Física 4

Segundo Cuatrimestre 2013

Guía 7: Principio de incertidumbre, Operadores, Schrödinger

1. Utilizar el principio de incertidumbre para estimar el orden de magnitud del diámetro de un átomo. Comparar el resultado con el radio de Bohr de la primera órbita del átomo de hidrógeno. **Ayuda**: suponer que el electrón está confinado en una región de longitud δx. Esto implica que tiene una energía cinética no nula; además hay una energía potencial del orden de magnitud de $-e^2/\delta x$. Hallar δx de manera tal que la energía total sea un mínimo y evaluar la expresión para ésta.

2. Mostrar que si uno define

$$\begin{aligned}\Delta x &= \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} \\ \Delta p &= \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2}\end{aligned}$$

   es decir que se usa el valor cuadrático medio, entonces la relación de incerteza de Heisenberg se lee

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

   Ayuda:Considere primero la integral

$$I(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} \left| x\psi(x) + \lambda \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right|^2 \mathrm{d}x$$

   con $\lambda \in \Re$. Nótese que $I(\lambda) \geq 0$. Desarrollar el integrando, usar la definición de valores medios y el hecho que $I(\lambda)$ será una forma cuadrática en λ definida positiva. Para obtener el resultado general, repita el procedimiento con la función $\exp(i\langle p\rangle x/\hbar)\,\psi(x-\langle x\rangle)$. Verifique su resultado con los siguientes casos (discuta cuidadosamente el ítem (c)): ¿Cómo expresaría el principio de incertidumbre en este caso?

   a) $\psi(x) = A\exp(-a^2x^2)$

   b) $\psi(x) = \begin{cases} A\exp(ax) & x \leq 0 \\ A\exp(-ax) & x \geq 0 \end{cases}$

   c) $\psi(x) = \begin{cases} A\exp(ip_0x/\hbar) & -a/2 < x < a/2 \\ 0 & \text{si no} \end{cases}$

3. Demostrar que si un operador $\hat{F}$ es hermítico, el valor medio de la magnitud física F es real. Definición: decimos que el operador $\hat{F}$ es hermítico si y solo si $\hat{F}^t = \hat{F}^*$, es decir si

$$\int \phi^* \hat{F}\psi = \int \psi \left(\hat{F}\phi\right)^*$$

4. Hallar la expresión del operador $\hat{p}_x$ en la representación de coordenadas y la del operador $\hat{x}$ en la representación de los momentos. Demostrar que son hermíticos.

5. Determinar cuáles de las siguientes funciones son autofunciones del operador $\hat{p}_x$ y del operador $\hat{p}_x^2$:

   a) $\psi(x) = A\sin(kx)$

   b) $\psi(x) = A\cos(kx) + iA\sin(kx)$

   c) $\psi(x) = A\exp(ikx) + B\exp(-ikx)$

   d) $\psi(x) = A\sin(kx) + A\cos(kx)$

   e) $\psi(x) = A\exp i(x-a); \quad a = \text{cte}$

f) $\psi(x) = A\exp(ikx) + iA\exp(-ikx)$

g) $\psi(x) = A\exp(ax^2) \qquad a = \text{cte, real}$

h) $\psi(x) = A\exp(ax) \qquad a = \text{cte, real}$

6. Demostrar que las combinaciones lineales de los operadores $\hat{A} + i\hat{B}$ y $\hat{A} - i\hat{B}$ no son hermíticas aunque $\hat{A}$ y $\hat{B}$ sí lo sean.

