Mecánica Cuántica I

Guía 2: Transformada de Fourier y Representación Momento

19 de Marzo de 2014

Problema 1: *Transformada de Fourier y operador inversión.* Para funciones definidas en $\mathbb{R}^d$ a valores complejos definimos la transformada de Fourier como

$$(\mathcal{F}f)(\mathbf{k}) \;=\; \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\, f(\mathbf{x})\, d\mathbf{x}$$

y su inversa (que cumple $\mathcal{F}^{-1}\mathcal{F} = \mathcal{F}\mathcal{F}^{-1} = I$)

$$(\mathcal{F}^{-1}f)(\mathbf{x}) \;=\; \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\, f(\mathbf{k})\, d\mathbf{k}\,.$$

El operador inversión Π se define por

$$(\Pi f)(\mathbf{x}) \;=\; f(-\mathbf{x})\,.$$

Pruebe que

$$\Pi^2 \;=\; I \;\;;\;\; \mathcal{F}^{-1} \;=\; \Pi\,\mathcal{F} \;=\; \mathcal{F}\,\Pi \;\;;\;\; \mathcal{F} \;=\; \Pi\,\mathcal{F}^{-1} \;=\; \mathcal{F}^{-1}\,\Pi$$

$$\mathcal{F}^2 \;=\; (\mathcal{F}^{-1})^2 \;=\; \Pi \;\;;\;\; \mathcal{F}^4 \;=\; (\mathcal{F}^{-1})^4 \;=\; I$$

Problema 2: En $\mathbb{R}$, o sea para $d = 1$, denotando con ϕ a la transformada de Fourier de ψ ($\phi = \mathcal{F}\psi$), demuestre que

$$\mathcal{F}\left(\frac{\mathrm{d}^n\psi(x)}{\mathrm{d}x^n}\right) \;=\; (ik)^n\phi(k)\,,$$

$$\mathcal{F}(x^n\psi(x)\,) = \left(i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k}\right)^n \phi(k)$$

y la fórmula generalizada de Parseval-Plancherel

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_1^*(x)\psi_2(x)\, dx \;=\; \int_{-\infty}^{\infty} \phi_1^*(k)\,\phi_2(k)\;\; dk.$$

Problema 3: Si $\psi(x) = e^{-x^2/2}$, pruebe que $\phi(k) = Ae^{-k^2/2}$ utilizando el siguiente método: Vea que $\psi(x)$ satisface la ecuación $(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x)\psi(x) = 0$. De las propiedades de la transformada de Fourier vea qué ecuación satisface $\phi(k)$. Demuestre que $A = 1$ evaluando $\psi(0)$.

Problema 4: Considere la "señal cuadrada" dada por la siguiente función de onda

$$\psi(x) = \begin{cases} \exp(ip_0x) & \text{si} \quad |x| < a \\ 0 & \text{si} \quad |x| > a \end{cases}$$

que se extiende en un dominio $2a$ alrededor de $x = 0$. Encuentre:
(a) la transformada de Fourier ϕ de la función de onda y la función $|\phi(p)|^2$.
(b) Encuentre $\Delta x, \Delta p$ y calcule el producto de ambos. Verifique el principio de incerteza para esta función de onda.

Problema 5: Todas las integrales que necesitará en este problema son gaussianas. Primeramente, muestre que:

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

Luego considere una *función de onda gaussiana*

$$\psi_{a,\sigma}(x) = N \exp\left\{ -\frac{(x-a)^2}{4\sigma^2} + ik_o x \right\} \quad , \quad a \text{ real, } k_o \text{ real y } \sigma > 0 \,.$$

a) Determine N para que $\psi_{a,\sigma}$ esté normalizada ($\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_{a,\sigma}(x)|^2 \, \mathrm{d}x = 1$). Suponga que esta función normalizada es la función de onda de una partícula y calcule el valor esperado de la posición

$$\langle \widehat{x} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \, |\psi_{a,\sigma}(x)|^2 \, \mathrm{d}x$$

y la dispersión cuadrática asociada $\langle \widehat{x}^2 \rangle - \langle \widehat{x} \rangle^2 = \langle (\widehat{x} - \langle \widehat{x} \rangle)^2 \rangle$.
b) Determine la transformada de Fourier de esta función de onda

$$\phi_{a,\sigma}(k) = (2\pi)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \psi_{a,\sigma}(x) \, \mathrm{d}x \,.$$

c) Calcule el valor esperado del momento

$$\langle \widehat{p} \rangle = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} k \, |\phi_{a,\sigma}(k)|^2 \, \mathrm{d}k$$

y la dispersión asociada.
d) ¿Cuánto vale el producto de las dispersiones calculadas?
e) Suponga que la partícula es libre y tiene masa M. Determine la evolución temporal de la función de onda. Repita los cálculos anteriores (valores esperados, dispersiones, etc.) y discuta el comportamiento temporal.
f) Calcule la densidad de corriente de probabilidad para este paquete gaussiano y verifique que se satisface la ecuación de continuidad.

