Mecánica Cuántica I, 2014

Guía 2; Problemas 4 & 5

G.A. Raggio

Problema 4: El ejercicio está fallado; la “señal cuadrada” no tiene asociada ningún momento (no está en el dominio de definición de $\widehat{p}$.

Tener en cuenta que la señal cuadrada no está normalizada ya que

$$\int_{\mathbb{R}} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-a}^{a} dx = 2a \ .$$

El cálculo de la transformada de Fourier es inmediato una vez que uno se pone de acuerdo que es la transformada de Fourier. Siguiendo la convención y notación del teórico

$$\phi(k) := (2\pi)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}} e^{-ikx} \psi(x) dx = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \begin{cases} \dfrac{\sin(a(p_o - k))}{p_o - k} & , \quad k \neq p_o \\ a & , \quad k = p_o \end{cases} \ ;$$

que es una función continua con[1] $\lim_{k\to\pm\infty} \phi(k) = 0$; además ϕ es invariante ante reflexión en el punto $k = p_o$ vale decir $\phi(p_o + d) = \phi(p_o - d)$ para todo real d; y es integrable ya que –haciendo la transf. de variables $y := a(p_o - k)$– y usando la famosa integral $\int_0^\infty t^{-1} \sin(t)\, dt = \pi/2$

$$\int_{\mathbb{R}} \phi(k) dk = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_{\mathbb{R}} \frac{\sin(y)}{y} dy = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, 2 \int_0^\infty \frac{\sin(t)}{t} dt = \sqrt{2\pi} \ .$$

A tener en cuenta: no es necesariamente cierto que la transformada de Fourier de una función de módulo integrable (como ψ) sea de módulo integrable. De hecho $k \to |\phi(k)|$ no es integrable lo que se puede demostrar viendo que

$$\lim_{R\to\infty} \int_0^R \frac{|\sin(t)|}{t} dt = \infty \ ;$$

lo que se hace en el apéndice.

Ahora calculamos el valor esperado de la posición y su dispersión.

$$\langle \widehat{x} \rangle = \frac{\langle \psi, \widehat{x}\psi \rangle}{\|\psi\|^2} = \frac{1}{2a} \int_{-a}^{a} x\, dx = 0 \ ;$$

y

$$\langle \widehat{x}^2 \rangle = \frac{\langle \psi, \widehat{x}^2\psi \rangle}{\|\psi\|^2} = \frac{1}{2a} \int_{-a}^{a} x^2\, dx = a^2/3 \ ;$$

de modo que

$$\Delta x = a/\sqrt{3} \ .$$

Pero, la función ψ no es diferenciable en $x = \pm a$ y tampoco es absolutamente continua, vale decir no hay función g de modo que

$$\psi(x) = \psi(c) + \int_c^x g(t) dt$$

[1] Una propiedad general de las transformadas de Fourier de funciones de módulo integrable llamado Lema de Riemann-Lebesgue.

para algún c. De modo que $\widehat{p}\psi$ no está definida. Esto también se ve en la transformada de Fourier. Ya que

$$(\mathcal{F}\widehat{p}\psi)(k) = \hbar k \phi(k)$$

hay que ver si

$$k \to k^2|\phi(k)|^2 = \frac{2}{\pi}\,\frac{k^2 \sin(a(p_o-k))^2}{(p_o-k)^2}$$

es o no integrable. Y, claramente, no lo es[2]. No tiene sentido entonces el valor esperado de $\widehat{p}$ dentro del formalismo establecido ya que $\widehat{p}\psi$ no está definido.
Pero hay gente que insiste. ¿Que pasa si definimos (¿convenimos?) que

$$\langle \widehat{p} \rangle \overset{!}{=} \|\psi\|^{-2}\hbar \int_{\mathbb{R}} k|\phi(k)|^2 dk \ ?$$

Pues nada ya que, como se ve en el apéndice,

$$\lim_{R\to\infty} \int_0^R \frac{\sin(t)^2}{t}\, dt = \infty \ .$$

¡Y no me vengan con distribuciones! Pueden dar vuelta la cosa tantas veces como quieran y siempre estarán multiplicando distribuciones con soportes no disjuntos.

