{2p_1}{\hbar k_0}},$$

puesto que $|\tilde{\psi}(p, t)|^2 = |\tilde{\psi}(p, 0)|^2$.

c) Calculemos la funcion de onda en el espacio de posiciones en $t = 0$:

$$\begin{aligned} \psi(x, 0) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi k_0}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{-\frac{|k|}{k_0}} e^{ikx} = \frac{1}{\sqrt{2\pi k_0}} \left[\int_0^{+\infty} dk e^{k(-\frac{1}{k_0} + ix)} + \int_{-\infty}^0 dk e^{k(\frac{1}{k_0} + ix)} \right] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi k_0}} \left[\frac{1}{-\frac{1}{k_0} + ix} e^{k(-\frac{1}{k_0} + ix)} \Big|_{k=0}^{k=\infty} + \frac{1}{\frac{1}{k_0} + ix} e^{k(\frac{1}{k_0} + ix)} \Big|_{k=-\infty}^{k=0} \right] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi k_0}} \left[\frac{1}{\frac{1}{k_0} - ix} + \frac{1}{\frac{1}{k_0} + ix} \right] = \frac{1}{\sqrt{2\pi k_0}} \frac{\frac{2}{k_0}}{\frac{1}{k_0^2} + x^2}. \end{aligned}$$

Simplificando, obtenemos:

$$\boxed{\psi(x, 0) = \sqrt{\frac{2k_0}{\pi}} \frac{1}{1 + k_0^2 x^2}}$$

Observemos que $\psi(x, 0)$ tiene su maximo en $x = 0$ y cuando $x \rightarrow \pm\infty$ decae como x^{-2} . Calculemos a partir de esta funcion de onda en el espacio de posiciones los valores medios $\langle x \rangle$ y $\langle x^2 \rangle$:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x, 0)|^2 dx = \frac{2k_0}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{x}{(1 + k_0^2 x^2)^2} = 0,$$

puesto que el integrando es impar. De forma similar

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2k_0}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{x^2}{(1 + k_0^2 x^2)^2}.$$

En esta integral hagamos el cambio de variable $y = k_0 x$:

$$\langle x^2 \rangle = \frac{2k_0}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{k_0} \frac{\frac{y^2}{k_0^2}}{(1 + y^2)^2} = \frac{2}{\pi k_0^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dy \frac{y^2}{(1 + y^2)^2}.$$

Por medio del cambio trigonometrico $y = \tan \theta$ (o por medio del teorema del residuo) puede probarse facilmente que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dy \frac{y^2}{(1 + y^2)^2} = \frac{\pi}{2}.$$

Entonces:

$$\boxed{\langle x^2 \rangle = \frac{1}{k_0}} \quad \boxed{\Delta x = \frac{1}{k_0}}$$

De forma similar

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} p |\tilde{\psi}(p)|^2 dp = \frac{1}{\hbar k_0} \int_{-\infty}^{+\infty} p e^{-\frac{2p}{\hbar k_0}} dp = 0 ,$$

puesto que, de nuevo, el integrando es una función impar. Además

$$\langle p^2 \rangle = \frac{1}{\hbar k_0} \int_{-\infty}^{+\infty} p^2 e^{-\frac{2|p|}{\hbar k_0}} dp = \frac{2}{\hbar k_0} \int_0^{\infty} dp p^2 e^{-\frac{2p}{\hbar k_0}} .$$

Hagamos ahora el cambio de variable $u = \frac{2p}{\hbar k_0}$. Entonces:

$$dp p^2 = \left(\frac{\hbar k_0}{2} \right)^3 du u^2 ,$$

y entonces:

$$\langle p^2 \rangle = \frac{2}{\hbar k_0} \left(\frac{\hbar k_0}{2} \right)^3 \int_0^{\infty} du u^2 e^{-u} = \frac{(\hbar k_0)^2}{4} \Gamma(3) .$$

donde hemos tenido en cuenta que $\Gamma(n) = \int_0^{\infty} du u^{n-1} e^{-u}$. Puesto que $\Gamma(3) = 2!$, tenemos:

$$\boxed{\langle p^2 \rangle = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2}} \quad \boxed{\Delta p = \frac{\hbar k_0}{\sqrt{2}}}$$

Multiplicando los resultados obtenidos para Δx y Δp , tenemos:

$$\boxed{\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} = \sqrt{2} \frac{\hbar}{2}}$$

y por consiguiente se verifica la desigualdad de Heisenberg $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$.

