Introducción a la Física Cuántica
Tarea 4

A entregar: Viernes 12 de octubre de 2018

Prob. 9 La base del momento $\hat{p}$.

En clase discutimos que el momento, o cantidad de movimiento, de un electrón (o cualquier partícula), es una cantidad susceptible de ser medida. A dichas cantidades les llamamos *observables* y les adjudicamos un "operador" que actúa sobre las funciones de onda. Esto es, tanto el momento como la posición son observables con operadores $\hat{p}$ y $\hat{x}$, respectivamente, cuyas "acciones" son,

$$\begin{aligned} \hat{x}\,\psi(x) &= x\,\psi(x) \\ \hat{p}\,\psi(x) &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\,\psi(x) \end{aligned}$$

donde $\psi(x)$ es una función de onda arbitraria. Es decir, la operación de $\hat{x}$ es multiplicar por x, la de $\hat{p}$ derivar con respecto con x (multiplicando por un factor $\hbar/i$).

Suponiendo que $\psi(x)$ es una función de onda correcta; es decir, $\psi(x)$ es una función compleja, continua, simplemente valuada, tal que tanto su integral, como la de su módulo cuadrado existen, tenemos la interpretación que

$$\frac{1}{\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x')|^2dx'}|\psi(x)|^2dx = \begin{array}{c}\text{Probabilidad de hallar a } \hat{x} \text{ con valores} \\ \text{entre } x \text{ y } x+dx\text{, dado que el sistema} \\ \text{está en el estado } \psi(x)\end{array} \tag{1}$$

Si $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x')|^2dx' = 1$ podemos ignorar el denominador. La pregunta es: Dado que el estado es $\psi(x)$ ¿cuál es la probabilidad de hallar a $\hat{p}$ con valor entre p y $p+dp$? La "receta" es que primero debemos hallar los estados en lo que se tiene certeza el valor de $\hat{p}$ y luego proyectarlos sobre $\psi(x)$. Veamos.

Los estados con certeza de $\hat{p}$, llamados estados propios o "eigenestados", son aquellos $\phi_p(x)$ que cumplen,

$$\hat{p}\,\phi_p(x) = p\,\phi_p(x)$$

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\,\phi_p(x) \;=\; p\,\phi_p(x) \;\text{ para toda }\; p\in\mathbb{R} \tag{2}$$

y cuya solución es,

$$\phi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}. \tag{3}$$

a) Compruebe que $\phi_p(x)$ dado por (3) es solución a la ecuación (2).

b) Muestre que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi^*_{p'}(x)\,\phi_p(x)\,dx = \delta(p-p'). \tag{4}$$

Esta es la condición de ortonormalidad del conjunto de funciones propias $\phi_p(x)$.

Dado que si el sistema está en el estado $\phi_p(x)$ tenemos certeza que el momento es p, el procedimiento ahora es proyectar $\psi(x)$ sobre $\phi_p(x)$ para definir:

$$\tilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*_p(x)\,\psi(x)\,dx. \tag{5}$$

y, entonces, interpretamos:

$$|\tilde{\psi}(p)|^2 dp = \begin{array}{c}\text{Probabilidad de hallar a } \hat{p} \text{ con valores}\\ \text{entre } p \text{ y } p+dp\text{, dado que el sistema}\\ \text{está en el estado } \psi(x)\end{array} \tag{6}$$

donde hemos supuesto $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x')|^2dx' = 1$.

c) Muestre que

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{\psi}(p)|^2\,dp = 1 \tag{7}$$

Es decir, si $\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x')|^2dx' = 1$ entonces $\tilde{\psi}(p)$ también está normalizada.

d) Note que una vez que definimos $\tilde{\psi}(p)$, podemos usar tanto $\psi(x)$ como $\tilde{\psi}(p)$ como el *estado* del sistema. En un caso es la *representación* del estado en el espacio x y en otro en el espacio p. Muestre que dado $\tilde{\psi}(p)$, entonces podemos hallar $\psi(x)$ como,

