La función de onda

Ejercicio 1: Preliminares matemáticos (I): la delta de Dirac

La distribución delta de Dirac es una función generalizada definida por la relación

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \delta(x-x_0)f(x) = \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \mathrm{d}x\ \delta(x-x_0)f(x) = f(x_0)$$

para toda función suave en $x = x_0$, o bien una función generalizada que verifica

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \delta(x-x_0) = 1 \quad \text{y} \quad \delta(x) = 0,\ \forall x \neq 0.$$

i) Demuéstrese que la delta de Dirac se puede escribir como el límite cuando $L \to \infty$ ó $\epsilon \to 0^+$ de las siguientes funciones:

(a) $\delta_L(x) = \dfrac{1}{2\pi}\displaystyle\int_{-L}^{L} \mathrm{d}k\ \mathrm{e}^{ikx} = \dfrac{\sin Lx}{\pi x}$

(b) $\delta_\epsilon(x) = \dfrac{1}{(2\pi\epsilon^2)^{1/2}}\ \mathrm{e}^{-x^2/2\epsilon^2}$

(c) $\delta_\epsilon(x) = \dfrac{\epsilon/\pi}{x^2+\epsilon^2}$

(d) $\delta_\epsilon(x) = \dfrac{\theta(x+\frac{\epsilon}{2}) - \theta(x-\frac{\epsilon}{2})}{\epsilon} \equiv \dfrac{\mathrm{d}\theta(x)}{\mathrm{d}x}, \quad \theta(x) =$ función escalón de Heaviside.

ii) Compruébense las siguientes propiedades de la delta de Dirac:

(a) $\delta(x) = \delta(-x)$

(b) $\delta'(x) = -\delta'(-x)$

(c) $x\delta(x) = 0$

(d) $x\delta'(x) = -\delta(x)$

(e) $x^2\delta'(x) = 0$

(f) $\delta(ax) = \dfrac{1}{|a|}\delta(x), \quad a \neq 0$

(g) $\delta(f(x)) = \displaystyle\sum_{f(x_i)=0} \dfrac{1}{|f'(x_i)|}\delta(x-x_i)$

(h) $f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a)$

(i) $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \delta(x-a)\ \delta(x-b) = \delta(a-b)$

(j) $\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \delta'(x-a)\ \delta(x-b) = \delta'(b-a)$

(k) $\delta'(x) = \dfrac{i}{2\pi}\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k\ k\mathrm{e}^{ikx}$

Ejercicio 2: Preliminares matemáticos (II): la transformada de Fourier

Considérese la función $f(x)$ definida en el intervalo $-\infty < x < \infty$. Si podemos expresar $f(x)$ en la forma

$$f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \; \mathrm{e}^{ikx} g(k)$$

entonces $g(k)$ es la *transformada de Fourier* de $f(x)$.

i) Demuéstrese, utilizando la primera de las representaciones de la delta de Dirac del ejercicio anterior, que esta relación es invertible:

$$g(k) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \mathrm{e}^{-ikx} f(x),$$

es decir $f(x)$ es la *transformada inversa de Fourier* de $g(k)$.

ii) Calcúlese la transformada de Fourier de las siguientes funciones: [*soluciones*]

(a) $f(x) = \delta(x - x_0)$ — $g(k) = (2\pi)^{-1/2}\mathrm{e}^{-ikx_0}$

(b) $f(x) = c_0 \mathrm{e}^{ik_0x}$ — $g(k) = (2\pi)^{1/2} c_0 \delta(k - k_0)$

(c) $f(x) = c_0 \cos k_0 x$ — $g(k) = (2\pi)^{1/2} c_0 \dfrac{\delta(k - k_0) + \delta(k + k_0)}{2}$

(d) $f(x) = c_0 \sin k_0 x$ — $g(k) = (2\pi)^{1/2} c_0 \dfrac{\delta(k - k_0) - \delta(k + k_0)}{2i}$

(e) $f(x) = c_0 \mathrm{e}^{-x^2/2\sigma^2} \; \mathrm{e}^{ik_0x}$ — $g(k) = c_0 \sigma \mathrm{e}^{-(k-k_0)^2\sigma^2/2}$

(f) $f(x) = c_0 \mathrm{e}^{-a|x|} \; \mathrm{e}^{ik_0x}$ — $g(k) = (2/\pi)^{1/2} c_0 \dfrac{a}{a^2 + (k - k_0)^2}$

(g) $f(x) = \begin{cases} c_0 \mathrm{e}^{ik_0x}, & |x| < A \\ 0, & |x| > A \end{cases}, \quad A > 0$ — $g(k) = (2/\pi)^{1/2} c_0 \dfrac{\sin(k - k_0)A}{k - k_0}$

(h) $f(x) = c_0 \dfrac{\sin ax}{x}, \quad a > 0$ — $g(k) = \begin{cases} (\pi/2)^{1/2} c_0 & , \ |k| < a \\ 0 & , \ |k| > a \end{cases}$

Ejercicio 3: Representaciones de posiciones y de momentos: paquetes de ondas

La transformada de Fourier lleva una función del espacio de posiciones al de momentos y viceversa. En efecto, a partir de los elementos de matriz de cambio de base:

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \mathrm{e}^{ipx/\hbar} \Rightarrow \begin{cases} \langle x|\psi\rangle \equiv \psi(x) = \dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p \; \mathrm{e}^{ipx/\hbar} \; \hat{\psi}(p) \\ \langle p|\psi\rangle \equiv \hat{\psi}(p) = \dfrac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \; \mathrm{e}^{-ipx/\hbar} \; \psi(x). \end{cases}$$

Si la función de onda tiene momento p_0 bien definido, entonces es una *onda plana*:

$$\hat{\psi}(p) = \delta(p - p_0), \quad \psi(x) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \mathrm{e}^{ip_0x/\hbar}.$$

Un *paquete de ondas* es una superposición de ondas planas.

i) Escríbanse los paquetes $\psi(x) = f(x)$, donde las $f(x)$ son las funciones del ejercicio 2, *convenientemente normalizadas*, y $k_0 \equiv p_0/\hbar$.

ii) Escríbanse las correspondientes funciones de onda en la representación de momentos, $\hat{\psi}(p)$.

iii) Calcúlense $\langle x \rangle$, Δx, $\langle p \rangle$ y Δp para las funciones de onda anteriores, utilizando la representación de posiciones o de momentos según resulte más conveniente.

iv) ¿Constituyen un *paquete mínimo*, es decir $\Delta x \, \Delta p = \hbar/2$?

Ejercicio 4: Función de onda, probabilidad y evolución temporal

Una partícula de masa m se encuentra confinada en una caja monodimensional, de modo que su posición es $0 \le x \le a$ [pozo cuadrado infinito de anchura a]. Supongamos que en el instante $t = 0$ su función de onda normalizada es

$$\psi(x, t = 0) = \sqrt{\frac{8}{5a}} \left[1 + \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right)\right] \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right).$$

i) ¿Cuál es la función de onda en un instante posterior, t?

ii) ¿Cuál es la energía promedio de la partícula en función del tiempo?

iii) ¿Cuál es la probabilidad de que la partícula se encuentre en la mitad izquierda de la caja transcurrido un tiempo t?

Ejercicio 5: Densidades de probabilidad y de corriente de probabilidad

i) Pruébese que para un *estado estacionario* en un nivel *no degenerado* la densidad de probabilidad $\vec{J}(x)$ es nula.

ii) Consideremos como ejemplo el siguiente estado degenerado, que es propio del ocilador armónico tridimensional de frecuencia ω y masa M,

$$\psi(x) = \pi^{-3/4} \alpha^{5/2} (x + iy) \exp(-\alpha^2 r^2/2), \quad \alpha = (M\omega/\hbar)^{1/2}.$$

Compruébese que en este caso la densidad de corriente no es nula.

iii) ¿Es estacionario el estado anterior?

Ejercicio 6: Propagación de paquetes de ondas: propagador retardado

i) Calcúlese el propagador retardado para la evolución libre en una dimensión.

ii) Calcúlese la evolución libre de un paquete que en $t = 0$ es mínimo (onda plana modulada por función gaussiana). ¿Deja de ser mínimo este paquete para $t > 0$?

iii) Supongamos una partícula de masa M que se mueve libremente sobre una recta cuya función de onda en el instante $t = 0$ es:

$$\psi(x, t = 0) = \frac{1}{(\pi a^2)^{1/4}} \mathrm{e}^{-x^2/2a^2} \mathrm{e}^{i p_0 x/\hbar}.$$

(a) Hállese el momento de la partícula y su incertidumbre tras un tiempo t.

(b) Calcúlese la posición de la partícula y su incertidumbre tras un tiempo t.

(c) Sea la incertidumbre inicial en la posición de 1 Å. ¿En que instante t es la incertidumbre en la posición igual a 1 mm si la partícula es un electrón? ¿y si $M = 1\ g$? [$M_e = 9 \times 10^{-28}$ g]

Ejercicio 7: Teorema de Ehrenfest y el límite clásico

Sea una partícula que se mueve en una dimensión con una energía potencial $V(x)$.

i) Escríbase la evolución temporal de los valores esperados de la posición y el momento de la partícula [*teorema de Ehrenfest*]. Intégrense estas ecuaciones y compárense con las ecuaciones clásicas del movimiento de una partícula para el caso $V(x) = -Fx$, donde F es una constante.

ii) ¿Es cierto en general que el movimiento del centro del paquete de ondas obedece las leyes clásicas? Tómese como ejemplo un caso más general: $V(x) = -\lambda x^n$.

Ejercicio 8: Teorema del virial

El *teorema del virial* establece que $2\langle K\rangle_\psi = \langle \vec{x}\cdot\nabla V(\vec{x})\rangle_\psi$ siendo K la energía cinética de un estado estacionario ψ con energía potencial V. Pruébese:

i) El teorema del virial para un potencial $V(x) = kx^n$: $\quad 2\langle K\rangle = n\langle V\rangle$.

ii) Si $V(\vec{x})$ decrece radialmente $\forall x \neq 0$, $\quad H$ carece de estados propios.

iii) Si $\vec{x}\cdot\nabla V(\vec{x}) \leq -\gamma V(\vec{x}), \forall\vec{x} \neq 0, 0 < \gamma < 2,$ $\quad H$ no tiene autovalores $E \geq 0$.

iv) Si $V(r) = -g\mathrm{e}^{-kr}/r, \quad \vec{x}\cdot\nabla V(r) \leq -V(r) + gk$ y todo autovalor de la energía $E < gk$.