[5] Sea $U(t, t')$ el operador de evolucion temporal de una particula. El propagador $K(\vec{x}, t|\vec{x}', t')$ se define como el siguiente elemento de matriz:

$$K(\vec{x}, t|\vec{x}', t') = \langle \vec{x}|U(t, t')|\vec{x}'\rangle \theta(t - t') ,$$

donde $\theta(t - t')$ es la funcion de Heaviside ($\theta(t) = 0$ si $t < 0$, $\theta(t) = 1$ si $t > 0$).

a) Demuestrese que la funcion de onda $\psi(\vec{x}, t)$ en el instante t se puede escribir en terminos de la funcion de onda en un instante anterior $t' \leq t$ en la forma:

$$\psi(\vec{x}, t) = \int d^3 \vec{x}' K(\vec{x}, t|\vec{x}', t') \psi(\vec{x}', t')$$

b) Supongase que el hamiltoniano H es independiente del tiempo. Obtengase una representacion del propagador en terminos de las autofunciones H .

c) La funcion de Green $G(\vec{x}, \vec{x}'; E)$ se define como la siguiente transformada de Fourier:

$$G(\vec{x}, \vec{x}'; E) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{\frac{iEt}{\hbar}} K(\vec{x}, t|\vec{x}', 0) .$$

Obtengase una representacion de esta funcion si el hamiltoniano H no depende de t .

Solucion

a) La evolucion temporal del vector de estado $|\psi(t)\rangle$ es:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t') |\psi(t')\rangle , \quad (t' \leq t) .$$

Multiplicando esta ecuacion por el bra $\langle \vec{x}|$, y usando que $\psi(\vec{x}, t) = \langle \vec{x}|\psi(t)\rangle$, obtenemos:

$$\psi(\vec{x}, t) = \langle \vec{x}|U(t, t')|\psi(t')\rangle .$$

Utilicemos ahora la formula de la resolucion de la unidad en la forma:

$$1 = \int d^3 \vec{x}' |\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'| .$$

Entonces:

$$\psi(\vec{x}, t) = \int d^3 \vec{x}' \langle \vec{x}|U(t, t')|\vec{x}'\rangle \langle \vec{x}'|\psi(t')\rangle = \int d^3 \vec{x}' K(\vec{x}, t|\vec{x}', t') \psi(\vec{x}', t') ,$$

donde hemos tenido en cuenta que $t' \leq t$. Observemos que, puesto que $U(t, t) = 1$, el propagador a tiempos iguales es:

$$K(\vec{x}, t | \vec{x}', t) = \langle \vec{x} | \vec{x}' \rangle = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') .$$

Entonces, la ecuacion que hemos demostrado se convierte en la identidad:

$$\psi(\vec{x}, t) = \int d^3 \vec{x}' \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \psi(\vec{x}', t) .$$

b) En este caso el operador de evolucion temporal depende solamente de la diferencia de tiempos $t - t'$ y esta dado por la exponencial:

$$U(t, t') = \exp \left[- \frac{i}{\hbar} H(t - t') \right] .$$

Por comodidad tomaremos $t' = 0$ y escribimos:

$$K(\vec{x}, t | \vec{x}', 0) \equiv K(\vec{x}, \vec{x}'; t) = \theta(t) \langle \vec{x} | e^{-\frac{iHt}{\hbar}} | \vec{x}' \rangle .$$

Sean $|\varphi_n\rangle$ los autovectores del hamiltoniano H ($H |\varphi_n\rangle = E_n |\varphi_n\rangle$). Por ser $\{|\varphi_n\rangle\}$ un conjunto completo de vectores ortonormales, se tiene:

$$1 = \sum_n |\varphi_n\rangle \langle \varphi_n| .$$

Entonces:

$$K(\vec{x}, \vec{x}'; t) = \theta(t) \sum_{n,m} \langle \vec{x} | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | e^{-\frac{iHt}{\hbar}} | \varphi_m \rangle \langle \varphi_m | \vec{x}' \rangle .$$