Problema 6: *Ensanchamiento del paquete de ondas de una partícula libre.* Considere una partícula libre que se mueve a lo largo del eje x. Muestre lo siguiente:
a)

$$\frac{d\langle \widehat{x}^2 \rangle_{\psi_t}}{dt} = A(t) \qquad A(t) = \frac{i\hbar}{m} \int x \left(\psi_t \frac{\partial \overline{\psi_t}}{\partial x} - \overline{\psi_t} \frac{\partial \psi_t}{\partial x} \right) dx = \frac{1}{m} \left(\langle \widehat{x}\psi_t, \widehat{p}\psi_t \rangle + \langle \widehat{p}\psi_t, \widehat{x}\psi_t \rangle \right)$$

b)

$$\frac{dA}{dt} = \frac{2\hbar^2}{m^2} \int \frac{\partial \psi_t}{\partial x} \frac{\partial \overline{\psi_t}}{\partial x} \, dx = \frac{2}{m^2} \|\widehat{p}\psi_t\|^2$$

no depende de t.
c)

$$\langle \widehat{x}^2 \rangle = \langle \widehat{x}^2 \rangle_0 + A(0)t + \frac{t^2}{m^2} \langle \widehat{p}^2 \rangle_{\psi_t}$$

d)

$$(\Delta_{\psi_t} x)^2 = (\Delta_{\psi_0} x)^2 + \frac{t}{m} \left(\langle \widehat{x}\widehat{p} + \widehat{p}\widehat{x} \rangle_{\psi_0} - 2 \langle \widehat{x} \rangle_{\psi_0} \langle \widehat{p} \rangle_{\psi_0} \right) + \frac{t^2}{m^2} (\Delta_{\psi_0} p)^2$$

e) Calcule cuanto se ensancha un paquete de onda representando a una partícula libre que ha viajado $100\,m$, considerando que la partícula es un electrón de $25\,eV$ y el ancho inicial es de $10^{-6}\,m$.

Problema 7: Dada una función de onda $\psi(x,t)$ el valor de expectación de una función f de la posición está dado por:

$$\langle f \rangle = \int dx \; f(x) \, |\psi(x,t)|^2$$

Demuestre que esta expresión puede ser re-escrita como

$$\langle f \rangle = \int dp \; \varphi^*(p,t) f(-\frac{\hbar}{i}\partial_p)\varphi(p,t)$$

donde $\varphi(p,t)$ es la transformada de Fourier de $\psi(x,t)$(representación momento).

Problema 8: *La ecuación de Schrödinger en la representación momento*
a) Muestre que la ecuación de Schrödinger para una partícula de masa m bajo la acción de un potencial $V(x)$ en la representación momento puede escribirse como

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(p,t)}{\partial t} = \left[\frac{p^2}{2m} + V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\right]\Phi(p,t)$$

si el potencial es analítico en $x = 0$.
b) Escriba la ecuación de Schrödinger en la representación momento para el caso particular de un oscilador armónico unidimensional de frecuencia ω_0 y masa m tal que $V(x) = \frac{1}{2}\omega_0^2 m x^2$. Compárela con la correspondiente representación posición y relacione las soluciones en ambas representaciones sin utilizar la transformada de Fourier.