Problema 5: El problema no presenta mayores complicaciones usando la famosa fórmula integral:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{-\alpha t^2 + \beta t\right\} \,\mathrm{d}t = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \exp\left\{\frac{\beta^2}{4\alpha}\right\}, \quad Re(\alpha) > 0 \ ; \tag{1}$$

donde ha de tomarse la raíz de α que tiene parte real positiva. En lo que sigue –un lindo ejercicio del método de los residuos– demuestro esta fórmula que está en todas las tablas de integrales definidas (aunque a veces solo para el caso de α real y positivo).

Para ello considere el siguiente
Lema 1: Si $Re(\alpha) > 0$ entonces cualquiera sea el real v se tiene

$$\int e^{-\alpha x^2} dx = \int e^{-\alpha(x+iv)^2} dx$$

en el sentido que cualquiera de estas integrales existe como integral impropia de Riemann si y sólo si existe la otra y, en tal caso, son iguales.

<u>Demostración:</u> Sea $\alpha = a + ib$ con $a > 0$. La función $z \mapsto e^{-\alpha z^2}$ es entera y por lo tanto cualesquiera que sean $R_1, R_2 > 0$ se tiene –cuando $v > 0$–

$$0 = \int_{-R_1}^{R_2} e^{-\alpha x^2} dx + \int_{\{R_2+it:\, 0\le t\le v\}} e^{-\alpha(R_2+it)^2} i\, dt + \int_{R_2}^{-R_1} e^{-\alpha(x+iv)^2} dx$$
$$+ \int_{\{-R_1+it:\, v\ge t\ge 0\}} e^{-\alpha(-R_1+it)^2} i\, dt \ ;$$

La tercera integral es

$$\int_{R_2}^{-R_1} e^{-\alpha(x+iv)^2} dx = -\int_{-R_1}^{R_2} e^{-\alpha(x+iv)^2} dx \ .$$

[2] Vea el apéndice.

Y para las dos integrales sobre segmentos verticales se tiene (usando que la exponencial real es creciente):

$$\left|\int_{\{-R_1+it:\, v\geq t\geq 0\}} e^{-\alpha(-R_1+it)^2} i\, dt\right| \leq \int_0^{|v|} |e^{-\alpha(R_1^2-2iR_1t-t^2)}|\, dt$$

$$= \exp\{-aR_1^2\}\int_0^v e^{at^2-2bR_1t}\, dt \leq v\ \exp\{-aR_1^2+av^2-2R_1\min_{0\leq t\leq v}(bt)\}$$

$$\left|\int_{\{R_2+it:\, 0\leq t\leq v\}} e^{-\alpha(R_2+it)^2} i\, dt\right| \leq \int_0^{v} |e^{-\alpha(R_2^2+2iR_2t-t^2)}|\, dt$$

$$= \exp\{-aR_2^2\}\int_0^v e^{at^2+2bR_2t}\, dt \leq v\ \exp\{-aR_2^2+a|v|^2+2R_2\max_{0\leq t\leq v}(bt)\}.$$

Entonces

$$\lim_{R_1,R_2\to\infty}\int_{\{-R_1+it:\, v\geq t\geq 0\}} e^{-\alpha(-R_1+it)^2} i\, dt = \lim_{R_1,R_2\to\infty}\int_{\{R_2+it:\, 0\geq t\geq\}} e^{-\alpha(R_2+it)^2} i\, dt = 0\ ,$$

y por ende

$$\lim_{R_1,R_2\to\infty}\int_{-R_1}^{R_2} e^{-\alpha x^2} dx = \lim_{R_1,R_2\to\infty}\int_{-R_1}^{R_2} e^{-\alpha(x+iv)^2} dx\ .$$