Puesto que:

$$\langle \varphi_n | e^{-\frac{iHt}{\hbar}} | \varphi_m \rangle = e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \delta_{nm} ,$$

y, dado que $\langle \vec{x} | \varphi_n \rangle = \varphi_n(\vec{x})$ son las autofunciones de H , obtenemos la representacion de $K(\vec{x}, \vec{x}'; t)$ buscada:

$$K(\vec{x}, \vec{x}'; t) = \theta(t) \sum_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \varphi_n(\vec{x}) \varphi_n^*(\vec{x}')$$

c) La funcion de Green es:

$$G(\vec{x}, \vec{x}'; E) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{\frac{iEt}{\hbar}} K(\vec{x}, \vec{x}'; t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_n \varphi_n(\vec{x}) \varphi_n^*(\vec{x}') \int_0^{\infty} dt e^{\frac{i(E-E_n)t}{\hbar}} ,$$

donde hemos utilizado la representacion de $K(\vec{x}, \vec{x}'; t)$ que hemos encontrado anteriormente. La intregal sobre t oscila en el infinito y no es convergente. Para hacerla convergente reemplazamos E por $E + i\epsilon$, siendo $\epsilon \rightarrow 0$ una constante muy pequeña

real y positiva. La integral resultando despues de esta substitucion la integral resultante es:

$$\int_0^\infty e^{\frac{i(E-E_n+i\epsilon)t}{\hbar}} = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{E-E_n+i\epsilon} e^{\frac{i(E-E_n+i\epsilon)t}{\hbar}} \Big|_{t=0}^{t=\infty} = -\frac{\hbar}{i} \frac{1}{E-E_n+i\epsilon} .$$

Entonces:

$$G(\vec{x}, \vec{x}'; E) = \sum_n \frac{\varphi_n(\vec{x}) \varphi_n^*(\vec{x}')}{E - E_n + i\epsilon}$$

La transformada de Fourier inversa es:

$$K(\vec{x}, \vec{x}'; t) = i \int \frac{dE}{2\pi} e^{-\frac{iEt}{\hbar}} G(\vec{x}, \vec{x}'; E) .$$

Sea $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_x^2 + V(\vec{x})$ el operador diferencial que corresponde al hamiltoniano en la representacion de posicion (en la variable \vec{x}). Puesto que:

$$(E - H) \varphi_n(\vec{x}) = (E - E_n) \varphi_n(\vec{x}) ,$$

podemos escribir:

$$(E - H) G(\vec{x}, \vec{x}'; E) = \sum_n \frac{E - E_n}{E - E_n + i\epsilon} \varphi_n(\vec{x}) \varphi_n^*(\vec{x}') .$$

En el segundo miembro de esta ultima expresion podemos tomar sin problemas $\epsilon = 0$. Obtenemos entonces:

$$(E - H) G(\vec{x}, \vec{x}'; E) = \sum_n \varphi_n(\vec{x}) \varphi_n^*(\vec{x}') .$$

Utilizando ahora la relacion de complitud de las autofunciones del hamiltoniano, llegamos a la ecuacion diferencial satisfecha por la funcion de Green:

$$(E - H) G(\vec{x}, \vec{x}'; E) = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}')$$

Por otra parte, puesto que $\langle \varphi_n | H | \varphi_m \rangle = E_n \delta_{mn}$, podemos poner $G(\vec{x}, \vec{x}'; E)$ en la forma:

$$G(\vec{x}, \vec{x}'; E) = \sum_n \langle \vec{x} | \varphi_n \rangle \frac{1}{E - E_n + i\epsilon} \langle \varphi_n | \vec{x}' \rangle = \sum_{n,m} \langle \vec{x} | \varphi_n \rangle \langle \varphi_n | \frac{1}{E - H + i\epsilon} | \varphi_m \rangle \langle \varphi_m | \vec{x}' \rangle ,$$

que, utilizando de nuevo la relacion de complitud, implica:

$$G(\vec{x}, \vec{x}'; E) = \langle \vec{x} | \frac{1}{E - H + i\epsilon} | \vec{x}' \rangle$$

Si definimos el operador resolvente como:

$$G(E) \equiv \frac{1}{E - H + i\epsilon} ,$$

entonces la funcion de Green es simplemente el elemento de matriz:

$$G(\vec{x}, \vec{x}' ; E) = \langle \vec{x} | G(E) | \vec{x}' \rangle .$$

[6] Calcúlese el propagador de una partícula libre que se mueve en una dimension.

