Introducción a la Física Cuántica
Tarea 5

A entregar: Miércoles 24 de octubre de 2018

Una partícula en una caja

En clase discutimos el problema de una partícula de masa m confinada en una caja unidimensional de paredes infinitamente rígidas. El Hamiltoniano de este modelo puede escribirse como,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \tag{1}$$

donde el potencial de la caja es

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad 0 < x < L \\ \infty & \text{si} \quad x \leq 0 \text{ y } x \geq L \end{cases} \tag{2}$$

En clase resolvimos el problema de eigenvalores de la energía, es decir, resolvimos

$$\begin{aligned} \hat{H}\,\Phi_n(x) &= E_n\,\Phi_n(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\Phi_n(x) + V(x)\Phi_n(x) &= E_n\,\Phi_n(x) \end{aligned} \tag{3}$$

y hallamos que las soluciones diferente de cero son,

$$\begin{aligned} \Phi_n(x) &= \sqrt{\frac{2}{L}}\,\sin\frac{n\pi x}{L} \\ E_n &= \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L}\right)^2 \end{aligned} \tag{4}$$

para $n = 1, 2, 3, \ldots, \infty$. La intepretación física de dichas funciones es que si el estado del sistema es función $\Phi_m(x)$, entonces tenemos certeza (es decir, probabilidad 1) de que el valor de la energía es E_m. Debido a que la energía sólo puede tomar uno de los valores discretos del conjunto $\{E_n, \forall n\}$, decimos que la "energía está cuantizada" (para este sistema). Es decir, cualquier otro valor de la energía, diferente del conjunto, tiene probabilidad cero.

El conjunto de las funciones $\{\Phi_n(x), \forall n\}$ obedece las dos siguientes propiedades:

$$\int_0^L \Phi_m^*(x)\Phi_n(x)\, dx = \delta_{mn} \quad \text{ortonormalidad} \tag{5}$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \Phi_n(x)\Phi_n^*(x') = \delta(x - x') \quad \text{completez} \tag{6}$$

Estas dos propiedades nos indican que el conjunto $\{\Phi_n(x), \forall n\}$ es una base completa y ortonormal del espacio del Hilbert de todas las funciones de onda $\psi(x)$, complejas, continuas y que obedecen la propiedad,

$$\int_0^L |\psi(x)|^2\, dx = 1. \tag{7}$$

NOTA: Todos los problemas subsequentes se refieren al problema de una partícula en una caja.

Prob 15. Otra vez una partícula en una caja

Resuelva el problema de una partícula de masa m en una caja,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \tag{8}$$

donde ahora el potencial de la caja es

$$V(x) = \left\{ \begin{array}{lll} 0 & \text{si} & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ \infty & \text{si} & x \leq -\frac{L}{2} \text{ y } x \geq +\frac{L}{2} \end{array} \right. \tag{9}$$

Es decir, encuentre las eigenfunciones y los eigenvalores de $\hat{H}$. Normalice las funciones de onda propias y muestre que los estados obtenidos son ortogonales. No necesita mostrar la completez, aunque lo animamos a que lo intente. Compare sus resultados con el caso en el que la caja está entre 0 y L. Comente.

Prob 16. Descomposición de cualquier función de onda en la base de la energía

Muestre que cualquier función de onda $\psi(x)$ en el espacio de Hilbert, es decir, que obedece (7), puede escribirse como,

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \, \Phi_n(x) \tag{10}$$

donde

$$a_n = \int_0^L \Phi_n^*(x)\psi(x)\, dx. \tag{11}$$

¿cuál es el significado físico de a_n?

Muestre que se obedece,

$$\sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 = 1. \tag{12}$$

Note que funciona también al revés: Sea un conjunto de números complejos arbitrarios $\{a_n, \forall n\}$ tales que obedecen (12) y sea $\psi(x)$ una función *definida* como la suma dada por la expresión (10). Entonces, $\psi(x)$ pertenece al espacio de Hilbert correspondiente y, por lo tanto, es una función de onda posible del sistema ... se acostumbra decir, en muchos textos, que (10) representa a $\psi(x)$ como una "superposición" de estados de la energía.

Prob 17. Un ejemplo de superposición

Considere la siguiente función de onda,

$$\psi(x) = \mathcal{N} \, \cos \frac{\alpha \pi x}{L} \tag{13}$$

donde α es un número real arbitrario. La función sólo está definida en el intervalo $0 \leq x \leq L$.

Imponiendo normalización, es decir, suponiendo que $\psi(x)$ obedece (7), encuentre el valor de la constante $\mathcal{N}$.

Escriba $\psi(x)$ como la superposición (10) y calcule los coeficientes a_n para toda n.

Suponiendo que $\alpha = 1.7$ haga una gráfica de $\psi(x)$. Sugerencia: use unidades $\hbar = 1$ y $L = 1$.

Defina la siguiente función

$$\psi_M(x) = \sum_{n=1}^{M} a_n \, \Phi_n(x). \tag{14}$$

Haga gráficas de $\psi_M(x)$ para $M = 10$, $M = 50$, $M = 100$ y $M = 1000$ (use *Mathematica*). Compare cada gráfica con la gráfica $\psi(x)$ ... y sorpréndase! note, sobre todo, que mientras que todas las funciones base $\Phi_n(x)$ son cero en $x = 0$ y $x = L$, $\psi(x) \neq 0$ en $x = 0$ y $x = L$! Es decir, aunque una por una de las funciones base se anula en los bordes, la suma infinita de ellas es capaz de reproducir *cualquier* función que obedezca (12). Esto es lo que quiere decir que la base es completa.