El caso $v<0$ es análogo. □

Ahora,

$$\int_{-R_1}^{R_2} e^{-\alpha t^2+\beta t}\, dt = e^{\beta^2/4\alpha}\int_{-R_1}^{R_2} exp\left\{-\alpha\left(t+\frac{\beta\overline{\alpha}}{2|\alpha|^2}\right)^2\right\}\, dt$$

y con $u=Re(\beta\overline{\alpha}/2|\alpha|^2)$ y $v=Im(\beta\overline{\alpha}/2|\alpha|^2)$ tenemos

$$\int_{-R_1}^{R_2} e^{-\alpha t^2+\beta t}\, dt = e^{\beta^2/4\alpha}\int_{-R_1+u}^{R_2+u} e^{-\alpha(y+iv)^2}\, dy$$

y por el Lema

$$\lim_{R_1,R_2\to\infty}\int_{-R_1}^{R_2} e^{-\alpha t^2+\beta t}\, dt = e^{\beta^2/4\alpha}\lim_{R_1,R_2\to\infty}\int_{-R_1}^{R_2} e^{-\alpha t^2}\, dt\ ,$$

lo que reduce el cálculo al caso $\beta=0$ puramente cuadrático.

Hay ahora varias variantes para explorar y seguir. Una es considerar el caso α real y positivo[3] y luego argumentar que la integral deseada es una función analítica de α en el semiplano $\{Re(\alpha)>0\}$. Aquí se prefiere un método debido a Kneser[4] usando el Teorema de los residuos.

La figura 1 ilustra el método. Buscamos una función analítica f salvo en (finitos) polos de modo que al integrar sobre el camino cerrado dado por (el perímetro del) paralelepipedo P parametrizado por $R_1, R_2>0$ y el complejo $\zeta=u+iv$ se tenga que en

$$i2\pi\ \sigma(P)\sum_{\text{polos } z_j \text{ encerrados por } P} Res(f;z_j) = \int_P f(z)dz$$

[3]que se calcula por ejemplo exhibiendo el cuadrado de nuestra integral como integral sobre $\mathbb{R}^2$ de integrando $e^{-\alpha r^2}$ de modo que $\int_{\mathbb{R}^2} e^{-\alpha r^2}dxdy \propto 2\pi\int_0^\infty (d\, e^{-\alpha r^2}/dr)\, dr$; etc.

[4]H. Kneser: *Funktionentheorie*. Vandenhoeck & Ruprecht, 1958; R. Remmert: *Theory ofComplex Functions*. Springer-Verlag, 1991.

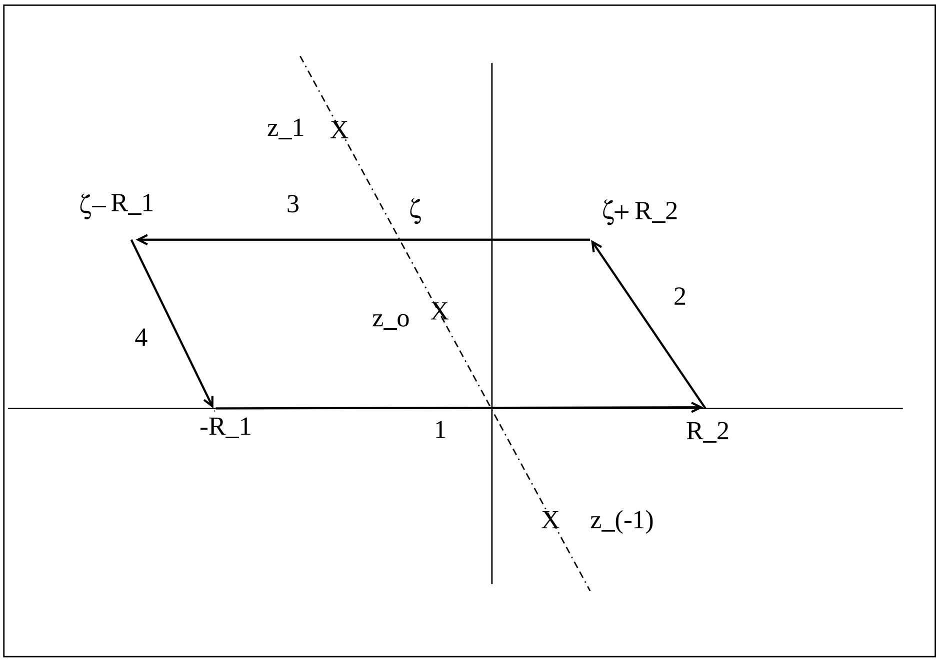

Figura 1: El paralelepípedo P definido por $R_1, R_2 > 0$ y $0 \neq \zeta \in \mathbb{C}$. Desconsidere la recta punteada en primera lectura.