Solucion

Queremos calcular:

$$K_0(\vec{x}, \vec{x}' ; t) = \theta(t) \langle x | e^{-\frac{iP^2 t}{2m\hbar}} | x' \rangle = \theta(t) \int_{-\infty}^{+\infty} dp \int_{-\infty}^{+\infty} dp' \langle x | p \rangle \langle p | e^{-\frac{iP^2 t}{2m\hbar}} | p' \rangle \langle p' | x' \rangle ,$$

donde P es el operador momento de la partícula. Teniendo en cuenta que:

$$\langle p | e^{-\frac{iP^2 t}{2m\hbar}} | p' \rangle = e^{-\frac{i p^2 t}{2m\hbar}} \delta(p - p') , \quad \langle x | p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p x} , \quad \langle p' | x' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} p' x'} ,$$

obtenemos:

$$K_0(\vec{x}, \vec{x}' ; t) = \theta(t) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i p^2 t}{2m\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p(x-x')} .$$

Completemos el cuadrado en el exponente de esta integral y escribamos

$$-\frac{i p^2 t}{2m\hbar} + \frac{i}{\hbar} p(x - x') = \alpha(p - A)^2 + B ,$$

con $\alpha = -\frac{it}{2m\hbar}$, siendo A y B dos constantes a determinar. Igualando los terminos con las mismas potencias de p en la expresion anterior, es facil probar que:

$$A = \frac{m}{t} (x - x') , \quad B = \frac{im}{2\hbar t} (x - x')^2 .$$

Entonces:

$$K_0(\vec{x}, \vec{x}' ; t) = \theta(t) \frac{e^{\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t}}}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{-\frac{i\hbar}{2m\hbar} (p-A)^2} .$$

Hagamos ahora el cambio de variable $p \rightarrow p - A$ y utilizemos el resultado de la integral gaussiana:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{-ap^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} .$$

Se obtiene:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{-\frac{i\hbar}{2m\hbar}(p-A)^2} = \sqrt{\frac{2\pi \hbar m}{it}} .$$

Por lo tanto, el propagador para la partícula libre es:

$$K_0(\vec{x}, \vec{x}'; t) = \theta(t) \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} e^{\frac{im(x-x')^2}{2\hbar t}}$$

[7] (La ecuación de Schrödinger en el espacio de momentos). Escribese la transformada de Fourier de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo. Utilízese para encontrar los niveles de energía para los estados ligados ($E < 0$) de una partícula unidimensional en el potencial:

$$V(x) = -\alpha \delta(x).$$

donde $\alpha > 0$ es una constante. Calcúlense también las funciones de onda correspondientes.

Solucion

En la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x) \right) \psi(x) = E \psi(x) ,$$

pongamos

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{\frac{i}{\hbar} px} \tilde{\psi}(p) .$$

Puesto que:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{\frac{i}{\hbar} px} \frac{p^2}{2m} \tilde{\psi}(p) ,$$

la ecuación de Schrödinger puede ponerse como:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{\frac{i}{\hbar} px} \left(\frac{p^2}{2m} - E \right) \tilde{\psi}(p) = -V(x) \psi(x) .$$

Multipliquemos esta ecuacion por $e^{-\frac{i}{\hbar} q x}$ e integremos para todo $x \in \mathbb{R}$. En el primer miembro tenemos que hacer la integral:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{\frac{i}{\hbar}(p-q)x} = 2\pi \hbar \delta(p-q) ,$$

y la ecuacion de Schrödinger se convierte en:

$$\left(\frac{q^2}{2m} - E \right) \tilde{\psi}(q) = - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{\sqrt{2\pi \hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} q x} V(x) \psi(x)$$

Tomemos ahora $V(x) = -\alpha \delta(x)$. El segundo miembro de esta ultima ecuacion es:

$$\frac{\alpha}{\sqrt{2\pi \hbar}} \psi(0) ,$$

y la ecuacion de Schrödinger es:

$$\left(\frac{q^2}{2m} - E \right) \tilde{\psi}(q) = \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi \hbar}} \psi(0) .$$

