Física Cuántica I

Alejandro José Florido Tomé
Álvaro Beltrán Santiago

I. Datos

Para la realización de la tarea, hemos tomado la fecha d=19, m=1, a=1.

Una partícula que se mueve en un poxo infinito de potencial entre $x = 0$ y $x = \pi$ mediante la siguiente función de onda:

$$\psi(x, 0) = \frac{p}{d}\varphi_1(x) + \frac{p}{m}\varphi_2(x) \tag{I.1}$$

donde $\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} sin(nx)$ y $E_n = cn^2\hbar^2$, son los estados estacionarios y las correspondientes energías del pozo infinito, con $c = 1J^(-1) \cdot s^(-2)$. p es un parámetro real sin dimensiones. Se pide:

i) Normalizar correctamente la función de onda.

Como nos encontramos ante un pozo infinito de potencial entre x=0 x=π, podemos escribir el potencial de la siguiente manera:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{si } x \leq 0 \\ 0 & \text{si } 0 < x < \pi \\ \infty & \text{si } x \geq \pi \end{cases} \tag{I.2}$$

Para normalizar la función de onda, usaremos el producto escalar en el espacio de Hilbert, donde se cumplirá que:

$$(\psi(x, 0), \psi(x, 0)) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \psi^*(x, 0)\psi(x, 0) = 1 \tag{I.3}$$

Sustituyendo la función de onda:

$$(\psi(x, 0), \psi(x, 0)) = (\frac{p}{d}\varphi_1(x) + \frac{p}{m}\varphi_2(x), \frac{p}{d}\varphi_1(x) + \frac{p}{m}\varphi_2(x)) = 1 \tag{I.4}$$

Como el producto escalar es antilineal respecto de la primera función:

$$1 = \left(\frac{p}{d}\right)^* \left(\varphi_1(x), \frac{p}{d}\varphi_1(x) + \frac{p}{m}\varphi_2(x)\right) + \left(\frac{p}{m}\right)^* \left(\varphi_2(x), \frac{p}{d}\varphi_1(x) + \frac{p}{m}\varphi_2(x)\right) \tag{I.5}$$

Podemos continuar teniendo en cuenta que el número complejo de un número real (tal y como son p, d y m) es un número real, y que el producto escalar es lineal respecto de la segunda función:

$$1 = \frac{p^2}{d^2} (\varphi_1(x), \varphi_1(x)) + \frac{p^2}{d \cdot m} (\varphi_1(x), \varphi_2(x)) + \frac{p^2}{m \cdot d} (\varphi_2(x), \varphi_1(x)) + \frac{p^2}{m^2} (\varphi_2(x), \varphi_2(x)) \tag{I.6}$$

Como las funciones $\varphi_n(x)$ conforman una base ortonormal (si queremos que la función sea ortonormal tal que se pueda escribir comoo combinación lineal de las funciones $\varphi_n(x)$, se debe cumplir que la base conformada por dichas funciones sea ortonormal) que será discreta, sabemos que el producto escalar de los elementos de dicha base satisface que:

$$(\varphi_i(x), \varphi_j(x)) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si i=j} \\ 0 & \text{si i} \neq \text{j} \end{cases} \tag{I.7}$$

Por lo que, teniendo esto en cuenta, se nos simplifica la expresión I.6 en:

$$\frac{p^2}{d^2} + \frac{p^2}{m^2} = 1 = p^2 \left(\frac{m^2 + d^2}{m^2 d^2}\right) \tag{I.8}$$

Despejando:

$$p = \pm \frac{md}{\sqrt{m^2 + d^2}} \tag{I.9}$$

Sustituyendo los valores de m=1 y d=19, obtendremos la solución de este primer apartado, que tomaremos como positiva:

$$p = \frac{19}{\sqrt{362}} \tag{I.10}$$

ii) Calcular el valor medio de la energía de la partícula en J.