$$= \int_1 f(z)dz + \int_2 f(z)dz + \int_3 f(z)dz + \int_4 f(z)dz \ ,$$

con

$$\int_1 f(z)dz = \int_{-R_1}^{R_2} f(x)dx \ , \quad \int_2 f(z)dz = \zeta \int_0^1 f(R_2 + t\zeta)dt$$

$$\int_3 f(z)dz = \int_{R_2+u}^{-R_1+u} f(x+iv)dx \ , \quad \int_4 f(z)dz = \zeta \int_1^0 f(-R_1 + t\zeta)dt \ ;$$

además

$$\lim_{R_1 \to \infty} \int_4 f(z)dz = \lim_{R_2 \to \infty} \int_2 f(z)dz = 0 \ , \tag{2}$$

y, ya que

$$\int_3 f(z)dz = \int_{R_2+u}^{-R_1+u} f(x+iv)dx = \int_{R_2}^{-R_1} f(t+u+iv)dt = -\int_{-R_1}^{R_2} f(x+\zeta)dx \ ,$$

también

$$\int_1 f(z)dz + \int_3 f(z)dz = \int_{-R_1}^{R_2} [f(x) - f(x+\zeta)]dx \stackrel{!}{=} \int_{-R_1}^{R_2} e^{-\alpha x^2} dx \ . \tag{3}$$

Aquí, $\sigma(P)$ tiene en cuenta la orientación de como se recorre el perímetro P, siendo $\sigma(P) = 1$ si $Im(\zeta) = v > 0$ (el caso de la figura 1) y $\sigma(P) = -1$ cuando $v < 0$.

Obviamente (3) se cumple si

$$f(z) - f(z+\zeta) = e^{-\alpha z^2} \ . \tag{4}$$

El "Ansatz"

$$f(z) = e^{-\alpha z^2}/g(z)$$

–donde los ceros de g serán los polos de f– tiene mucho de bueno pensando en (2). Con esta f obtenemos de (4) que

$$\frac{1}{g(z)} - \frac{e^{-2\alpha\zeta z - \alpha\zeta^2}}{g(z+\zeta)} = 1 \ ; \tag{5}$$

si ahora suponemos –siguiendo a Kneser– que g es periódica de período ζ, o sea

$$g(z) = g(z+\zeta) \ , \tag{6}$$

entonces (5) conduce a

$$g(z) = 1 - e^{-2\alpha\zeta z - \alpha\zeta^2}$$

y la condición de periodicidad (6) indica que

$$e^{-2\alpha\zeta^2} = 1 \ ;$$

que se cumple si[5]

$$\zeta^2 = -i\pi/\alpha \ , \tag{7}$$

que tiene dos raices distintas una de las cuales especificaremos más adelante llamandola por ahora ζ. Entonces, la función

$$f(z) = \frac{e^{-\alpha z^2}}{1 + e^{-2\alpha\zeta z}}$$

donde ζ cumple con (7), satisface (4) y a fortiori (3). Queda entonces por analizar la validez de (2) asi como los ceros del denominador g. Encaramos lo último primero.

Ya que $g(z) = 1 + e^{+i2\pi z/\zeta}$ por (7), tendremos $g(z) = 0$ si y sólo si $z = z_n := \zeta(n + 1/2)$ para algún $n \in \mathbb{Z}$. Como $g(z) = 1 + e^{-2\alpha\zeta(z-z_n)}e^{-2\alpha\zeta z_n} = 1 - e^{-2\alpha\zeta(z-z_n)}$, cada uno de estos ceros es simple. Es inmediato verificar –vea la figura 1 nuevamente– que no importa cuales sean los valores positivos de R_1 y R_2 el paralelepípedo en $\mathbb{C}$ de vértices R_2, $R_2 + \zeta$, $-R_1 + \zeta$, y $-R_1$ encierra uno y sólo uno de estos z_n que es $z_o = \zeta/2$. Por lo tanto el paralelepípedo amigo encierra solamente el polo simple z_o de f. El residuo correspondiente es –usando (7)–

$$\frac{e^{-\alpha z_o^2}}{2\alpha\zeta} = \frac{e^{i\pi/4}}{2\alpha\zeta} \ . \tag{8}$$