Entonces la funcion de onda en el espacio de momentos es:

$$\tilde{\psi}(q) = \frac{2m \alpha}{\sqrt{2\pi \hbar}} \frac{\psi(0)}{q^2 - 2m E}$$

Por otra parte, tomando $x = 0$ en la expresion que da ψ en funcion de $\tilde{\psi}$, obtenemos:

$$\psi(0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dq \tilde{\psi}(q) = \frac{m \alpha}{\pi \hbar} \psi(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{q^2 - 2m E} .$$

Eliminando $\psi(0)$, obtenemos la siguiente relacion de consistencia:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{q^2 - 2m E} = \frac{\pi \hbar}{m \alpha} .$$

Ahora bien, la integral del primer miembro se puede hacer por medio del teorema del residuo, usando un contorno que se cierra en el semiplano superior $\text{Im}(q) > 0$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{q^2 - 2m E} = 2\pi i \text{Res} \left(\frac{1}{q^2 - 2m E} ; +i\sqrt{-2m E} \right) .$$

Calculemos el residuo del segundo miembro en el polo simple $q = +i\sqrt{-2m E}$:

$$\text{Res} \left(\frac{1}{q^2 - 2m E} ; +i\sqrt{-2m E} \right) = \lim_{q \rightarrow +i\sqrt{-2m E}} \frac{q - i\sqrt{-2m E}}{q^2 - 2m E} = \frac{1}{2i \sqrt{-2m E}} .$$

Entonces:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{q^2 - 2mE} = \frac{\pi}{\sqrt{-2mE}},$$

y debe de verificarse que

$$\frac{\pi}{\sqrt{-2mE}} = \frac{\pi \hbar}{m \alpha},$$

lo que implica que la energia E del estado ligado debe de ser:

$$E = -\frac{\alpha^2 m}{2 \hbar^2}$$

Calculemos $\psi(x)$ haciendo la transformada de Fourier de $\tilde{\psi}(q)$:

$$\psi(x) = \frac{m\alpha}{\pi \hbar} \psi(0) \int_{-\infty}^{+\infty} dq \frac{e^{\frac{i}{\hbar} q x}}{q^2 - 2mE}.$$

Para hecer la integral sobre q aplicamos de nuevo el teorema del residuo a la funcion:

$$f(q) = \frac{e^{\frac{i}{\hbar} q x}}{q^2 - 2mE},$$

que tiene dos polos simples en $q = q_+ = i\sqrt{-2mE}$ y $q = q_- = -i\sqrt{-2mE}$. Puesto que el modulo de la exponencial es:

$$\left| e^{\frac{i}{\hbar} q x} \right| = e^{-\frac{\text{Im} q}{\hbar} x},$$

para poder cerrar el camino en el semiplano superior ($\text{Im} q \rightarrow +\infty$) debemos de tener $x > 0$, mientras que si $x < 0$ debemos de cerrar el camino en el semiplano inferior. Entonces:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dq f(q) = \begin{cases} 2\pi i \text{Res}(f; q_+) & \text{si } x > 0, \\ -2\pi i \text{Res}(f; q_-) & \text{si } x < 0, \end{cases}$$

donde hemos tenido en cuenta que para $x < 0$ el camino cerrado en el semiplano inferior se recorre en sentido negativo. Puesto que:

$$\text{Res}(f; q_{\pm}) = \frac{e^{\frac{i}{\hbar} q_{\pm} x}}{q_{\pm} - q_{\mp}} = \frac{e^{\mp \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} x}}{\pm 2i \sqrt{-2mE}},$$

se tiene:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dq f(q) = \frac{\pi}{\sqrt{-2mE}} e^{-\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar} |x|}.$$

Por lo tanto:

$$\psi(x) = \frac{m \alpha}{\hbar \sqrt{-2m E}} \psi(0) e^{-\frac{\sqrt{-2m E}}{\hbar} |x|} .$$