Prob 18. La base de la energía en la representación del momento

Las funciones de onda $\{\Phi_n(x), \forall n\}$ están en la representación de la posición $\hat{x}$. Es decir, si el estado es $\Phi_n(x)$ decimos que la probabilidad de hallar a la posición $\hat{x}$ con valores entre x y $x + dx$ es $|\Phi_n(x)|^2 dx$. Sin embargo, nos podemos preguntar, si el estado es $\Phi_n(x)$ ¿cuál es la probabilidad de hallar al momento $\hat{p}$ con valores entre p y $p + dp$? Sea $|\tilde{\Phi}_n(p)|^2 dp$ tal probabilidad. Muestre que la función $\tilde{\Phi}_n(p)$ está dada por:

$$\tilde{\Phi}_n(p) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{L}{\pi\hbar}} \left(\frac{e^{-i(\frac{pL}{\hbar} - m\pi)} - 1}{\frac{pL}{\hbar} - m\pi} - \frac{e^{-i(\frac{pL}{\hbar} + m\pi)} - 1}{\frac{pL}{\hbar} + m\pi} \right) \tag{15}$$

Haga una gráfica de $|\tilde{\Phi}_n(p)|^2$ para cada caso $n = 1, 2, 3$ y 4. Use unidades $\hbar = 1$, $L = 1$.

Hay un detalle técnico. Note que la función $\tilde{\Phi}_n(p)$ aparenta tener una divergencia para $p = \pm m\pi\hbar/L$. Muestre que no es el caso, es decir, muestre que es finita en esos valores. Sin embargo, dependiendo de como haga el cálculo de su gráfica, el programa que utilice (Python o Mathematica o C, etc) puede que le indique que tiene una "divergencia". Si este es el caso, no grafique los puntos $p = \pm m\pi\hbar/L$, solo puntos cercanos y use el valor analítico en esos puntos.

Observe con cuidado sus expresiones y sus gráficas. Note que el momento, en principio, puede tomar cualquier valor, aunque claramente los de probabilidad diferente de cero están distribuidos cerca de ciertos valores y de forma simétrica alrededor de $p = 0$. Note que para el estado base los valores más probables de $\hat{x}$ y $\hat{p}$ son $x = L/2$ y $p = 0$.

Prob 19. Valores de expectación e incertidumbres de la posición $\hat{x}$ y el momento $\hat{p}$ en estados de la energía

Suponga que el estado del sistema es uno con certeza de la energía, es decir, $\Phi_n(x)$. Calcule los valores correspondientes de $\langle \hat{x} \rangle$, $\langle \hat{x}^2 \rangle$, $\langle \hat{p} \rangle$ y $\langle \hat{p}^2 \rangle$. Use la definición de valor de expectación,

$$\langle \hat{A} \rangle = \int_0^L \Phi_n^*(x) \hat{A} \Phi_n(x)\, dx. \tag{16}$$

y use $\hat{p} = (\hbar/i) d/dx$.

Calcule las incertidumbres Δx y Δp, y su producto.

Comente sobre todos sus resultados.

Prob 20. La evolución temporal de los estados del sistema

Una de las razones fundamentales de conocer la base de la energía de cualquier sistema es que nos permite calcular, de manera relativamente simple, la evolución temporal de un estado arbitrario del sistema. Para repasar este punto, recuerde que dado un estado al tiempo t_0, digamos $\psi(x, t_0)$, su valor a cualquier tiempo $t > t_0$, $\psi(x, t)$, satisface la ecuación de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H}\, \psi(x, t). \tag{17}$$

Muestre que la solución $\psi(x, t)$ puede escribirse como,

$$\psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}\, a_n\, \Phi_n(x) \tag{18}$$

donde

$$a_n = \int_0^L \Phi_n^*(x)\psi(x,t_0)\, dx. \tag{19}$$

Muestre que el valor de expectación de la energía $\langle \hat{H} \rangle$ en el estado $\psi(x,t)$ no depende del tiempo, donde

$$\langle \hat{H} \rangle = \int_0^L \psi^*(x,t)\hat{H}\psi(x,t)\, dx. \tag{20}$$

En particular, si $\psi(x,t_0) = \Phi_m(x)$, para alguna m, entonces el valor de la energía es el mismo para toda t, E_m. Estas propiedades de los estados de la energía se resumen diciendo que dichos estados son *estacionarios* y es la manera "cuántica" de expresar la conservación de la energía.

Prob 21. Una consecuencia de la supersposición de estados

Suponga el siguiente estado en el tiempo $t = 0$,

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi_1(x) + \frac{1}{\sqrt{2}}\Phi_2(x) \tag{21}$$

Es una superposición de los estados 1 y 2.

Escriba una expresión para el estado al tiempo t, es decir, para $\psi(x,t)$.

Encuentre las probabilidades de hallar a $\hat{x}$ entre x y $x + dx$, y de hallar los valores E_n, para toda n, de la energía.

Calcule el valor de expectación de $\hat{H}$, de $\hat{x}$ y de $\hat{p}$, como función del tiempo. Comente.