Mecánica Cuántica I

Parcial recuperatorio – 20/06/2014
Soluciones – G.A. Raggio

Problema 1: *(4 puntos)* Considere una partícula de masa m en el potencial unidimensional atractivo $V(x) = -V_o/|x|$ ($V_o > 0$).
a) Escriba el Hamiltoniano H del sistema e indique toda la información que pueda sobre su espectro de auto-energías y eventuales autofunciones.
b) Usando la función de prueba $\psi_\alpha(x) = x^3 e^{-\alpha|x|/2}$ con $\alpha > 0$, verifique que $\langle \psi_\alpha, H\psi_\alpha \rangle < 0$ para α adecuado.
c) Argumente teniendo en cuenta la paridad que hay, a lo menos, dos estados ligados.

Una fórmula de integración: $\int_0^\infty t^n e^{-\mu t}\, dt = \frac{n!}{\mu^{n+1}}$ para $Re(\mu) > 0$.

Solución: a) $H = -(1/2m)\widehat{p}^2 + V(\widehat{x})$. El problema es unidimensional por lo cual, si hay autovalores discretos, estos son simples e inferiores a $\lim_{|x|\to\infty} V(x) = 0$. Como V es par, las autofunciones si existen son alternativamente pares y impares; la autofunción asociada con el autovalor minimal es par y puede elegirse positiva. Con el grupo unitario de dilataciones $(U_\lambda \psi)(x) = \lambda^{-1/2}\psi(x/\lambda)$, $\lambda > 0$; se tiene $U_\lambda^* \widehat{x} U_\lambda = \lambda \widehat{x}$ y $U_\lambda^* \widehat{p} U_\lambda = \lambda^{-1}\widehat{x}$, de modo que

$$U_\lambda^* H U_\lambda = \lambda^{-2}(1/2m)\widehat{p}^2 + \lambda^{-1} V(\widehat{x})$$

y eligiendo λ convenientemente obtenemos que

$$spec(H[\hbar, m, V_o]) = \frac{mV_o^2}{\hbar^2} spec(H[1,1,1]) \ .$$

Ya que $V < 0$, la existencia de autovalores aislados de multiplicidad finita está garantizada si hay ψ con $\langle \psi, H\psi \rangle < 0$.
Como $\lim_{|x|\to 0} V(x) = -\infty$, no es evidente que H sea acotado por debajo. Esto requiere de un análisis más profundo.

b) La función ψ_α dada es impar con

$$\psi'(x) = (3x^2 - \alpha|x|^3/2)e^{-\alpha|x|/2} \ , \ \ \psi''(x) = 6x - 3\alpha x|x| + \alpha^2 x^3/4)e^{-\alpha|x|/2} \ .$$ [1]

Las integrales que se necesitan son:

$$\int_{\mathbb{R}} |\psi_\alpha(x)|^2\, dx = 2\int_0^\infty x^6 e^{-\alpha x}\, dx = 2\frac{6!}{\alpha^7} \ ;$$

$$\int_{\mathbb{R}} |\psi_\alpha'(x)|^2\, dx = 2\int_0^\infty (3x^2 - \alpha x^3/2)^2 e^{-\alpha x}\, dx = 2\left(9\frac{4!}{\alpha^5} - 3\frac{5!}{\alpha^6} + \frac{\alpha^2}{4}\frac{6!}{\alpha^7}\right) = \frac{72}{\alpha^5} \ ;$$

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{|\psi_\alpha(x)|^2}{|x|}\, dx = 2\int_0^\infty x^5 e^{-\alpha x}\, dx = 2\frac{5!}{\alpha^6} \ .$$

De modo que

$$E(\alpha) := \frac{\langle \psi_\alpha, H\psi_\alpha \rangle}{\langle \psi_\alpha, \psi_\alpha \rangle} = \frac{\hbar^2\alpha^2}{40m} - \frac{V_o \alpha}{6}$$

como función de $\alpha > 0$ es una parábola convexa con raices es $\alpha = 0$ y en $\alpha_o = 20V_o m/(3\hbar^2)$. Por lo tanto

$$\min_{\alpha > 0} E(\alpha) = E(\alpha_o/2) = -\frac{5V_o^2 m}{18\hbar^2} \ .$$

[1] La elección del factor x^3 en ψ_α se debe a que con él la función resulta dos veces diferenciable en $x = 0$; lo que, por ejemplo, no es el caso con $xe^{-|x|}$.

