Mecánica Cuántica I

Guía 4: Problemas en una dimensión 11 de abril de 2025

Problema 1: Muestre que si un estado $|\psi\rangle$ es tal que $\langle x \,|\, \psi\rangle$ es real $\forall\ x$, entonces $\langle p\rangle = 0$. Generalice este resultado al caso $\langle x \,|\, \psi\rangle = c\,\langle x \,|\, \psi\rangle_r$, donde $\langle x \,|\, \psi\rangle_r \in \mathbb{R}$ y $c \in \mathbb{C}$.

Problema 2: Muestre que si un estado con función de onda $\psi(x)$ tiene valor medio del momento dado por $\langle p\rangle = p_o$ entonces para otro con función de onda $e^{ip_1 x/\hbar}\,\psi(x)$ vale que $\langle p\rangle = p_o + p_1$.

Problema 3: Calcule los siguientes conmutadores: $\left[\hat{x}, \dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right]$, $\left[\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, \hat{x}^2\right]$, $\left[\hat{H}, \hat{x}\right]$, $\left[\hat{H}, \hat{p}\right]$, donde $\hat{H} = V(\hat{x}) + \hat{p}^2/(2m)$ es el operador hamiltoniano de una partícula en una dimensión.

Problema 4: *Caja de potencial.* Una partícula de masa m está restringida a moverse en una dimensión entre $x=-L/2$ y $x=L/2$, donde el potencial es nulo.

a) Determine los autovalores E_n y las autofunciones ψ_n del hamiltoniano imponiendo como condiciones de contorno que las funciones de onda se anulen en los extremos del intervalo.

b) Grafique las primeras 3 autofunciones y analice comparativamente sus nodos (teoría de Sturm-Liouville).

c) Suponga que $\psi(x) = C[-\cos(kx) - 3/2\,\mathrm{sen}(2kx)]$, con $k=\pi/L$, y se quiere determinar cómo evoluciona temporalmente esta función de onda. Desarrolle ψ como combinación lineal de las autofunciones de la caja infinita determinando los coeficientes y determine la función de onda $\psi(x,t)$ al tiempo t.

d) Si se realiza una medición de la energía, indique qué resultados pueden obtenerse y las probabilidades respectivas. Explique en cada caso cuál es el estado (normalizado) luego de la medición. Utilizando los resultados posibles y sus probabilidades, calcule el valor de expectación de la energía de la partícula.

e) Considere también una caja de largo $2L$. Compare las auto-energías mínimas y sus correspondientes autofunciones. Grafique y analice comparando derivadas y curvaturas de ambas funciones.

Problema 5: *Pozo cuadrado de potencial.* Considere una partícula en el siguiente potencial:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & |x| < a \\ V_o & |x| \geq a \end{cases}$$

Se desea estudiar los estados ligados para este sistema ($E < V_o$).

a) Encuentre una expresión para las autofunciones, y muestre que las soluciones pares tienen energías que satisfacen la ecuación trascendente

$$k\tan(ka) = k' \ , \tag{1}$$

mientras que las impares tendrán energías dadas por

$$k\cot(ka) = -k' \ , \tag{2}$$

donde k e ik' son los números de onda dentro y fuera del pozo, respectivamente. Note que k y k' están relacionadas por

$$k^2 + k'^2 = \frac{2mV_o}{\hbar^2} \ . \tag{3}$$

b) Verifique que cuando $V_o \to \infty$ las soluciones de este problema coinciden con las de la caja de potencial.

c) Las ecuaciones (1) y (2) deben ser resueltas gráfica o numéricamente. Para el primer método, en el plano ($\alpha=ka$, $\beta=k'a$) puede imaginar un círculo que obedece (3). Los estados ligados están dados por la intersección de la curva $\alpha\tan\alpha = \beta$ o $\alpha\cot\alpha = -\beta$ con el círculo (recuerde que α y β son positivos).

d) Muestre que siempre existe una solución par y que no hay soluciones impares a menos que $V_o > \hbar^2\pi^2/(8ma^2)$. Interprete el resultado analizando el signo de la derivada de la función de onda. ¿Cuál es el valor de E cuando se satisface la igualdad?

Problema 6: Una partícula de masa m se mueve bajo la acción del potencial unidimensional

$$V(x) = -\gamma\,\delta(x - x_o)\ ; \quad \gamma > 0\ .$$

a) Use la ecuación de Schrödinger para obtener las propiedades de la función de onda en $x = x_o$.

b) Dé las energías y autofunciones correspondientes a estados ligados.

c) Considere el pozo de potencial de ancho $2a$ y profundidad V_o. Tome los límites $V_o \to \infty$ y $a \to 0$ manteniendo el producto $2aV_o=\gamma$. Muestre que hay un único estado ligado y calcule su energía. Compare con el punto (b).

d) Una partícula incide desde la izquierda con momento $\hbar k$. Calcule el coeficiente de transmisión.

e) Considere ahora que el potencial es de la forma

$$V(x) = \gamma \left[\delta(x) - \delta(x - x_o)\right] .$$

Calcule el coeficiente de transmisión para x_o=$2\pi/k$.