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_p(x)\,\tilde{\psi}(p)\,dp. \tag{8}$$

Sugerencia: Use la definición de $\tilde{\psi}(p)$ dada arriba.

e) Muestre la interesante propiedad:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_p(x)\, \phi_p^*(x')\, dp = \delta(x - x'). \tag{9}$$

Veremos más adelante que esta es la condición de *completez* del conjunto de la funciones propias $\phi_p(x)$. Veremos que el conjunto de las $\phi_p(x)$ para toda p, es una base completa y ortonormal del espacio de Hilbert de todas las funciones de onda normalizables.

Prob. 10 El estado gaussiano de la partícula libre. Parte I

Suponga que al tiempo $t = 0$, se sabe que el estado de una partícula libre está dado por:

$$\psi(x) = \frac{1}{\mathcal{N}}\, e^{-(x-x_0)^2/4\Delta^2}. \tag{10}$$

a) Suponiendo que la función de onda está normalizada, es decir, imponiendo que $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$, encuentre el valor de $\mathcal{N}$.

b) Calcule el valor de expectación de $\hat{x}$ y de $\hat{p}$.

c) Encuentre la incertidumbre de $\hat{x}$ y de $\hat{p}$ y calcule su producto. Recuerde que la incertidumbre del operador $\hat{A}$, en un estado dado, se define como

$$\Delta A = \left(\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2\right)^{1/2}. \tag{11}$$

Prob. 11 El estado gaussiano de la partícula libre. Parte II

d) Calcule la amplitud de probabilidad en p, es decir, calcule $\tilde{\psi}(p)$ (definida en el Problema 10).

En clase mostramos que si la partícula es libre, es decir, que su energía es sólo energía cinética ($E_p = p^2/2m$), el estado al tiempo t es,

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(p^2/2m)t/\hbar}\, \phi_p(x)\, \tilde{\psi}(p)\, dp \tag{12}$$

e) Calcule la incertidumbre de x y de p y su producto al tiempo t, es decir, cuando el estado es $\psi(x,t)$. Compare con el inciso c) ... si quiere, haga una gráfica en *Mathematica*.

Sugerencia para los Probs. 10 y 11: No se intimide! ... sólo tiene que usar integrales gaussianas ... y cambios de variable (completando el cuadrado en el argumento de la gaussiana):

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-az^2} dz = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \tag{13}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} z\, e^{-az^2} dz = 0 \tag{14}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} z^2\, e^{-az^2} dz = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \tag{15}$$

Representaciones de la función de onda en los espacios de posición x y de momento p

Supongamos un sistema compuesto por una partícula de masa m que sólo puede moverse en 1 dimensión. Desde el punto de vista cuántico, los *estados* de la partícula están dados por funciones de onda $\psi(x)$, que son elementos del espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ de sistema.

Una "suposición" de la mecánica cuántica es que si conocemos la función de onda en un instante dado, es decir, su estado, dicha información es la *más completa* que podemos tener, en el sentido que nos permite calcular las probabilidades de las mediciones de *cualquier* propiedad física, que deseáramos conocer. Más adelante estudiaremos cómo se realiza dicho cálculo para una propiedad arbitraria. En esta tarea revisaremos el cálculo de las probabilidades de las mediciones de la posición x y del momento p.

A cada cantidad física medible le asignamos un operador (Hermitiano), tal que su acción sobre cualquier función de onda en $\mathcal{H}$ da lugar a otra función de onda en $\mathcal{H}$. Así, a la posición le asignamos $\hat{x}$ y al momento $\hat{p}$, con las siguientes acciones,

$$\hat{x}\,\psi(x) = x\,\psi(x) \quad \forall x \text{ y } \forall\psi(x) \in \mathcal{H} \tag{16}$$

$$\hat{p}\,\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\,\psi(x) \quad \forall x \text{ y } \forall\psi(x) \in \mathcal{H} \tag{17}$$

Sea $\psi(x)$ la función de onda en un instante dado. Su interpretación es:

- $|\psi(x)|^2\, dx$: Probabilidad de que, si el estado es $\psi(x)$ y medimos la posición $\hat{x}$, la hallemos con valores entre x y $x + dx$.