Deducimos que hay estado ligado con energía E_1 no superior a $E(\alpha_o/2)$.
c) Ya que ψ_α es impar y H conmuta con la paridad Π definida por $(\Pi\psi)(x) := \psi(-x)$, podemos argumentar aplicando el Principio Variacional a H_-, la restricción de H al subespacio $\mathfrak{H}_- := \{\psi \in L^2(\mathbb{R}) : \Pi\psi = -\psi\}$ que

$$\text{ínf}\, spec(H_-) \leq E(\alpha_o/2) \; ;$$

de modo que hay un estado ligado impar con auto-energía $E_2 > E_1$ con $E_2 \leq E(\alpha_o/2)$.

Problema 2: *(3 puntos)* Sean ϕ_1 y ϕ_2 autofunciones normalizadas de un Hamiltoniano H con autovalores E_1 y E_2 respectivamente, con $E_1 \neq E_2$; suponga que el operador lineal autoadjunto A deja invariante el subespacio $\mathcal{E}$ generado por estas dos autofunciones y que:

$$\langle \phi_j, A\phi_j \rangle = \frac{a+b}{2} \; , \;\; j = 1,2 \; ; \;\; \langle \phi_1, A\phi_2 \rangle = \frac{a-b}{2} \; .$$

donde a y b son números reales.
a) Calcule los autovalores y autovectores de la restricción del operador A al subespacio $\mathcal{E}$.
b) Encuentre una condición para a y b que sea necesaria para que A y H conmuten. ¿Es esta condición suficiente?
c) Calcule el valor esperado de A como función del tiempo para el estado inicial dado por $(\phi_1 + \phi_2)/||\phi_1 + \phi_2||$.

Solución: Como $E_1 \neq E_2$ las autofunciones ϕ_1 y ϕ_2 son ortogonales y constituyen una base ortonormal del subespacio $\mathcal{E}$.
a) La restricción del operador autoadjunto A al subespacio invariante $\mathcal{E}$ en la base ortonormal $\{\phi_1, \phi_2\}$ está dada por la matriz

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} \frac{a+b}{2} & \frac{a-b}{2} \\ \frac{a-b}{2} & \frac{a+b}{2} \end{pmatrix}$$

ya que

$$\langle \phi_2, A\phi_1 \rangle = \overline{\langle \phi_1, A^*\phi_2 \rangle} = \overline{\langle \phi_1, A\phi_2 \rangle} = (a-b)/2 \; ,$$

pues tanto a como b son reales.
Los autovalores de esta restricción son entonces las raices del polinomio característico

$$\chi(\lambda) := det(\mathbb{A} - \lambda\mathbf{1}) = \lambda^2 - (a+b)\lambda + \frac{(a+b)^2 - (a-b)^2}{4} = \lambda^2 - (a+b)\lambda + ab \; ;$$

estas raices son

$$\frac{a+b \pm \sqrt{(a+b)^2 - 4ab}}{2} = \frac{a+b \pm \sqrt{(a-b)^2}}{2} \; ,$$

o sea $\lambda_1 = a$ y $\lambda_2 = b$. Los autovectores normalizados correspondientes son entonces

$$\psi_1 = z_1 \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = z_1(\phi_1 + \phi_2)/\sqrt{2} \; , \;\; \psi_2 = z_2 \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = z_2(\phi_1 - \phi_2)/\sqrt{2} \; ,$$

donde z_1, z_2 son complejos arbitrarios de módulo 1. $\{\psi_1, \psi_2\}$ es otra base ortonormal de $\mathcal{E}$.
b) Una condición necesaria para que A conmute con H es que lo hagan sus restricciones al subespacio invariante (¡para ambos operadores!) $\mathcal{E}$. La restricción de H a $\mathcal{E}$ en la base ortonormal $\{\phi_1, \phi_2\}$ está dada por la matriz

$$\mathbb{H} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix} \; .$$

Se tiene

$$[\mathbb{H}, \mathbb{A}] = \begin{pmatrix} 0 & (E_1 - E_2)(a-b)/2 \\ (E_2 - E_1)(a-b)/2 & 0 \end{pmatrix}$$

de modo que si A y H conmutan entonces $a = b$. Esta condición es además suficiente para que el conmutador $[A, H]$ restringido a $\mathcal{E}$ se anule, pero no nos dice absolutamente nada sobre el conmutador de A y H restringido al subespacio invariante $\mathcal{E}^\perp$; por lo tanto no es suficiente salvo cuando $\mathcal{E}$ es todo el espacio de Hilbert.
c) Con el Teorema de Pitagoras, $\|\phi_1+\phi_2\|^2 = \|\phi_1\|^2+\|\phi_2\|^2 = 2$, de modo que $\psi := (\phi_1+\phi_2)/\sqrt{2}$. Entonces

