Mecánica Cuántica I

Primer Parcial (25 de Abril de 2014)

Solución (G.A. Raggio)

Problema 1: Considere una partícula cuántica en presencia del siguiente potencial uni-dimensional:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & , \quad \text{si } x \leq 0 \\ -V_0\, \delta(x-a) & , \quad \text{si } x > 0 \end{cases} ,$$

donde $V_0, a > 0$.
(a) Encuentre la ecuación de autovalores.
(b) Discuta la existencia de estados ligados en términos de a.

Solución: Además de la continuidad, debe imponerse la condición $\psi(0) = 0$ para que el Hamiltoniano sea simétrico. Es inmediato convencerse que si $E \geq 0$ no hay soluciones de módulo cuadrado integrable pues la solución general es combinación lineal de $\sin(kx)$ y $\cos(kx)$ con $k := \sqrt{2m|E|/\hbar^2}$. Pero, si $E < 0$, la solución general fuera de $x = a$ es combinación lineal de $\sinh(kx)$ y $\cosh(kx)$ o, lo que es lo mismo de e^{kx} y e^{-kx}. Por lo tanto, tendremos

$$\psi_k(x) = A\sinh(kx) \ , \quad \text{si } 0 \leq x < a$$

y por otro lado,

$$\psi_k(x) = Be^{-kx} \ , \ \ x > a \ ;$$

ya que $0 \leq x \mapsto e^{kx}$ no es de módulo cuadrado integrable. De la continuidad en $x = a$ obtenemos:

$$A\sinh(ka) = Be^{-ka} \ . \tag{1}$$

La condición de discontinuidad en $x = a$ para la derivada es:

$$\psi'(a^+) - \psi'(a^-) = -2mV_o/\hbar^2\psi(a) \ .$$

Por lo tanto

$$-kBe^{-ka} - kA\cosh(ka) = -U_oBe^{-ka} \ , \ \ U_o := 2mV_o/\hbar^2 \ ;$$

que con (1) y teniendo en cuenta que $k, \sinh(ka)$ y $\cosh(ka)$ son todos positivos y nos interesa $A \neq 0$

$$\boxed{\tanh(ka) = \frac{k}{U_o - k} \ , \ \ 0 < k < U_o} \ . \tag{2}$$

Esto responde a).
Teniendo en cuenta que la función $0 \leq k \mapsto \tanh(ak)$ es (ver apéndice) no-negativa, creciente, cóncava y asintótica a 1 para $k \to \infty$, y que $[0, U_o) \ni k \mapsto g(k) := k/[U_o - k]$ es (ver apéndice) no-negativa, creciente, y convexa con $\lim_{k \to U_o} g(k) = \infty$, hay solución no-nula de (2) si y sólo (ver apéndice) en $k = 0$ la pendiente de $\tanh(ak)$ supera a la pendiente de g; o sea:

$$\boxed{aU_o > 1} \ ;$$

En tal caso, hay una sola solución no-nula k_o de (2). Y, ya que $g(U_o/2) = 1 > \tanh(ka)$, necesariamente

$$\boxed{k_o \ < \ U_o/2} \ .$$

Con el Teorema de la función implicita

$$dk_o/da = \frac{k_o(U_o - k_o)^2}{U_o\cosh(k_oa)^2 - a(U_o - k_o)^2} > \frac{k(U_o - k)^2}{U_o[\cosh(k_oa)^2 - 1] + ak_o(2U_o - k_o)} > 0$$

con lo cual k_o crece con a. Esto significa que la autoenergía del único estado ligado disminuye –se hace mas negativa– a medida que la singularidad se aleja de la pared impenetrable. ¡Todo muy misterioso !

Apéndice: Recuerde que $\cosh(x) \geq 1$ con igualdad si y sólo si $x = 0$, $\sinh(x) \geq 0$ para $x \geq 0$ con igualdad si y sólo si $x = 0$. Además $\tanh(x) = \sinh(x)/\cosh(x)$ y $\cosh(x) \asymp e^x/2 \asymp \sinh(x)$ para $x \to \infty$. Ahora

$$\tanh'(ka) = a/\cosh(ka)^2 > 0 \ , \quad \tanh''(ka) = -2a^2/\cosh(ka)^3 < 0 \ ,$$

lo que completa las afirmaciones sobre la función $k \mapsto \tanh(ka)$.

Obviamente $g(k) \geq 0$ con igualdad si y sólo si $k = 0$. Además

$$g'(k) = U_o/(U_o - k)^2 > 0 \ , \quad g''(k) = 2U_o/(U_o - k)^3 > 0 \ .$$

Esto completa las afirmaciones sobre g.