Para hallar el valor medio de la energía, usaremos la siguiente relación:

$$\overline{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \psi^*(x) \hat{H} \psi(x) \tag{I.11}$$

Donde $\hat{H}$ corresponde con el operador Hamiltoniano. Como nos encontramos ante una función de onda en el instante inicial, que se escribe como combinación lineal de las funciones $\varphi_n(x)$, sabemos que estas corresponderán con las autofunciones del operador Hamiltoniano de autovalor E_n, y verificarán la ecuación:

$$\hat{H}\varphi_n(x) = E_n \varphi_n(x) \tag{I.12}$$

Con esto en mente, si sustituimos la función de onda en la ecuación I.11:

$$\overline{E} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \psi^*(x) \hat{H} \left(\frac{p}{d}\varphi_1(x) + \frac{p}{m}\varphi_2(x) \right) = \frac{p}{d} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \psi^*(x) \hat{H} \varphi_1(x) + \frac{p}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \psi^*(x) \hat{H} \varphi_2(x) \tag{I.13}$$

Si aplicamos la ecuación I.12 y sustituimos $\psi^*(x)$:

$$\begin{aligned} \overline{E} &= \frac{p}{d} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{p}{d}\varphi_1^*(x)\mathrm{d}x + \frac{p}{m}\varphi_2^*(x) \right) E_1 \varphi_1(x) + \frac{p}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \left(\frac{p}{d}\varphi_1^*(x) + \frac{p}{m}\varphi_2^*(x) \right) E_2 \varphi_2(x) = \\ &= E_1 \frac{p^2}{d^2} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_1^*(x)\varphi_1(x)\mathrm{d}x + E_1 \frac{p^2}{d \cdot m} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_2^*(x)\varphi_1(x)\mathrm{d}x + E_2 \frac{p^2}{m \cdot d} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_1^*(x)\varphi_2(x)\mathrm{d}x + E_2 \frac{p^2}{m^2} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_2^*(x)\varphi_2(x)\mathrm{d}x = \\ &= E_1 \frac{p^2}{d^2}(\varphi_1(x), \varphi_1(x)) + E_1 \frac{p^2}{d \cdot m}(\varphi_2(x), \varphi_1(x)) + E_2 \frac{p^2}{m \cdot d}(\varphi_1(x), \varphi_2(x)) + E_2 \frac{p^2}{m^2}(\varphi_2(x), \varphi_2(x)) \end{aligned}$$

Recordando la ecuación I.7 y que $E_n = cn^2\hbar^2$, además de que tomaremos un valor de $\hbar = 1,054571 J \cdot s$:

$$\overline{E} = E_1 \frac{p^2}{d^2} + E_2 \frac{p^2}{m^2} = c1^2\hbar^2 \frac{\frac{19^2}{362}}{19^2} + c2^2\hbar^2 \frac{\frac{19^2}{362}}{1^2} = \frac{1 + 4 \cdot 19^2}{362} \cdot \frac{1}{J \cdot s^2}(1,054571 \cdot 10^{-34})^2 J^2 \cdot s^2 = 4,439263 \cdot 10^{-68} J$$

Por lo que la energía media será:

$$\overline{E} = 4,439263 \cdot 10^{-68} J \tag{I.14}$$

iii) Calcular la función de onda en el instante t.

A partir de la función de onda en el instante inicial, que es lo que nos dan, podemos hallar la función de onda en el instante t teniendo en cuenta que tenemos soluciones estacionarias que evolucionan con el tiempo con una energía bien definida (y, por tanto, con una frecuencia bien definida):

$$\psi(x,t) = \frac{p}{d} e^{-iE_1 t/\hbar} \varphi_1(x) + \frac{p}{m} e^{-iE_2 t/\hbar} \varphi_2(x) = \frac{\frac{19}{\sqrt{362}}}{19} e^{-ic\hbar^2 t/\hbar} \sqrt{\frac{2}{\pi}} sin(x) + \frac{\frac{19}{\sqrt{362}}}{1} e^{-ic4\hbar^2 t/\hbar} \sqrt{\frac{2}{\pi}} sin(2x) \tag{I.15}$$

Así que la función de onda en el instante t será, en función de c=1/(Js^2) para que se vea claramente que la exponencual está elevada a un número adimensional:

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{1}{181\pi}} (e^{-ic\hbar t} sin(x) + 19 e^{-i4c\hbar t} sin(2x)) \tag{I.16}$$

iv) Calcular el valor medio de la posición en el instante t.