$$\psi_t := e^{-iH(t/\hbar)}\psi = (e^{-iE_1t/\hbar}\phi_1 + e^{-iE_2t/\hbar}\phi_2)/\sqrt{2}\ ,$$

y, con $c_j(t) := e^{-iE_jt/\hbar}$, $j = 1, 2$,

$$\langle\psi_t, A\psi_t\rangle = \frac{1}{2}\langle c_1(t)\phi_1 + c_2(t)\phi_2, c_1(t)A\phi_1 + c_2(t)A\phi_2\rangle = \frac{1}{2}\sum_{j,k=1}^{3} \overline{c_j(t)}c_k(t)\mathbb{A}_{j,k}$$

$$= \frac{1}{2}\left(\frac{a+b}{2}(|c_1(t)|^2 + |c_2(t)|^2) + \frac{a-b}{2}2Re(\overline{c_1(t)}c_2(t))\right)\ .$$

Pero $|c_1(t)| = |c_2(t)| = 1$ y $\overline{c_1(t)}c_2(t) = e^{i(E_1-E_2)t/\hbar}$ de modo que

$$\langle\psi_t, A\psi_t\rangle = \left(\frac{a+b}{2} + \frac{a-b}{2}\cos\left((E_1 - E_2)t/\hbar\right)\right)$$

$$= a[\cos((E_1 - E_2)t/(2\hbar))]^2 + b[\sin((E_1 - E_2)t/(2\hbar))]^2\ .$$

Problema 3: *(3 puntos)* Sea $D(\mathbf{e}, \alpha)$ la rotación en $\mathbb{R}^3$ asociada con el eje de rotación $\mathbf{e}$ ($|\mathbf{e}| = 1$) y el ángulo de rotación α. Considere las funciones de onda asociadas con dos partículas y el operador $U(e, \alpha)$ definido por

$$(U(\mathbf{e}, \alpha)\Psi)(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) := \Psi(D(\mathbf{e}, -\alpha)\mathbf{r}_1, D(\mathbf{e}, -\alpha)\mathbf{r}_2)\ .$$

Usando todo lo que quiera sobre las rotaciones y el momento angular para una sola partícula (especifique lo que usa):
a) Verifique que $U(\mathbf{e}, \alpha)$ es unitario;
b) Muestre que $U(e, \alpha) = \exp\{-i(\alpha/\hbar)\mathbf{e}\cdot\widehat{\mathbf{L}}\}$ donde $\widehat{\mathbf{L}} = \widehat{\mathbf{L}}_1 + \widehat{\mathbf{L}}_2$ con $\widehat{\mathbf{L}}_j = \widehat{\mathbf{r}}_j \wedge \widehat{\mathbf{p}}_j$;
c) Verifique que $[\widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{\mathbf{L}}_j] \neq 0$ para $j = 1, 2$ pero que $[\widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{\mathbf{L}}] = \mathbf{0}$.

Solución: De la teoría del grupo de rotaciones para una sola partícula sabemos que para $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$ se tiene

$$(U^{(o)}_{(\mathbf{e},\alpha)}\psi)(\mathbf{r}) = \psi(D(\mathbf{e}, -\alpha)\mathbf{r}$$

es unitario con $U^{(o)}_{(\mathbf{e},\alpha)} = \exp\{-i(\alpha/\hbar)\mathbf{e}\cdot\widehat{\mathbf{L}}\}$ donde $\widehat{\mathbf{L}} := \widehat{\mathbf{r}}\wedge\widehat{\mathbf{p}}$. Para dos partículas, con posiciones $\mathbf{r}_1$ y $\mathbf{r}_2$ respectivamente, definiendo $\widehat{\mathbf{L}_1} := \widehat{\mathbf{r}_1} \wedge \widehat{\mathbf{p}_1}$ y $\widehat{\mathbf{L}_2} := \widehat{\mathbf{r}_2} \wedge \widehat{\mathbf{p}_2}$ se tiene inmediatamente que cualesquiera sean $j, k = 1, 2, 3$,

$$[\widehat{L}_{1,j}, \widehat{L}_{2,k}] = 0\ ;$$

de modo que con

$$U^{(1)}_{(\mathbf{e},\alpha)} = \exp\{-i(\alpha/\hbar)\mathbf{e}\cdot\widehat{\mathbf{L}_1}\}\ ,\ \ U^{(2)}_{(\mathbf{e},\alpha)} = \exp\{-i(\alpha/\hbar)\mathbf{e}\cdot\widehat{\mathbf{L}_2}\}$$