Problema 7: *Barrera de potencial.* Considere la barrera rectangular de potencial definida por

$$V(x) \;=\; \begin{cases} V_o & |x| < a \\ 0 & |x| \geq a \end{cases}$$

a) Halle las autofunciones pares e impares del hamiltoniano para valores de energía $E > V_o$ y para $0 < E < V_o$.

b) Obtenga los coeficientes de transmisión y reflexión para $E > V_o$ y para $0 < E < V_o$.
Ayuda: Puede usar combinaciones lineales de las soluciones halladas en el ítem anterior.

c) Analice el valor del coeficiente de transmisión para E/V_o tendiendo a cero e infinito. Grafique el coeficiente de transmisión hallado para valores de E/V_o entre 0 y 5, tomando $\sqrt{2mV_o}\,a/\hbar = 2$. Estime cómo espera que cambie el gráfico al aumentar el valor de a. Compare sus resultados con lo que esperaría en el caso clásico.

d) Considere el caso $a \to 0, V_o \to \infty$, con $2aV_o$=cte. Verifique que recupera el resultado del punto **6.d**.

e) Escribiendo la solución general de la ecuación de Schrödinger como

$$\psi(x) = \begin{cases} A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} & x < -a \\ A_2 e^{ikx} + B_2 e^{-ikx} & x > a \end{cases}$$

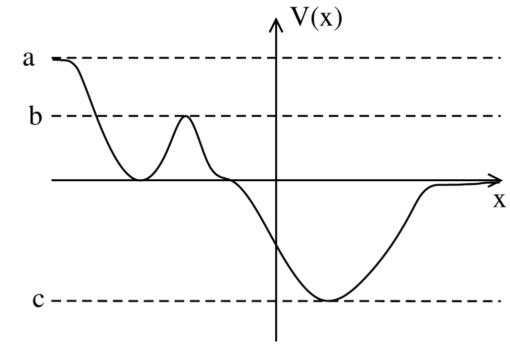
encuentre la matriz M que relaciona los parámetros A_1, B_1 con A_2, B_2. ¿Cuánto valen los coeficientes de transmisión y reflexión en términos de los elementos de esta matriz?

Problema 8: Considere una partícula unidimensional de masa m en el potencial de la figura.

a) ¿Qué puede decir acerca de la estructura cualitativa del espectro del hamiltoniano?

b) ¿Hay estados ligados? ¿En qué intervalo? ¿Qué comportamiento asintótico tienen las autofunciones?

c) ¿En qué intervalo(s) de energía espera que haya reflexión total o reflexión parcial? Indique una energía por encima de la cual espera resonancias.



$a > b > 0 > c\,;\ \lim_{x\to\infty} V(x) = 0\,,\quad \lim_{x\to-\infty} V(x) = a$

Problema 9: *Potencial periódico de Kronig-Penney.* Considere una partícula bajo la acción de un potencial periódico en el cual las barreras de potencial tienen amplitud V_o y ancho $2a$ y las zonas de potencial nulo tienen ancho $2b$.

a) Muestre que el hamiltoniano conmuta con el operador de traslación discreta T_d, tal que $T_d\,\psi(x) = \psi(x+d)$, donde d es el período espacial del potencial. Muestre también que esto implica que existe una base de autofunciones de Bloch, tales que $\psi(x+d) = e^{i\phi}\psi(x)$.

b) En cada sector con potencial nulo, con $nd < x < (n+1)d$, exprese la función de onda como $\psi(x) = A_n e^{ikx} + B_n e^{-ikx}$. Escriba qué condición impone el resultado del ítem anterior sobre los coeficientes A_n, B_n.

c) Explique por qué para este problema, para los coeficientes A_n, B_n y A_{n+1}, B_{n+1} tiene que valer también la relación encontrada en el problema **7**.

d) Combine las dos relaciones halladas entre A_n, B_n y A_{n+1}, B_{n+1} para encontrar, para un dado ϕ, una condición necesaria para que el problema tenga solución no nula.

***Problema 10:** *El peine de Dirac.* Dado un potencial periódico construido con una secuencia de funciones delta de Dirac a una distancia a entre ellas

$$V(x) = \gamma \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x + na)\,; \quad \gamma > 0 .$$

a) Determine las bandas de energía para este potencial.

b) Verifique que el resultado del problema **9.d** coincide con este cuando se toma el límite para $a \to 0$, $V_o \to \infty$, manteniendo aV_o constante.

* Opcional.