Tengamos ahora en cuenta el valor de la energía E encontrado mas arriba, que implica que:

$$\sqrt{-2m E} = \frac{\alpha m}{\hbar} , \quad \frac{m \alpha}{\hbar \sqrt{-2m E}} = 1 ,$$

y por consiguiente:

$$\psi(x) = \psi(0) e^{-\frac{m \alpha}{\hbar^2} |x|} .$$

Observemos que es consistente tomar $x = 0$ en esta ultima ecuacion. Determinemos ahora $\psi(0)$ imponiendo la condicion de normalizacion:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx |\psi(x)|^2 &= |\psi(0)|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\frac{2m\alpha}{\hbar^2} |x|} = 2 |\psi(0)|^2 \int_0^{\infty} dx e^{-\frac{2m\alpha}{\hbar^2} x} = \\ &= 2 |\psi(0)|^2 \left(-\frac{\hbar^2}{2m\alpha} \right) e^{-\frac{2m\alpha}{\hbar^2} x} \Big|_0^{\infty} = \frac{\hbar^2}{m\alpha} |\psi(0)|^2 = 1 . \end{aligned}$$

Por tanto podemos tomar:

$$\psi(0) = \sqrt{\frac{m \alpha}{\hbar^2}} ,$$

y la funcion de onda del estado ligado es:

$$\boxed{\psi(x) = \sqrt{\frac{m \alpha}{\hbar^2}} e^{-\frac{m \alpha}{\hbar^2} |x|}}$$

[8] El hamiltoniano de una partícula que se mueve en una dimension es:

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

siendo x y p los operadores posición y momento respectivamente. Calcúlese el doble conmutador:

$$[[H, x], x] .$$

Solucion

Los conmutadores canonicos son:

$$[x, p] = i\hbar , \quad [x, x] = 0 .$$

Por lo tanto

$$[H, x] = \frac{1}{2m} [p^2, x] = \frac{p}{m} [p, x] = -i\hbar \frac{p}{m} .$$

Entonces:

$$[[H, x], x] = -\frac{i\hbar}{m} [p, x] = -\frac{i\hbar}{m} (-i\hbar) .$$

y, finalmente, se tiene:

$$\boxed{[[H, x], x] = -\frac{\hbar^2}{m}}$$

[9] El hamiltoniano de un sistema unidimensional de una partícula es:

$$H = \frac{1}{2} P^2 + \frac{1}{2} X^2 ,$$

siendo X y P los operadores posición y momento respectivamente. Sea U el operador

$$U = e^{i\theta H} ,$$

siendo θ una constante real. Calcúlese:

a) $U P U^\dagger$

b) $U X U^\dagger$

Solucion

a) Apliquemos la fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff:

$$U P U^\dagger = e^{i\theta H} P e^{-i\theta H} = P + i\theta [H, P] + \frac{(i\theta)^2}{2} [H, [H, P]] + \dots .$$

Los tres primeros conmutadores iterados son:

$$[H, P] = \frac{1}{2} [X^2, P] = \frac{1}{2} 2X [X, P] = i\hbar X ,$$

$$[H, [H, P]] = i\hbar [H, X] = i\hbar \frac{1}{2} [P^2, X] = \hbar^2 P ,$$

$$[H, \overset{3}{\dots} [H, P]] = \hbar^2 [H, P] = i\hbar^3 X .$$

Por lo tanto:

$$\begin{aligned} U P U^\dagger &= P + i\theta i\hbar X - \frac{\theta^2}{2} \hbar^2 P - i \frac{\theta^3}{3!} i\hbar^3 X + \dots = \\ &= \left(1 - \frac{(\hbar\theta)^2}{2} + \dots\right) P - \left(\hbar\theta - \frac{(\hbar\theta)^3}{3!} + \dots\right) X . \end{aligned}$$

Las series que multiplican a P y a X son facilmente reconocibles como las de $\cos(\hbar\theta)$ y $\sin(\hbar\theta)$ respectivamente. Por lo tanto:

$$U P U^\dagger = \cos(\hbar\theta) P - \sin(\hbar\theta) X .$$

b) Procediendo de la misma manera:

$$U X U^\dagger = e^{i\theta H} X e^{-i\theta H} = X + i\theta [H, X] + \frac{(i\theta)^2}{2} [H, [H, X]] + \dots .$$