La afirmación sobre la relación entre las pendientes en $k = 0$ necesaria y suficiente para la existencia de una solución no-nula de (2) es facilmente visualizable en un gráfico. Pero ahi va una prueba más formal. Recuerde, primeramente, que si f a valores reales definida en un intervalo abierto I es convexa y diferenciable en I entonces cualquiera sea $x \in I$

$$f(x) \geq f(y) + f'(y)(x - y) \tag{3}$$

para todo $y \in I$. Aplicando esto a g con $I = (0, U_o)$ y tomando el límite $k \to 0^+$,

$$g(k) \geq k/U_o \ ,$$

y la desigualdad es estricta salvo para $k = 0$.
Tomando ahora $f(k) := -\tanh(ka)$ que es convexa, (3) y el límite $k \to 0^+$ nos da $f(x) \geq f'(0)x$ o sea

$$\tanh(ka) \leq ak \ ,$$

y la desigualdad es estricta salvo para $k = 0$. Por lo tanto, si $a \leq 1/U_o$, tendremos para todo k con $0 < k \leq U_o$ que

$$\tanh(ka) < ak \leq k/U_o < g(k) \ .$$

No hay entonces solución no-nula cuando $aU_o \leq 1$. En caso contrario,

$$t(k) := g(k) - \tanh(ka)$$

es convexa y satisface $t(0) = 0$; $t'(0) = -a + 1/U_o < 0$ y, además $\lim_{k \to U_o} t(k) = \infty$. Entonces t toma valores negativos cerca de $k = 0$ y por continuidad, $t(k_o) = 0$ para algún k_o con $0 < k_o < U_o$. Por la convexidad, k_o es el único cero no-nulo.

Una alternativa: Leyendo (27/04/14) los parciales de Luna y de Rodriguez veo que la ecuación (2) es equivalente a

$$k = \frac{U_o}{2}\,(1 - e^{-2ka}) \ ; \tag{4}$$

cuya discusión es más simple que la de (2). En efecto, con $t(k) := U(1 - e^{-2ka})/2$ que es positivo para $k > 0$ con $t(0) = 0$ y $\lim_{k \to \infty} = U_o/2$; $t'(k) = U_o a e^{-2ka} > 0$ y $t''(k) = -2U_o a e^{-2ka} < 0$; vemos que t es cóncava y habrá solución positiva k_o de (4) si y sólo si $aU_o = t'(0) > 1$. Trivialmente, $k_o < U_o/2$.

Problema 2: Considere dos osciladores armónicos unidimensionales de masa m_1 y m_2, pero teniendo ambos la misma frecuencia angular ω, y acoplados por la interacción $\frac{1}{2}k(X_1 - X_2)^2$. Considerando el movimiento de las dos partículas en términos de su centro de masa (X, P) y el movimiento relativo (x, p)

$$X = (m_1 X_1 + m_2 X_2)/M \ , \quad x = X_1 - X_2 \ , \quad M := m_1 + m_2 \ ,$$

$$P = P_1 + P_2 \ , \ \ p = (m_2 P_1 - m_1 P_2)/M \ .$$

(a) Invierta estas fórmulas para expresar (X_1, P_1) y (X_2, P_2) como funciones de (X, P) y (x, p);
(b) escriba las relaciones de conmutación para los operadores asociados con estas nuevas variables dinámicas;
(c) verifique que $\widehat{P} = -i\hbar(\partial/\partial X)$ y que $\widehat{p} = -i\hbar(\partial/\partial x)$;
(d) reescriba el Hamiltoniano del sistema en términos de estas nuevas variables;
(e) Conociendo que los autovalores de energía para un oscilador armónico con frecuencia ω, son de la forma $E_n = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$, escriba los autovalores del Hamiltoniano de los dos osciladores acoplados.

Solución:
(a)

$$X_1 = X + m_2 x/M \ , \ \ X_2 = X - m_1 x/M \ ,$$
$$P_1 = \frac{m_1}{M}P + p \ , \ \ P_2 = \frac{m_2}{M}P - p \ .$$

(b) La cuantización procede con los operadores de posición y de momento asociados

$$\widehat{X} := (m_1 \widehat{X}_1 + m_2 \widehat{X}_2)/M \ , \ \ \widehat{x} := \widehat{X}_1 - \widehat{X}_2 \ , \tag{5}$$
$$\widehat{P} := \widehat{P}_1 + \widehat{P}_2 \ , \ \ \widehat{p} := (m_2 \widehat{P}_1 - m_1 \widehat{P}_2)/M \ . \tag{6}$$

