Ejercicio

Considere un Hamiltoniano unidimensional dependiente del tiempo de la forma

$$\hat{H}(t) = e^{-\frac{\gamma}{m}t}\frac{\hat{p}^2}{2m}. \tag{1}$$

1. Haciendo uso del teorema de Ehrenfest, escriba las derivadas temporales de los valores medios de $\hat{x}$ y $\hat{p}$. Luego, muestre que

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{x}\rangle = -\gamma\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle \tag{2}$$

   y determine a qué problema físico se corresponde. Notar además que $\langle\hat{p}\rangle \neq m\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle$ y por ende p no está asociado a la velocidad de la partícula en este problema.

2. Encuentre los autovalores $E_n(t)$ y las autofunciones del Hamiltoniano $\phi_n(x,t)$ para todo tiempo t asumiendo que la partícula se encuentra encerrada en una caja de lado L. Note que las ϕ_n no dependen del tiempo y decida si este resultado es general o no. Determine si las ϕ_n son autofunciones $\hat{p}$ y de $\hat{p}^2$ y discuta los resultados.

3. Basado en el inciso anterior, muestre que $\psi_n(x,t) = \phi_n(x)\, e^{-\frac{\imath}{\hbar}\int_0^t E_n(t')dt'}$ es solución de la ecuación de Schrodinger dependiente del tiempo.

4. Resuelva el problema clásico y encuentre la energía en función del tiempo. Decida si la energía mecánica clásica tiene la misma dependencia temporal que los autovalores de H y discuta los resultados obtenidos.

5. Si inicialmente la función de onda esta dada por

$$\psi(x,0) = A_1\phi_1(x) + A_2\phi_2(x), \tag{3}$$

   con $A_i \in \mathbb{R}$ tal que $A_1^2 + A_2^2 = 1$, encuentre la densidad de probabilidad a tiempo t y halle $\langle x\rangle(t)$. Decida si se cumple o no el teorema de Ehrenfest, incluso sin disipación, y discuta los resultados. Grafique $\langle x\rangle(t)$ tanto para $\gamma = 0$ como para $\gamma \neq 0$.

Resolución

Para responder la primera pregunta, usamos el teorema de Ehrenfest

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle = -\frac{\imath}{\hbar}\left\langle\left[\hat{p},\hat{H}(t)\right]\right\rangle = 0, \tag{4}$$

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle = -\frac{\imath}{\hbar}\left\langle\left[\hat{x},\hat{H}(t)\right]\right\rangle = -\frac{\imath}{\hbar}\frac{e^{-\frac{\gamma}{m}t}}{2m}\left\langle\left[\hat{x},\hat{p}^2\right]\right\rangle = -\frac{\imath}{\hbar}\frac{e^{-\frac{\gamma}{m}t}}{2m}\left\langle\left[\hat{x},\hat{p}\right]\hat{p} + \hat{p}\left[\hat{x},\hat{p}\right]\right\rangle = -\frac{\imath}{\hbar}\frac{e^{-\frac{\gamma}{m}t}}{m}\imath\hbar\langle\hat{p}\rangle = e^{-\frac{\gamma}{m}t}\frac{\langle\hat{p}\rangle}{m}. \tag{5}$$

Luego, derivando se obtiene la Ecuación (2). Además, $\langle\hat{p}\rangle = e^{\frac{\gamma}{m}t}m\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle \neq m\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle$ y por ende p no está asociado a la velocidad de la partícula. El problema se corresponde al de una partícula libre en un medio viscoso. Notar ademas que $\left[\hat{p},\hat{H}\right] = 0$ y por lo tanto p es una cantidad conservada pero sin un significado físico claro.

Para la segunda pregunta, escribimos la ecuación de autovalores de H

$$-\frac{\hbar^2}{2m}e^{-\frac{\gamma}{m}t}\frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} = E(t)\,\phi. \tag{6}$$

Proponiendo como solución $\phi(x,t) = e^{\imath k(t)x}$ se obtiene la ecuación

$$\frac{\hbar^2}{2m}k^2(t)\,e^{-\frac{\gamma}{m}t} = E(t). \tag{7}$$

Luego, la solución mas general esta dada por

$$\phi(x,t) = A(t)\,e^{\imath k(t)x} + B(t)\,e^{-\imath k(t)x} = C(t)\cos(k(t)\,x) + D(t)\sin(k(t)\,x). \tag{8}$$

Notar que las $e^{\imath k(t)x}$ también son autofunciones de $\hat{p}$ y de $\hat{p}^2$, lo cual es de esperar ya que ambos operadores conmutan con $\hat{H}$ para todo tiempo.