Para este apartado, donde buscamos $< x >$, tendremos que resolver:

$$< x >= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \psi^*(x,t) x \psi(x,t) =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \left(\left[\sqrt{\frac{1}{181\pi}} (e^{-ic\hbar t} sin(x) + 19 e^{-i4c\hbar t} sin(2x)) \right]^* \cdot x \cdot \left[\sqrt{\frac{1}{181\pi}} (e^{-ic\hbar t} sin(x) + 19 e^{-i4c\hbar t} sin(2x)) \right] \right) =$$

$$= \frac{1}{181\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \left(\left[e^{ic\hbar t} sin(x) + 19 e^{i4c\hbar t} sin(2x) \right] \cdot x \cdot \left[e^{-ic\hbar t} sin(x) + 19 e^{-i4c\hbar t} sin(2x) \right] \right)$$

Como la función de onda es distinta de cero en la región en la que $0 < x < \pi$, estos serán los límites de integración, ya que fuera de dicho intervalo la función de onda se anula:

$$< x >= \frac{1}{181\pi} \int_0^{\pi} \mathrm{d}x \cdot x \left(sin^2(x) + 19^2 sin^2(2x) + 19 e^{3ic\hbar t} sin(2x) sin(x) + 19 e^{-3ic\hbar t} sin(2x) sin(x) \right) =$$

$$= \frac{1}{181\pi} \left[\int_0^{\pi} x sin^2(x) \mathrm{d}x + 19^2 \int_0^{\pi} x sin(x) sin(2x) \mathrm{d}x + 19 (e^{3ic\hbar t} + e^{-3ic\hbar t}) \int_0^{\pi} x sin(x) sin(2x) \mathrm{d}x \right]$$

Usaremos las siguientes propiedades:

$$2cos(u) = e^{iu} + e^{-iu} \tag{I.17}$$

$$\int_0^{\pi} x sin^2(x) \mathrm{d}x = \frac{\pi^2}{4} \tag{I.18}$$

$$\int_0^{\pi} x sin^2(2x) \mathrm{d}x = \frac{\pi^2}{4} \tag{I.19}$$

$$\int_0^{\pi} x sin(x) sin(2x) \mathrm{d}x = -\frac{8}{9} \tag{I.20}$$

Por lo que si sustituimos las anterior expresiones en el valor medio de x, llegaremos a la solución, teniendo en cuenta que c=1 $J^{-1} \cdot s^{-2}$ y $\hbar = 1,054571 \cdot 10^{-34} J \cdot s$:

$$< x >= \frac{1}{181\pi} \left[\frac{\pi^2}{4} + 19^2 \frac{\pi^2}{4} + 19 \cdot 2cos(3c\hbar t) \left(-\frac{8}{9} \right) \right] = \frac{\pi}{2} - \frac{304}{1629\pi} cos(3c\hbar t) \tag{I.21}$$

v) Representar gráficamente el valor medio de la posición en función del tiempo.

Para ello, usaremos Wolfram alpha:

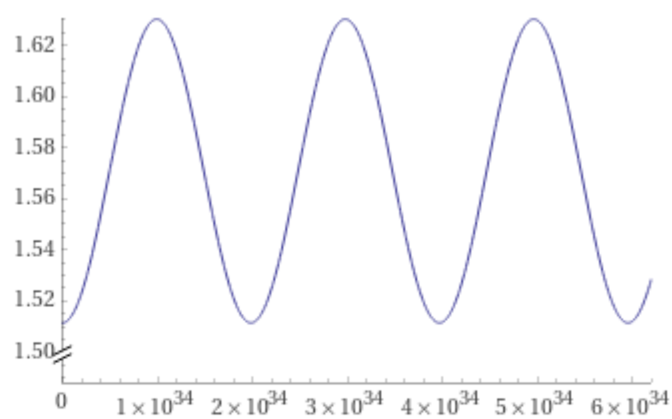

Figura 1. Representamos $< x >$ frente al tiempo.

Se puede apreciar que toma la forma de un coseno, cosa lógica ya que el valor medio de la posición depende de dicha función, y se puede ve que el máximo valor que puede hallar se alcanza cuando el argumento del coseno es un múltiplo de pi/2, donde $< x >$ valdrá $\pi/2$. Además, hemos necesitado tomar tiempos del orden de 10^{34} para apreciar la forma, debido a que el argumento del coseno depende de $\hbar$, lo que hace que varíe muy lentamente.