Usamos $[\widehat{X}_j \widehat{P}_k] = i\hbar\delta_{j,k}$. Se tiene

$$[\widehat{X}, \widehat{P}] = [(m_1\widehat{X}_1 + m_2\widehat{X}_2)/M, \widehat{P}_1 + \widehat{P}_2] = \frac{m_1}{M}[\widehat{X}_1, \widehat{P}_1] + \frac{m_2}{M}[\widehat{X}_2, \widehat{P}_2] = i\hbar \ ,$$
$$[\widehat{x}, \widehat{p}] = [\widehat{X}_1 - \widehat{X}_2, (m_2\widehat{P}_1 - m_1\widehat{P}_2)/M] = \frac{m_2}{M}[\widehat{X}_1, \widehat{P}_1] + \frac{m_1}{M}[\widehat{X}_2, \widehat{P}_2] = i\hbar \ ,$$

y todos los otros conmutadores se anulan; por ejemplo:

$$[\widehat{X}, \widehat{p}] = [\frac{m_1}{M}\widehat{X}_1 + \frac{m_2}{M}\ \widehat{X}_2, \frac{m_2}{M}\widehat{P}_1 - \frac{m_1}{M}\widehat{P}_2] = \frac{m_1 m_2}{M^2}[\widehat{X}_1, \widehat{P}_1] - \frac{m_1 m_2}{M^2}[\widehat{X}_2, \widehat{P}_2] = 0 \ .$$

(c) Con las fórmulas de inversión

$$-i\hbar(\partial/\partial X) = -i\hbar\left\{\frac{\partial X_1}{\partial X}\frac{\partial}{\partial X_1} + \frac{\partial X_2}{\partial X}\frac{\partial}{\partial X_2}\right\} = -i\hbar\left\{\frac{\partial}{\partial X_1} + \frac{\partial}{\partial X_2}\right\} = \widehat{P}_1 + \widehat{P}_2 = \widehat{P}$$

y similarmente

$$-i\hbar(\partial/\partial x) = \frac{m_2}{M}\widehat{P}_1 - \frac{m_1}{M}\widehat{P}_2 = \widehat{p} \ .$$

(d) Tenemos

$$\widehat{H} = \sum_{j=1}^{2}\left\{\frac{1}{2m_j}\widehat{P}_j^2 + \frac{m_j\omega^2}{2}\widehat{X}_j^2\right\} + \frac{k}{2}(\widehat{X}_1 - \widehat{X}_2)^2 \ .$$

Pero con las fórmulas de inversión obtenemos

$$\frac{1}{2m_1}\widehat{P}_1^2 + \frac{m_1\omega^2}{2}\widehat{X}_1^2 = \frac{1}{2m_1}\left(\frac{m_1^2}{M^2}\widehat{P}^2 + \frac{2m_1}{M}\widehat{P}\widehat{p} + \widehat{p}^2\right) + \frac{m_1\omega^2}{2}\left(\widehat{X}^2 + \frac{2m_2}{M}\widehat{X}\widehat{x} + \frac{m_2^2}{M^2}\widehat{x}^2\right) \ ,$$
$$\frac{1}{2m_2}\widehat{P}_2^2 + \frac{m_2\omega^2}{2}\widehat{X}_2^2 = \frac{1}{2m_2}\left(\frac{m_2^2}{M^2}\widehat{P}^2 - \frac{2m_2}{M}\widehat{P}\widehat{p} + \widehat{p}^2\right) + \frac{m_2\omega^2}{2}\left(\widehat{X}^2 - \frac{2m_1}{M}\widehat{X}\widehat{x} + \frac{m_1^2}{M^2}\widehat{x}^2\right) \ ,$$

de modo que

$$\widehat{H} = \underbrace{\frac{1}{2M}\widehat{P}^2 + \frac{M\omega^2}{2}\widehat{X}^2}_{\widehat{H}_{cm}} + \underbrace{\frac{1}{2\mu}\widehat{p}^2 + \frac{\mu\omega^2 + k}{2}\widehat{x}^2}_{\widehat{H}_r}$$

donde $\mu := m_1 m_2/M$ es la masa reducida del sistema. Los operadores $\widehat{H}_{cm}$ y $\widehat{H}_r$ asociados respectivamente con el centro de masa y el movimiento relativo conmutan entre si.