Si la partícula se encuentra en una caja de lado L, se tiene que $\phi(0,t) = \phi(L,t) = 0$ por lo que $C(t) = 0$ y $k(t) = k_n(t) = k_n = \frac{n\pi}{L}$. La constante $D(t)$ se encuentra pidiendo que ϕ esté normalizada

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\phi(x,t)|^2\,dx = \int_0^L|\phi(x,t)|^2\,dx = |D(t)|^2\int_0^L\sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right)dx = |D(t)|^2\,\frac{L}{2} \Rightarrow D(t) = \sqrt{\frac{2}{L}}. \tag{9}$$

Luego, finalmente se tiene que

$$\phi(x,t) = \phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right). \tag{10}$$

El hecho de que las autofunciones no dependan del tiempo no es general en absoluto. Como contra ejemplo, puede verse fácilmente que en un oscilador armónico con frecuencia natural dependiente del tiempo las autofunciones dependen de t, ya que de hecho dependen de la frecuencia.

Ahora, estas ya no son mas autofunciones de $\hat{p}$ ya que una partícula encerrada en una caja ya no está libre, incluso en el caso no disipativo. En efecto, ahora $\hat{H}(t) = e^{-\frac{\gamma}{m}t}\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)$, donde V es nulo entre 0 y L e infinito en otro lado, por lo que se ve fácilmente que $\left[\hat{p}, \hat{H}(t)\right] \neq 0$. Sin embargo, las ϕ_n siguen siendo autofunciones de $\hat{p}^2$. Esto puede justificarse desde el punto de vista clásico, ya que la partícula rebota cada vez que choca contra la pared y si no hay disipasión conserva el modulo de su velocidad y por lo tanto también el p^2 (con disipasión no conserva su velocidad pero si el p^2 generalizado).

En cuanto a los autovalores, usando (7) se tiene que

$$E_n(t) = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{n^2\pi^2}{L^2}e^{-\frac{\gamma}{m}t} \tag{11}$$

y a diferencia de las autofunciones dependen del tiempo.

Para el tercer inciso, basta con notar que

$$\hat{H}(t)\psi_n(x,t) = \hat{H}(t)\phi_n(x)e^{-\frac{\imath}{\hbar}\int_0^t E(t')dt'} = e^{-\frac{\imath}{\hbar}\int_0^t E(t')dt'}\hat{H}(t)\phi_n(x) = E_n(t)\phi_n(x)e^{-\frac{\imath}{\hbar}\int_0^t E(t')dt'} = \imath\hbar\frac{d\psi_n}{dt}(x,t). \tag{12}$$

Es importante remarcar que esto vale porque ϕ_n no depende del tiempo y por lo tanto sale afuera de la derivada temporal.

En cuanto al cuarto inciso, como vimos anteriormente la ecuación de Newton correspondiente es

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -\gamma\frac{dx}{dt} \Rightarrow m\frac{dv}{dt} = -\gamma v \Rightarrow v(t) = v_0 e^{-\frac{\gamma}{m}t}. \tag{13}$$

Por lo tanto, la energía mecánica esta dada por

$$E(t) = \frac{1}{2}mv^2(t) = \frac{1}{2}mv_0^2 e^{-\frac{2\gamma}{m}t}. \tag{14}$$

Como puede observarse, decae exponencialmente al igual que los autovalores de H, pero con un factor diferente que es $\frac{2\gamma}{m}$. El motivo de esta discrepancia es que en este problema el Hamiltoniano no es la energía mecánica. En efecto, el análogo clásico de la ecuación (5) es $p = me^{\frac{\gamma}{m}t}v$ y por lo tanto escribiendo H en términos de v queda

$$H(t) = e^{-\frac{\gamma}{m}t}\frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2}me^{\frac{\gamma}{m}t}v^2(t) \neq E(t). \tag{15}$$