Desde el punto de vista estadístico, esto nos dice que podemos calcular el promedio de cualquier cantidad representada por un operador (Hermitiano) $\hat{f} = f(\hat{x}, \hat{p})$, donde la notación $f(\hat{x}, \hat{p})$ significa que es una función (común y corriente) de dos variables, y que la evaluamos en los operadores $\hat{x}$ y $\hat{p}$. De nuevo, en esta tarea nos concentraremos en las propiedades estadísticas de $\hat{x}$ y de $\hat{p}$ sólamente.

Entonces, por definición de promedio, el promedio de la posición $\hat{x}$ es,

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\,|\psi(x)|^2\, dx. \tag{18}$$

Prob 12. Promedio igual a valor de expectación

Considere la siguiente definición:

$$\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) \hat{A} \psi(x)\, dx, \tag{19}$$

donde $\hat{A}$ es un operador.

Muestre la siguiente igualdad:

$$\langle x \rangle = \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle. \tag{20}$$

Es decir, el promedio $\langle x \rangle$ es igual al valor de expectación $\langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle$. Muestre que esto se puede extender a cualquier potencia de $\hat{x}$, $\langle x^\alpha \rangle = \langle \psi | \hat{x}^\alpha | \psi \rangle$, con α arbitraria (entera o no), si definimos

$$\hat{x}^\alpha \psi(x) = x^\alpha \psi(x) \quad \forall \psi(x). \tag{21}$$

La pregunta ahora es ¿Cómo calculamos las propiedades estadísticas del momento $\hat{p}$? Una "receta" de la mecánica cuántica (verificada experimentalmente) es la siguiente:

I) Primero encuentre las funciones de onda que nos dan *certeza* del valor del momento, es decir, que nos dan probabilidad 1 de que el momento tenga un cierto valor p. Estas funciones de onda son la base, o conjunto completo y ortonormal de eigenfunciones, del momento $\hat{p}$, dadas por (vea las notas del curso, "Resumen-Mecanica-Cuantica.pdf"):

$$\phi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{ipx/\hbar} \tag{22}$$

con p el eigenvalor correspondiente a dicha función de onda, es decir, $\hat{p}\phi_p(x) = p\phi_p(x)$.

II) Proponga que $\psi(x)$ es una combinación lineal (o superposición) de los elementos $\phi_p(x)$ de la base de $\hat{p}$,

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p)\, \phi_p(x)\, dp \tag{23}$$

donde $\tilde{\psi}(p)$, para una p dada, es el coeficiente de la suma o integral correspondiente a la eigenfunción $\psi_p(x)$. Muestre que

$$\tilde{\psi}(p) = \langle \phi_p | \psi \rangle \tag{24}$$

es decir, $\tilde{\psi}(p)$ es la proyección de $\psi(x)$ sobre el elemento $\psi(x)$ ... tal como en cualquier espacio vectorial lineal!

III) Interpretación (verificada experimentalmente): La función $\tilde{\psi}(p)$ es tal que:

• $|\tilde{\psi}(p)|^2\, dp$: Probabilidad de que, si el estado es $\psi(x)$ y medimos el momento $\hat{p}$, lo hallemos con valores entre p y $p + dp$.

Dada esta interpretación podemos calcular el promedio de $\hat{p}$, estando el sistema en el estado $\psi(x)$:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p\, |\tilde{\psi}(p)|^2\, dp \tag{25}$$

Muestre, usando la ecuación anterior, que puede escribirse:

$$\begin{aligned}\langle p\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\, \psi(x) p\, dx \\ &= \langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle. \end{aligned} \tag{26}$$

Es decir, que el promedio del momento $\langle p\rangle$, estando el sistema en $\psi(x)$, es igual al valor de expectación de $\hat{p}$ en $\psi(x)$, $\langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle$.