7. Determinar para qué potenciales $V(x)$, las siguientes funciones son autofunciones del operador energía $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + V(\hat{x})$ (Hamiltoniano)

   a) $\psi(x) = A\exp(ax) + B\exp(-ax)$

   b) $\psi(x) = A\exp(ikx) + iB\exp(-ikx)$

   c) $\psi(x) = A\exp(-ax^2/2)$

8. Sea una partícula en una dimensión cuya función de onda es

$$\psi(x) = A\frac{\exp(ip_0x/\hbar)}{\sqrt{a^2+x^2}}$$

   donde a, p_0 y A son constantes.

   a) Determinar A para que la densidad de probabilidad esté normalizada.

   b) Si se mide la posición de la partícula ¿cuál es la probabilidad de que el resultado esté comprendido entre $-a/\sqrt{3}$ y $a/\sqrt{3}$?

   c) Calcular el valor medio del operador $\hat{p}_x$.

9. Para comprimir una "caja" dentro de la cual se encuentra una partícula se necesita cierta energía. Esto sugiere que la partícula ejerce una fuerza sobre las paredes. Con esta hipótesis en mente, y considerando que cuando la longitud de la "caja" cambia en $\mathrm{d}l$, la energía cambia por medio de la expresión $\mathrm{d}E = -F\mathrm{d}l$, calcular la expresión de la fuerza F. ¿A qué distancia se obtiene $F = 1\,\mathrm{N}$ cuando un electrón se encuentra en el estado con número cuántico $n = 1$?

10. Teniendo en consideración los resultados del ejercicio 7 de la guía 6:

    a) Mostrar que el valor medio de la posición $\langle x\rangle$ de una partícula en una caja unidimensional es

$$\langle x\rangle = \frac{1}{2}a$$

    donde a es la longitud de la caja. Evaluar la desviación cuadrática media de la posición Δx en este caso. ¿Cuál es su significado físico?

    b) Realizar los mismos cálculos para el momento lineal p.

    c) Evaluar el producto de las desviaciones cuadráticas medias y evaluar $\Delta x\Delta p$. ¿Depende del número cuántico?

11. Sea la siguiente función de onda:

$$\psi(x) = A\exp\left\{-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}\right\}e^{ip_0x/\hbar}$$

    Hallar:

    a) La distribución de probabilidades en x y el valor de la constante A.

    b) $\langle x\rangle$ y $\langle p_x\rangle$, y las dispersiones correspondientes.

    c) La función de distribución del impulso $\phi(p)$ y la distribución de probabilidades en p.

d) El valor medio de la energía cinética.

e) $\psi(x,t)$ y la distribución de probabilidades para x y para p en el instante t.

f) Δx y Δp en el instante t, y el movimiento del centro del paquete.

12. Sea la siguiente función de onda:

$$\psi(x,t) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-\frac{(k-k_0)^2}{k_0^2}\right] e^{i(kx-\omega t)} \mathrm{d}k$$

donde k_0 es una constante positiva y $A = 1/\sqrt{k_0}$. Calcular el valor medio del impulso lineal p_x y su dispersión.

13. Se define el conmutador entre dos operadores lineales $\hat{A}$ y $\hat{B}$ como:

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]\phi \equiv \hat{A}\left(\hat{B}\phi\right) - \hat{B}\left(\hat{A}\phi\right)$$

donde ϕ es una función arbitraria. Algunas de las propiedades de los conmutadores son las siguientes:

$$\begin{aligned} \left[\hat{A},\hat{B}\right] &= -\left[\hat{B},\hat{A}\right] \\ \left[\hat{A},\hat{A}\right] &= 0 \\ \left[\hat{A}+\hat{B},\hat{C}\right] &= \left[\hat{A},\hat{C}\right] + \left[\hat{B},\hat{C}\right] \\ \left[\hat{A}\star\hat{B},\hat{C}\right] &= \hat{A}\left[\hat{B},\hat{C}\right] + \left[\hat{A},\hat{C}\right]\hat{B} \end{aligned}$$

Calcular $[\hat{x},\hat{p}_x]$, $\left[\hat{x},\hat{p}_x^2\right]$, $\left[\hat{x}^{-1},\hat{p}_x\right]$, $[\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x, \hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y]$ y sus variantes intercambiando las cooordenadas, $\left[\hat{x},\hat{H}\right]$ y $\left[\hat{p}_x,\hat{H}\right]$. Nota: considere que $\hat{H} = \hat{p}_x^2/2m + V(\hat{x})$.