Finalmente, en el quinto inciso se tiene que

$$\psi(x,t) = A_1\phi_1(x)e^{-\frac{\imath}{\hbar}\int_0^t E_1(t')dt'} + A_2\phi_2(x)e^{-\frac{\imath}{\hbar}\int_0^t E_2(t')dt'} \tag{16}$$

ya que es solución de la ecuación de Schrodinger por ser combinación lineal de soluciones y satisface la condición inicial. Luego, como ademas $A_i \in \mathbb{R}$ se tiene que

$$|\psi(x,t)|^2 = A_1^2\phi_1^2(x) + 2A_1A_2\cos\left[\frac{1}{\hbar}\int_0^t \left[E_1(t') - E_2(t')\right]dt'\right]\phi_1(x)\phi_2(x) + A_2^2\phi_2^2(x) \tag{17}$$

y por lo tanto

$$|\psi(x,t)|^2 = \frac{2}{L}\left\{A_1^2\sin^2\left(\frac{\pi}{L}x\right) + 2A_1A_2\cos\left(\frac{3\pi^2\hbar}{2mL^2}\int_0^t e^{-\frac{\gamma}{m}t'}dt'\right)\sin\left(\frac{\pi}{L}x\right)\sin\left(\frac{2\pi}{L}x\right) + A_2^2\sin^2\left(\frac{2\pi}{L}x\right)\right\}. \tag{18}$$

Resolviendo las integrales y usando que $A_1^2 + A_2^2 = 1$ queda entonces

$$\langle x\rangle(t) = \int_0^L x|\psi(x,t)|^2 dx = L\left\{\frac{1}{2} - \frac{32}{9\pi^2}A_1A_2\cos\left[\frac{3\pi^2\hbar}{2\gamma L^2}\left(1 - e^{-\frac{\gamma}{m}t}\right)\right]\right\}. \tag{19}$$

Si $A_1A_2 = 0$, el teorema de Ehrenfest se satisface trivialmente ya que $\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{x}\rangle = \frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle = 0$. Sin embargo, si $A_1A_2 \neq 0$ no se satisface incluso para $\gamma = 0$ $(1 - e^{-\frac{\gamma}{m}t} \simeq \frac{\gamma}{m}t)$. Esto se debe a que la partícula esta encerrada en una caja y esto no está contemplado en la Ecuación (2) que supone que la partícula está libre.

Finalmente, en la Figura 1 se muestra el gráfico de $\frac{\langle x\rangle}{L} - \frac{1}{2}$ en función del tiempo, para $A_1 = -A_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $\hbar = 1$, $m = 1$ y distintos valores de γ. Se puede observar que para valores pequeños de γ la partícula oscila durante un periodo de tiempo más largo, mientras que para valores grandes de γ el rozamiento comienza a jugar un rol mas importante y la partícula se detiene mas rápidamente.

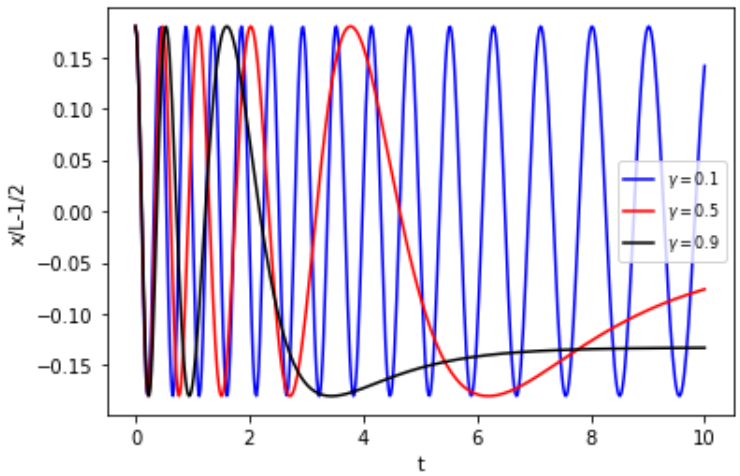

Figura 1: Valor medio de la posición centrada en $\frac{L}{2}$ y normalizada en función del tiempo. Se puede ver como para valores pequeños de γ la partícula oscila durante un periodo de tiempo más largo, mientras que para valores grandes de γ el rozamiento comienza a jugar un rol mas importante y la partícula se detiene mas rápidamente.