Prob 13. $\psi(x)$ y $\tilde{\psi}(p)$ representan el mismo estado

Del análisis anterior se puede concluir que tanto $\psi(x)$ como $\tilde{\psi}(p)$ representan al mismo estado. Es decir, $\psi(x)$ es el estado en la representación de la posición, mientras que $\tilde{\psi}(p)$ es el estado en la representación del momento. Esto lo podemos ilustrar con las siguientes expresiones:

$$\langle x\rangle = \langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle \tag{27}$$

$$\langle p\rangle = \langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle \tag{28}$$

es decir, en estas expresiones no aparecen explícitamente ni $\psi(x)$ ni $\tilde{\psi}(p)$. Sin embargo, del problema anterior, podemos escribir, en la representación de $\psi(x)$,

$$\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, x\, \psi(x)\, dx \tag{29}$$

$$\langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\, \psi(x)\, dx \tag{30}$$

Empezando con las expresiones anteriores, muestre que los valores de expectación pueden escribirse como,

$$\langle\psi|\hat{x}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}^*(p)\, i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\, \tilde{\psi}(p)\, dp \tag{31}$$

$$\langle\psi|\hat{p}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}^*(p)\, p\, \tilde{\psi}(p)\, dp \tag{32}$$

Estas expresiones son los valores de expectación de $\hat{x}$ y $\hat{p}$ en la representación del momento.

Concluya, de las expresiones anteriores, que así como la acción de $\hat{x}$ y $\hat{p}$ sobre $\psi(x)$ son,

$$\hat{x}\,\psi(x) = x\,\psi(x) \tag{33}$$

$$\hat{p}\,\psi(x) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\,\psi(x) \tag{34}$$

las de $\hat{x}$ y $\hat{p}$ sobre $\tilde{\psi}(p)$ deben ser,

$$\hat{x}\,\tilde{\psi}(p) = i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\,\tilde{\psi}(p) \tag{35}$$

$$\hat{p}\,\tilde{\psi}(p) = p\,\tilde{\psi}(p). \tag{36}$$

... no hay nada que haga que una sea más fundamental que la otra: $\psi(x)$ y $\tilde{\psi}(p)$ representan, en distintos espacios, el mismo estado.

Prob 14. El conmutador de $\hat{x}$ y de $\hat{p}$

Recuerde que $\hat{x}$ y $\hat{p}$ son operadores en el espacio de Hilbert $\mathcal{H}$, es decir, "operan" o realizan alguna acción sobre las funciones de onda, como en el ejercicio anterior. Esto nos lleva a que el *orden* en el que actúan los operadores es crucial. Es decir, si $\hat{A}$ y $\hat{B}$ son dos operadores arbitrarios, en general, $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{B}$. Esto sugiere definir una operación llamada "conmutador" de la siguiente manera,

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{B}. \tag{37}$$

Si el conmutador es cero, entonces no importa el orden, si no es cero, sí importa. Más adelante analizaremos la trascendencia de este reultado: veremos que si dos operadores conmutan, las dos variables pueden medirse simultáneamente, mientras que si no conmutan no podemos medirlas simultáneamente. Este último resultado es la forma más fundamental de expresar el Principio de Incertidumbre.

En este problema calcularemos el valor del conmutador entre los operadores de posición $\hat{x}$ y de momento $\hat{p}$. Muestre que

$$\langle\psi|\,[\hat{x}, \hat{p}]\,|\psi\rangle = i\hbar \tag{38}$$

para cualquier estado $\psi(x)$ normalizado. Esto nos indica que podemos escribir

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \tag{39}$$

Es decir, $\hat{x}$ y $\hat{p}$ no conmutan, lo que implica que no podemos conocer o medir las dos cantidades simultáneamente ... pero ya lo sabíamos!: cuando hay certeza en el momento, hay completa incertidumbre en la posición y viceversa. Discutiremos este problema más a fondo durante el curso.