14. Demostrar que si dos operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ conmutan $\left(\left[\hat{A},\hat{B}\right] = 0\right)$, entonces existe una base de autofunciones ϕ común a ambos operadores (es decir $\hat{A}\phi = \alpha\phi$ y $\hat{B}\phi = \beta\phi$).

15. Si $\psi(x)$ es una función normalizable y continua, puede escribirse en términos de las autofunciones $\phi(x)$ de un operador hermítico $\hat{A}$ de la siguiente manera

$$\psi(x) = \sum_i c_i\phi_i(x)$$

con $\hat{A}\phi_i(x) = a_i\phi_i(x)$.

a) Obtener una expresión para los coeficientes c_i.

b) Calcular el valor medio de A. Interpretar físicamente la cantidad $|c_i|^2$.

16. El operador $\exp\left(\hat{A}\right)$ posee significado si se lo desarrolla en serie de potencias:

$$\exp\left(\hat{A}\right) \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!}\hat{A}^n$$

Mostrar que si ϕ es un autoestado de $\hat{A}$ con autovalor a, entonces es también autoestado de $\exp\left(\hat{A}\right)$. Determinar el autovalor.

17. Sea $\hat{H}$ el operador hamiltoniano de un sistema físico y $\phi_n(x)$ sus autoestados con autovalor E_n. Para un operador arbitrario $\hat{A}$ probar que $\left\langle\left[\hat{H},\hat{A}\right]_n\right\rangle = 0$, donde el subíndice n indica que el valor medio se toma sobre el estado $\phi_n(x)$.

18.

a) A partir de la ecuación de Schrödinger, y teniendo en cuenta que $\hat{H}$ es hermítico, demostrar que:

$$\frac{\mathrm{d}\langle A\rangle}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{i\hbar}\left\langle\left[\hat{A},\hat{H}\right]\right\rangle + \left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle$$

b) Con el resultado del punto anterior hallar $\langle \dot{x} \rangle$ y $\langle \dot{p} \rangle$ (teorema de Ehrenfest). Interpretar físicamente el resultado.

19. Dada la función de onda:

$$\psi(x) = \begin{cases} A(1+ax)\exp(ax) & \text{para} \quad x \leq 0 \\ A(1-ax)\exp(-ax) & \text{para} \quad x \geq 0 \end{cases}$$

a) Normalizar esta función de onda.

b) Hallar la energía total E y la potencial $V(x)$ suponiendo que $V(x) \to 0$ cuando $x \to \pm\infty$.

c) Calcular los valores medios de x, p y la dispersión correspondiente a cada uno.

20. Escribir la ecuación de Schrödinger para:

a) la partícula libre

b) una partícula bajo la influencia de una fuerza uniforme y constante

c) el átomo de hidrógeno

d) el átomo de helio

e) oscilador armónico.

21. Mostrar que la ecuación de Schrödinger es separable cuando el potencial de interacción $V(t)$ depende solamente del tiempo y es uniforme en el espacio. Resolver las ecuaciones resultantes cuando $V(t) = V_0 \cos(\omega t)$ ¿Es estacionaria la función de estado resultante?

22. Operador paridad. El operador paridad Π se define mediante la relación

$$\Pi\psi(x) = \psi(-x)$$

a) Mostrar que las autofunciones de Π son simétricas o antisimétricas, con autovalores $+1$ ó -1 respectivamente.

b) Demostrar que si $\hat{A}(\hat{x}) = \hat{A}(-\hat{x})$, $\hat{A}(\hat{x})$ conmuta con Π. ¿Qué se puede decir de la paridad de las autofunciones de $\hat{A}$?