Para analizar (2) estudiamos la función f en los segmentos $\{\pm R + t\zeta : \ 0 \le t \le 1\}$. Allí tenemos

$$|\exp\{-\alpha(\pm R + t\zeta)^2\}| = \exp\{-Re(\alpha)[R^2 \pm Rtu + t^2(u^2 - v^2)] - Im(\alpha)[\mp 2Rtv - 2t^2uv]\} \ .$$

También $g(\pm R + t\zeta) = 1 + e^{i2\pi t}e^{\mp 2R\alpha\zeta}$ donde usamos (7) con lo cual

$$|g(\pm R + t\zeta)| \ge |1 - |e^{\mp 2R\alpha\zeta}|\ | = |1 - e^{\mp 2R Re(\alpha\zeta)}| \ .$$

Ahora,
Lema 2: $|1 - e^x| \ge 1 - e^{-|x|}$ para todo real x[6].

[5] Recordando que $\alpha \neq 0$ ya que $Re(\alpha) > 0$.
[6] Esto es falso para x complejo.

Demostración: Hay igualdad si $x \leq 0$. Cuando $x > 0$, $|1 - e^x| = e^x - 1$ y $e^x - 1 - (1 - e^{-x}) = 2(\cosh(x) - 1) =: d(x)$ y $d(0) = 0$ con $d'(x) = 2\sinh(x) \geq 0$.□

Y de aquí entonces

$$|g(\pm R + t\zeta)| \geq 1 - e^{-2R|Re(\alpha\zeta)|} \ .$$

Combinando esta información, tenemos

$$|g(\pm R + t\zeta)| \leq \frac{\exp\{-Re(\alpha)[R^2 \pm Rtu + t^2(u^2 - v^2)] - Im(\alpha)[\mp 2Rtv - 2t^2uv]\}}{1 - e^{-2R|Re(\alpha\zeta)|}}$$

siempre y cuando

$$Re(\alpha\zeta) \neq 0 \ ; \tag{9}$$

de donde concluimos –cuando $Re(\alpha) > 0$– que (2) se satisface.

Tenemos todo listo. Falta discutir la raíz de (7) que tomamos, verificar (9) y determinar el $\sigma(P)$ que corresponda.
Si γ denota el argumento principal de α, tenemos $-\pi/2 < \gamma < \pi/2$, y

$$\zeta_\pm = \pm\sqrt{\frac{\pi}{|\alpha|}}\ \exp\{-i(\pi + 2\gamma)/4\} \ .$$

Luego

$$Re(\alpha\zeta_\pm) = \pm\sqrt{\pi|\alpha|/2}\ \cos(\gamma/2) \ .$$

Como $-\pi/4 < \gamma/2 < \pi/4$, $\cos(\gamma/2) > 0$ con lo cual se satisface (9) y por ello (2). Además, $-(\pi + 2\gamma)/4 \in (0, -\pi/2)$ con lo cual ζ_+ está en el cuadrante $\{Re(z) > 0 \ , \ Im(z) < 0\}$ y $\sigma(P) = -1$ mientras que ζ_- está en el cuadrante $\{Re(z) < 0 \ , \ Im(z) > 0\}$ (la situación de la figura 1) y en ese caso $\sigma(P) = 1$. Tomando cualquiera de estas dos raices y teniendo en cuenta el signo correspondiente, obtenemos con (8)

$$\int_{\mathbb{R}} e^{-\alpha x^2} dx = (\mp) i2\pi\frac{e^{i\pi/4}}{2\alpha\zeta_\pm} = -i\sqrt{\frac{\pi}{|\alpha|}}e^{i\pi/2}e^{-i\gamma/2} = \sqrt{\frac{\pi}{|\alpha|}}\ e^{-i\gamma/2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

donde ha de tomarse la raíz cuadrada de α cuya parte real es positiva. La demostración está completa.