Los conmutadores iterados de H con X son:

$$[H, X] = \frac{1}{2} [P^2, X] = \frac{1}{2} 2P [P, X] = -i\hbar P ,$$

$$[H, [H, X]] = -i\hbar [H, P] = -i\hbar (i\hbar X) = \hbar^2 X ,$$

$$[H, \dots^3 [H, X]] = \hbar^2 [H, X] = \hbar^2 (-i\hbar P) = -i\hbar^3 P .$$

y entonces:

$$\begin{aligned} U X U^\dagger &= X + i\theta (-i\hbar) P - \frac{\theta^2}{2} \hbar^2 X - i \frac{\theta^3}{3!} (-i\hbar^3) P + \dots = \\ &= \left(1 - \frac{(\hbar\theta)^2}{2} + \dots\right) X + \left(\hbar\theta - \frac{(\hbar\theta)^3}{3!} + \dots\right) P . \end{aligned}$$

Tras sumar las series, obtenemos:

$$U X U^\dagger = \cos(\hbar\theta) X + \sin(\hbar\theta) P .$$

[10] En un sistema unidimensional de una partícula se define el operador:

$$D = \frac{1}{2} (X P + P X) ,$$

siendo X y P los operadores posición y momento respectivamente. A partir del operador D se define el operador:

$$S_\lambda = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \lambda D \right] ,$$

siendo λ una constante real. Calculense:

a) $S_\lambda^\dagger X S_\lambda$

b) $S_\lambda^\dagger P S_\lambda$

¿Que interpretación se puede dar de los operadores D y S_λ ?

Solucion

a) Tengamos en cuenta, en primer lugar, que D es un operador hermitico y por lo tanto

$$S_\lambda^\dagger = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \lambda D^\dagger \right] = \exp \left[\frac{i}{\hbar} \lambda D \right] .$$

Entonces:

$$\begin{aligned} S_\lambda^\dagger X S_\lambda &= \exp \left[\frac{i}{\hbar} \lambda D \right] X \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \lambda D \right] = \\ &= X + \frac{i}{\hbar} \lambda [D, X] + \frac{1}{2!} \left(\frac{i\lambda}{\hbar} \right)^2 [D, [D, X]] + \dots . \end{aligned}$$

Los primeros conmutadores iterados son:

$$[D, X] = \frac{1}{2} [XP + PX, X] = \frac{1}{2} X [P, X] + \frac{1}{2} [P, X] X = -i\hbar X ,$$

$$[D, [D, X]] = -i\hbar [D, X] = (-i\hbar)^2 X ,$$

y, en general:

$$[D, \overset{n}{\dots} [D, X]] = (-i\hbar)^n X .$$

Por lo tanto:

$$S_\lambda^\dagger X S_\lambda = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\lambda}{\hbar} \right)^n (-i\hbar)^n X = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} X .$$

Es decir:

$$S_\lambda^\dagger X S_\lambda = e^\lambda X .$$

b) Seguimos los mismos pasos que en el apartado a. En primer lugar escribimos:

$$\begin{aligned} S_\lambda^\dagger P S_\lambda &= \exp \left[\frac{i}{\hbar} \lambda D \right] P \exp \left[- \frac{i}{\hbar} \lambda D \right] = \\ &= P + \frac{i}{\hbar} \lambda [D, P] + \frac{1}{2!} \left(\frac{i\lambda}{\hbar} \right)^2 [D, [D, P]] + \dots . \end{aligned}$$

A continuacion calculamos los conmutadores iterados:

$$[D, X] = \frac{1}{2} [XP + PX, P] = \frac{1}{2} [X, P]P + \frac{1}{2} P[X, P] = i\hbar P ,$$

$$[D, [D, P]] = i\hbar [D, P] = (i\hbar)^2 P ,$$

cuya formula general es:

$$[D, \dots^n [D, P]] = (-i\hbar)^n P .$$

Substituyendo estos valores en la formula de Baker-Campbell-Hausdorff obtenemos:

$$S_\lambda^\dagger P S_\lambda = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\lambda}{\hbar} \right)^n (i\hbar)^n P = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\lambda)^n}{n!} P .$$

Es decir:

$$S_\lambda^\dagger P S_\lambda = e^{-\lambda} P .$$

A la vista de estos resultados esta claro que S_λ representa una dilatacion y que el operador D es el generador infinitesimal de la transformacion.