Problema 9: *Relación de incerteza entre el ancho de banda y la duración de una señal.* Suele decirse que las relaciones de incerteza son características de la mecánica cuántica. Quien se haya ocupado del análisis y procesamiento de señales temporales sabe que esto no es cierto. Considere una señal $t \to f(t)$, por ejemplo la amplitud de una corriente eléctrica, o de una señal sonora, etc. Si $\widehat{f}$ es la transformada de Fourier de f

$$\widehat{f}(\omega) = (2\pi)^{-1/2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} f(t)\,\mathrm{d}t\;,$$

la fórmula de inversión

$$f(t) = (2\pi)^{-1/2}\int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t}\widehat{f}(\omega)\,\mathrm{d}\omega$$

exhibe a f como superposición de oscilaciones puras $t \to e^{i\omega t}$ de frecuencia $\omega/(2\pi)$. Es un hecho matemático que $|f|$ y $|\widehat{f}|$ no pueden estar ambas muy concentradas (o sea tomar valores apreciablemente distintos de cero en regiones pequeñas) a la vez. Si

$$\langle t \rangle_f = \frac{\int t|f(t)|^2\,\mathrm{d}t}{\int |f(t)|^2\,\mathrm{d}t}$$

y

$$\langle \omega \rangle_f = \frac{\int \omega|\widehat{f}(\omega)|^2\,\mathrm{d}\omega}{\int |\widehat{f}(\omega)|^2\,\mathrm{d}\omega}$$

denotan los valores esperados (o promedio) del tiempo y de la frecuencia respectivamente, las respectivas dispersiones

$$(\Delta t)_f^2 = \langle (t - \langle t \rangle_f)^2 \rangle_f = \frac{\int (t - \langle t \rangle_f)^2 |f(t)|^2\,\mathrm{d}t}{\int |f(t)|^2\,\mathrm{d}t}$$

y

$$(\Delta \omega)_f^2 = \langle (\omega - \langle \omega \rangle_f)^2 \rangle_f = \frac{\int (\omega - \langle \omega \rangle_f)^2 |\widehat{f}(\omega)|^2\,\mathrm{d}\omega}{\int |\widehat{f}(\omega)|^2\,\mathrm{d}\omega}$$

satisfacen

$$(\Delta t)_f (\Delta \omega)_f \geq 1/2\;. \tag{1}$$

Siendo que $(\Delta t)_f$ es una medida de la duración efectiva de la señal y $(\Delta\omega)_f$ una medida del ancho de banda efectivo de la misma, no se puede limitar arbitrariamente el ancho de banda y la duración de una señal simultáneamente. Para demostrar la desigualdad (1), se pueden seguir los siguientes pasos:
a) Reemplazando f por $(\int |f(t)|^2\,\mathrm{d}t)^{-1/2} f$ se puede suponer que f está normalizada ($\int |f(t)|^2\,\mathrm{d}t = 1$). Esto tiene como consecuencia que también $\widehat{f}$ está normalizada (la transformación de Fourier preserva la normalización, o en otras palabras es una isometría).
b) Usando la fórmula distribucional

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{iyx}\,\mathrm{d}x = 2\pi\,\delta(y)\ ,$$

convénzase que

$$\langle\omega\rangle_f = -i\int_{-\infty}^{\infty} f^*(t)\,\frac{df(t)}{dt}\,\mathrm{d}t\ \ ,\quad \int_{-\infty}^{\infty}\omega^2\left|\widehat{f}(\omega)\right|^2\,\mathrm{d}\omega = \int_{-\infty}^{\infty}\left|\frac{df(t)}{dt}\right|^2\,\mathrm{d}t\ .$$

c) Integrando por partes se ve (tenga en cuenta la integrabilidad de $|f(t)|^2$ y de $t^2|f(t)|^2$) que

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left(\frac{df(t)}{dt}f^*(t) + \frac{df^*(t)}{dt}f(t)\right)\,\mathrm{d}t = 0\ ,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} t\left(\frac{df(t)}{dt}f^*(t) + \frac{df^*(t)}{dt}f(t)\right)\,\mathrm{d}t = -1\ .$$

d) Si para un número complejo λ arbitario,

$$f_\lambda(t) = (t - \langle t\rangle_f)f(t) + \lambda(\,\mathrm{d}f/\,\mathrm{d}t)(t) - i\lambda\langle\omega\rangle_f f(t)\ ,$$

observe que, trivialmente,

$$\int_{-\infty}^{\infty}|f_\lambda(t)|^2\,\mathrm{d}t \geq 0\ ,\ \text{para todo } \lambda \text{ complejo}\ ,$$

y verifique que

$$\int_{-\infty}^{\infty}|f_\lambda(t)|^2\,\mathrm{d}t = (\Delta t)_f^2 + \lambda^2(\Delta\omega)_f^2 - \lambda\ ,\ \text{si } \lambda \text{ es real.}$$