definidos en $L^2(\mathbb{R}^3\times\mathbb{R}^3)$ se tiene que $U^{(1)}_{(\mathbf{e},\alpha)}$ conmuta con $U^{(2)}_{(\mathbf{f},\beta)}$ cualesquiera que sean los ejes $\mathbf{e}$ y $\mathbf{f}$ y los ángulos α y β. Y, claramente,

$$U_{(\mathbf{e},\alpha)} = U^{(1)}_{(\mathbf{e},\alpha)}U^{(2)}_{(\mathbf{e},\alpha)} = e^{-i(\alpha/\hbar)\mathbf{e}\cdot\widehat{\mathbf{L}_1}}e^{-i(\alpha/\hbar)\mathbf{e}\cdot\widehat{\mathbf{L}_2}} = e^{-i(\alpha/\hbar)\mathbf{e}\cdot(\widehat{\mathbf{L}_1}+\widehat{\mathbf{L}_2})} = e^{-i(\alpha/\hbar)\mathbf{e}\cdot\widehat{\mathbf{L}}}\ .$$

Ya que el producto de dos unitarios es unitario, esto verifica a) y b).
c) Tenemos, ya que las componentes de $\widehat{\mathbf{L}_1}$ conmutan con las de $\widehat{\mathbf{L}_2}$,

$$\widehat{\mathbf{L}}^2 = \widehat{\mathbf{L}_1}^2 + \widehat{\mathbf{L}_2}^2 + 2\widehat{\mathbf{L}_1} \cdot \widehat{\mathbf{L}_2} \ .$$

Entonces

$$[\widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{L}_{1,j}] = [\widehat{\mathbf{L}_1}^2, \widehat{L}_{1,j}] + [\widehat{\mathbf{L}_2}^2, \widehat{L}_{1,j}] + 2[\widehat{\mathbf{L}_2} \cdot \widehat{\mathbf{L}_1}, \widehat{L}_{1,j}] = 2\widehat{\mathbf{L}_2} \cdot [\widehat{\mathbf{L}_1}, \widehat{L}_{1,j}]$$

$$= 2\sum_{k=1}^{3} \widehat{L}_{2,k}[\widehat{L}_{1,k}, \widehat{L}_{1,j}] = 2i\hbar \sum_{k=1}^{3} \widehat{L}_{2,k} \sum_{m=1}^{3} \epsilon_{k,j,m} \widehat{L}_{1,m}$$

$$= 2i\hbar \sum_{k,m=1}^{3} (-)\epsilon_{k,m,j} \widehat{L}_{2,k} \widehat{L}_{1,m} = -2i\hbar(\widehat{\mathbf{L}_2} \wedge \widehat{\mathbf{L}_1})_j \ ,$$

o sea:

$$[\widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{\mathbf{L}_1}] = -i2\hbar(\widehat{\mathbf{L}_2} \wedge \widehat{\mathbf{L}_1}) \ .$$

Similarmente, se obtiene

$$[\widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{\mathbf{L}_2}] = -i2\hbar(\widehat{\mathbf{L}_1} \wedge \widehat{\mathbf{L}_2}) \ ,$$

de modo que

$$[\widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{\mathbf{L}}] = [\widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{\mathbf{L}_1}] + [\widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{\mathbf{L}_2}] = -i2\hbar(\widehat{\mathbf{L}_2} \wedge \widehat{\mathbf{L}_1}) - i2\hbar(\widehat{\mathbf{L}_1} \wedge \widehat{\mathbf{L}_2}) = \widehat{\mathbf{O}} \ .$$

Otro método para obtener este último resultado es observar que

$$[\widehat{L}_j, \widehat{L}_k] = [\widehat{L}_{1,j} + \widehat{L}_{2,j}, \widehat{L}_{1,k} + \widehat{L}_{2,k}] = [\widehat{L}_{1,j}, \widehat{L}_{1,k}] + [\widehat{L}_{2,j}, \widehat{L}_{2,k}]$$

$$= i\hbar \sum_{m=1}^{3} \epsilon_{j,k,m} \left(\widehat{L}_{1,m} + \widehat{L}_{2,m}\right) = i\hbar \sum_{m=1}^{3} \epsilon_{j,k,m} \widehat{L}_m$$

y, que esta relación de conmutación siempre implica que $[\widehat{\mathbf{L}}^2, \widehat{\mathbf{L}}] = \widehat{\mathbf{O}}$.