(e) Por que $[\widehat{H}_r, \widehat{H}_{cm}] = 0$, tenemos

$$spec(\widehat{H}) = spec(\widehat{H}_{cm}) + spec(\widehat{H}_r)$$

con la suma en el sentido de conjuntos. Ahora,

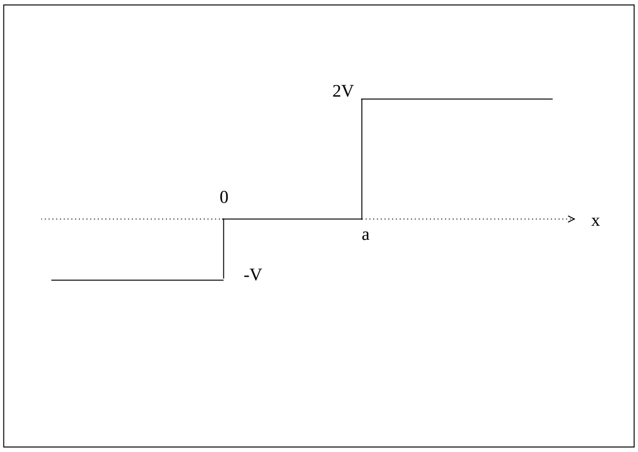
$$spec(\widehat{H}_{cm}) = \left\{ \frac{\hbar\omega}{2}(2n+1) : n = 0, 1, 2, \cdots \right\} \ , \ spec(\widehat{H}_r) = \left\{ \frac{\hbar\Omega}{2}(2\ell+1) : \ell = 0, 1, 2, \cdots \right\} \ ,$$

donde

$$\Omega = \sqrt{\omega^2 + (k/\mu)} \ .$$

Una alternativa: Arriba se han definido los operadores $(\widehat{X}, \widehat{P})$ y $(\widehat{x}, \widehat{p})$ con (5) y (6). La alternativa[1] es: partiendo de las variables configuracionales X y x, se definen los operadores $\widehat{X}$ y $\widehat{x}$ como operadores de multiplicación por X y x respectivamente. Entonces, los momentos cuánticos asociados son $\widehat{P} := -i\hbar(\partial/\partial X)$ y $\widehat{p} := i\hbar(\partial/\partial x)$ y $[\widehat{X}, \widehat{P}] = [\widehat{x}, \widehat{p}] = i\hbar$ se satisfacen trivialmente. Lo que hay que ver es la consistencia demostrando que $\widehat{P} = \widehat{P}_1 + \widehat{P}_2$ y que $\widehat{p} = (m_2\widehat{P}_1 - m_1\widehat{P}_2)/M$. Como vimos ambas variantes producen lo mismo.

Problema 3: Considere una partícula de masa m que incide desde la izquierda en el potencial unidimensional "doble escalón" con una energía E que satisface $-V < E < 2V$. Considerando



la densidad de corriente de probabilidad local, muestre que hay reflexión total.
Sugerencia: No es necesario calcular explicitamente la solución estacionaria sino que basta usar cierta propiedad general de la corriente de probabilidad local asociada a una solución estacionaria de la ec. de Schrödinger en una dimensión.

Solución: Sea $\epsilon := 2mE/\hbar^2$ entonces $-U < \epsilon < 2U$ donde $U := 2mV/\hbar^2$. Sea ψ_ϵ la solución polinomialmente acotada de la ec. Schrödinger estacionaria. Para $x > a$ tendremos

$$\psi_\epsilon(x) = Ce^{-\kappa x} \ , \ \ \kappa := \sqrt{2U - \epsilon} \ .$$

[1]A mi juicio más correcta.

La densidad de corriente asociada es

$$j = \frac{\hbar}{m} Im(\overline{\psi_\epsilon(x)}\psi'_\epsilon(x)) = -\frac{\hbar\kappa}{m} Im(|C|^2 e^{-2\kappa x}) = 0 \ .$$

Pero, la densidad de corriente para cualquier solución estacionaria $\Psi(x,t)$ de una ec. de Schrödinger en una dimensión espacial es constante en tiempo y espacio. Pues, la ec. de continuidad es

$$\frac{d\rho}{dt} + \frac{dj}{dx} = 0$$

con $\rho(x,t) := |\Psi(x,t)|^2$ y $j(x,t) := \frac{\hbar}{m} Im(\overline{\Psi(x,t)}\Psi'(x,t))$ y si $\Psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\Phi(x)$ tenemos $|\Psi(x,t)|^2 = |\Phi(x)|^2$ y $j(x,t) = \frac{\hbar}{m} Im(\overline{\Phi(x)}\Phi'(x))$ con lo cual j es independiente de t y, como la derivada temporal de ρ se anula, también $dj/dx = 0$.

Para $x < 0$ tenemos

$$\psi_\epsilon(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \ , \ \ k := \sqrt{\epsilon + U} \ .$$

Entonces

$$0 = j = \frac{\hbar}{m} Im([\overline{A}e^{-ikx} + \overline{B}e^{ikx}]ik[Ae^{ikx} - Be^{-ikx}])$$
$$= \frac{\hbar k}{m} Im\{i[|A|^2 - |B|^2 + 2iIm(A\overline{B}e^{2ikx})]\} = \frac{\hbar k}{m}(|A|^2 - |B|^2) \ .$$

Por lo tanto $|A| = |B|$ y el coeficiente de reflexión es 1.