Mecánica Cuántica I

Guía 2: Paquetes de onda y transformadas de Fourier 19 de marzo de 2025

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

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

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

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

Muestre que el operador inversión Π, definido de modo que $(\Pi f)(\vec{x}) = f(-\vec{x})$, tiene autovalores ± 1, y sus autovectores son las funciones pares e impares. Pruebe también que

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

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

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

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

y para ψ_i, ϕ_j en L^2, demuestre la fórmula generalizada de Parseval-Plancherel

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

Problema 3: Si $\psi(x) = \left(1/\sqrt{2\pi}\right) e^{-x^2/2}$, pruebe que $\phi(k) = Ae^{-k^2/2}$. Para ello vea que $\psi(x)$ satisface la ecuación

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + x\right)\psi(x) = 0\ .$$

De las propiedades de la transformada de Fourier vea qué ecuación satisface $\phi(k)$. Halle $A = 1/\sqrt{2\pi}$ evaluando $\psi(0)$.

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

$$\psi(x) = \begin{cases} A\exp(ip_o x/\hbar) & \text{si} \quad |x| \le a \\ 0 & \text{si} \quad |x| > a \end{cases}$$

a) Halle el valor de A para que la función resulte normalizada ($\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2\, \mathrm{d}x = 1$).

b) Encuentre la función de onda $\varphi(p)$ en la representación momento y la correspondiente densidad de probabilidad $|\varphi(p)|^2$, usando que si $p = \hbar k$, en una dimensión se tiene:

$$\varphi(p) = \frac{\phi(k)}{\sqrt{\hbar}} = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ipx/\hbar}\,\psi(x)\, \mathrm{d}x\ .$$

c) Calcule el valor esperado de la posición y la dispersión cuadrática asociada:

$$\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\,|\psi(x)|^2\, \mathrm{d}x \quad , \qquad (\Delta x)^2 = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 = \left\langle \big(x - \langle x\rangle\big)^2 \right\rangle .$$

d) Calcule el valor esperado del momento $\langle p\rangle = \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} p\,|\varphi(p)|^2\, \mathrm{d}p$ y muestre que la dispersión cuadrática asociada diverge. Analice los resultados.

Problema 5: *Todas las integrales que necesitará en este problema son gaussianas.*

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

Considere ahora una *función de onda gaussiana:*

$$\psi(x) = N \exp\left[-\frac{(x-a)^2}{4\sigma^2} + \frac{i\, p_o x}{\hbar}\right] \quad , \quad a \text{ y } p_o \text{ reales, } \sigma > 0 \; .$$

b) Determine N para que $\psi(x)$ esté normalizada, el valor esperado de la posición y la dispersión cuadrática asociada.

c) Determine la función de onda $\varphi(p)$ en la representación momento.

d) Calcule el valor esperado del momento y la dispersión asociada.

e) Encuentre el producto de las dispersiones calculadas $\Delta x\, \Delta p$, y muestre que satisfacen el principio de incertidumbre.

Problema 6: Considere una partícula cuya función de onda a tiempo $t = 0$ es la del problema anterior. Suponga que la partícula es libre y tiene masa m.

a) Determine la evolución temporal de la función de onda. Para ello, use que la evolución temporal es fácil de escribir en la representación de momento, es decir, calcule primero $\varphi(p,t)$ y luego antitransforme para obtener $\psi(x,t)$ usando:

$$\psi(x,t) = (2\pi\hbar)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar}\, \varphi(p,t)\; \mathrm{d}p \; .$$

b) Calcule los valores de expectación del momento y de la posición, y sus correspondientes dispersiones cuadráticas como función del tiempo, y discuta su comportamiento.
Ayuda: puede ahorrarse algunas cuentas usando que $|\varphi(p,t)|^2 = |\varphi(p,0)|^2$. Para el cálculo del valor medio de la posición y su dispersión, conviene escribir $|\psi(x,t)|^2$ en una forma gaussiana comparable a la del problema anterior, de modo de no repetir la misma cuenta.

c) Calcule la densidad de corriente de probabilidad $j(x,t)$ para este paquete gaussiano, usando que en una dimensión

$$j = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^* \frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial\psi^*}{\partial x}\right)$$

Verifique que el resultado obtenido es razonable analizando el signo de j para los casos $p_o = 0$, $t = 0$, y $a = 0$.

d) Si este paquete de onda gaussiano corresponde a un electrón libre de 25 eV, con ancho espacial inicial $\sigma = 10^{-6}$ m, muestre que $(\Delta p)^2 \ll \langle p^2\rangle$, calcule $\langle p\rangle$, y halle la incertidumbre en la posición luego de que el electrón viaje 100 m.

Problema 7: Considere una partícula libre que se mueve a lo largo del eje x. Muestre que

a) $\dfrac{\mathrm{d}\langle x^2\rangle}{\mathrm{d}t} = A(t) \; , \qquad A(t) = 2\displaystyle\int x\, j(x,t)\; \mathrm{d}x \; .$

b) $\dfrac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = \dfrac{2\hbar^2}{m^2}\displaystyle\int \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\psi^*}{\partial x}\; \mathrm{d}x = \frac{2}{m^2}\|\widehat{p}\,\psi\|^2 = cte.$

c) $\langle x^2\rangle = \langle x^2\rangle_o + A(0)\, t + \dfrac{B}{2}\, t^2 \; .$

Problema 8: Dada una función de onda $\psi(x)$ el valor de expectación de una función analítica de la posición $f(x)$ está dado por

$$\langle f\rangle = \int \mathrm{d}x\; f(x)\, |\psi(x)|^2 \; .$$

Demuestre que esta expresión puede ser reescrita como

$$\langle f\rangle = \int \mathrm{d}p\; \varphi^*(p)\, f\left(i\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\right)\varphi(p) \; ,$$

donde $\varphi(p)$ es la transformada de Fourier de $\psi(x,t)$ (representación momento).
Ayuda: Use el desarrollo en serie de Taylor $f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n x^n$, la relación para una dimensión $\phi(k) = \sqrt{\hbar}\,\varphi(p)$ y los resultados del problema 2 de esta guía.

Problema 9: *La ecuación de Schrödinger en la representación momento.*

a) Muestre que la ecuación de Schrödinger para una partícula de masa m en una dimensión y bajo la acción de un potencial (analítico) $V(x)$, en la representación momento puede escribirse como

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

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