Apéndice: $\lim_{R\to\infty}\int_0^R \frac{|\sin(t|}{t}\, dt = \lim_{R\to\infty}\int_0^R \frac{|\sin(t)|^2}{t}\, dt = \infty$.

Ya que $|\sin(t)| \leq 1$ para todo t, tenemos $|\sin(t)|/t \geq sin(t)^2/t$ para todo $t > 0$. Basta entonces verificar que la segunda integral es divergente. Para ello supongamos que $R > 2\pi$, entonces

$$\int_0^R \frac{\sin(t)^2}{t}\, dt > \int_\pi^R \frac{\sin(t)^2}{t}\, dt > \sum_{n=1}^{[R/\pi]-1}\int_{n\pi}^{(n+1)\pi}\frac{\sin(t)^2}{t}\, dt \ , \tag{10}$$

donde $[X]$ denota el mayor natural menor o igual al real X.
Lema 3: Para cada uno de los intervalos $[n\pi, (n+1)\pi]$ con $n \geq 1$ tenemos

$$\int_{n\pi}^{(n+1)\pi} \frac{\sin(t)^2}{t}\, dt > \frac{1}{2} \ln\left(1 + \frac{2}{4n+1}\right) .$$

<u>Demostración:</u> Siendo el integrando no-negativo, tenemos

$$\int_{n\pi}^{(n+1)\pi} \frac{\sin(t)^2}{t}\, dt > \int_{n\pi+\pi/4}^{n\pi+3\pi/4} \frac{\sin(t)^2}{t}\, dt .$$

Pero $|\sin(n\pi + \pi/4)| = |\sin(n\pi + 3\pi/4)| = 1/\sqrt{2}$ y la función $t \mapsto \xi(t) := \sin(t)^2$ es cóncava en el intervalo $[n\pi + \pi/4, n\pi + 3\pi/4]$ ya que su segunda derivada alli es $\xi'(t) = 2\cos(2t)$ y esta función toma valores no-positivos en ese intervalo[7]. Además ξ es simétrica con respecto al punto medio de este intervalo donde se alcanza su máximo. Por lo tanto tenemos $\xi(t) = \sin(t)^2 \geq 1/2$ en $[n\pi + \pi/4, n\pi + 3\pi/4]$. Entonces

$$\int_{n\pi+\pi/4}^{(n\pi+3\pi/4} \frac{\sin(t)^2}{t}\, dt > \frac{1}{2}\int_{n\pi+\pi/4}^{(n\pi+3\pi/4} \frac{1}{t}\, dt = \frac{1}{2} \ln\left(1 + \frac{2}{4n+1}\right) . \square$$

Lema 4: $\ln(1 + x) \geq x/2$ para $0 \leq x < 1$.
<u>Demostración:</u> Sea $\sigma(x) = \ln(1+x) - x/2$. $\sigma(0) = 0$ y $\sigma'(x) = (1+x)^{-1} - 1/2 = (1-x)/(2(1+x)) > 0$ en el intervalo en cuestión.$\square$.

Retornando a (10), y usando los dos lemas 3 y 4 tenemos:

$$\int_0^R \frac{\sin(t)^2}{t}\, dt > \sum_{n=1}^{[R/\pi]-1} \frac{1}{8n+2} ;$$

pero $1/(8n + 2) \geq 1/(10n)$ para $n \geq 1$ y entonces, siempre para $R > 2\pi$,

$$\int_0^R \frac{\sin(t)^2}{t}\, dt > \frac{1}{10} \sum_{n=1}^{[R/\pi]-1} \frac{1}{n} .$$

Recordando que la serie armónica es divergente, obtenemos el resultado.

[7] Si $n\pi + \pi/4 \leq t \leq n\pi + 3\pi/4$ entonces $t = n\pi + \pi/4 + s$ con $0 \leq s \leq \pi/2$ y $\cos(2t) = \cos(\pi/2 + 2s) = -\sin(2s)$ y $2s \in [0, \pi]$.