Física Teórica 2

Primer cuatrimestre de 2013
Guía 2: Dinámica cuántica

1. Se considera un sistema físico con un espacio de estados de tres dimensiones, del cual una base ortonormal es $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$. En dicha base el hamiltoniano H y los operadores A y B están dados por

$$H = \begin{pmatrix} \hbar\omega_0 & 0 & 0 \\ 0 & 2\hbar\omega_0 & 0 \\ 0 & 0 & 2\hbar\omega_0 \end{pmatrix} \quad A = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a \\ 0 & a & 0 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} 0 & b & 0 \\ b & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b \end{pmatrix},$$

donde ω_0, a, y b son constantes positivas. A $t = 0$ el estado del sistema es $|\psi(0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|u_1\rangle + \frac{1}{2}|u_2\rangle + \frac{1}{2}|u_3\rangle$.

   (a) En $t = 0$ se mide la energía del sistema. ¿Qué valores pueden encontrarse y con que probabilidad? Calcule $\langle H\rangle$ y $\langle \Delta H\rangle$ para el estado $|\psi(0)\rangle$.

   (b) Si en $t = 0$ en lugar de medir H se mide A, ¿qué resultados pueden obtenerse y con qué probabilidad? ¿Cuál es el vector de estado inmediatamente después de la medida? Repita el cálculo si en lugar de A se mide B.

   (c) Si en $t = 0$ no se midió nada, calcule $|\psi(t)\rangle$. Repita el cálculo si se midió: (i) H, (ii) A, o (iii) B. Discuta, en cada caso, qué resultados se obtendrían si se midiese A al instante t. Idem para: (i) H, y (ii) B.

2. Sean $|\varphi_1\rangle$ y $|\varphi_2\rangle$ autoestados del hamiltoniano H con autovalores E_1 y E_2 respectivamente. A $t = 0$ el estado del sistema es $|\psi_1\rangle = a_1|\varphi_1\rangle + a_2|\varphi_2\rangle$. Muestre que el valor medio de un operador B arbitrario varía armónicamente en el tiempo con frecuencia $\nu = |E_2 - E_1|/h$. Note que el período de esta oscilación satisface $|E_2 - E_1|\,\tau = h$.

3. Considere el hamiltoniano de un sistema de espín $1/2$ en un campo magnético externo uniforme B en la dirección z,

$$H = -\left(\frac{eB}{mc}\right) S_z = \omega S_z \ .$$

   (a) Verifique que los autoestados de S_z $|+\rangle$ y $|-\rangle$ son también autoestados de la energía, y calcule los correspondientes autovalores.

   (b) Suponga que en $t = 0$ el sistema está descripto por $|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$, que corresponde al estado S_x+. Calcule el ket de estado $|\alpha, t\rangle$ en un instante posterior t.

   (c) Calcule la probabilidad de hallar al sistema en los estados S_x+ y S_x- en un instante posterior.

   (d) Calcule el valor de expectación $\langle S_x\rangle$ en función del tiempo (*precesión del espín*).

   (e) Encuentre en función de t el versor $\hat{\mathbf{n}}$ tal que $|\alpha(t)\rangle$ es autoestado del operador $\mathbf{S}\cdot\hat{\mathbf{n}}(t)$.

4. Considere nuevamente el problema de la precesión del espín. Utilizando el hamiltoniano del problema 2, escriba las ecuaciones de movimiento de Heisenberg para los operadores dependientes del tiempo $S_x(t)$, $S_y(t)$ y $S_z(t)$. Resuélvalas para obtener $S_x(t)$, $S_y(t)$ y $S_z(t)$ como funciones del tiempo. Compare el resultado con el obtenido en el problema 2 y discuta.

5. (a) Sean $f(x,p)$ y $g(x,p)$ dos magnitudes físicas, y F y G sus correspondientes operadores cuánticos. Analice la validez de la relación de correspondencia

$$\lim_{\hbar\to 0} \frac{\langle [F,G] \rangle}{i\hbar} = \{f,g\}_{\text{clásico}} \ ,$$

para el caso particular $f(x,p) = p^2$ y $g(x,p) = x^2$.

   (b) Pruebe que

$$\langle \dot{x} \rangle = \left\langle \frac{\partial H}{\partial p} \right\rangle \qquad\qquad \langle \dot{p} \rangle = -\left\langle \frac{\partial H}{\partial x} \right\rangle \tag{1}$$

donde H es el hamiltoniano (este es un ejemplo particular del teorema de Ehrenfest).

6. Considere un paquete de ondas correspondiente a la partícula libre unidimensional. A t_0 este satisface la relación de incerteza mínima

$$\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle \left\langle (\Delta p)^2 \right\rangle = \frac{\hbar^2}{4} \ \ (t = t_0).$$

   (a) Muestre, aplicando el teorema de Ehrenfest, que $\langle x \rangle$ es una función lineal del tiempo, mientras que $\langle p \rangle$ permanece constante.

   (b) Escriba e integre las ecuaciones de movimiento para $\langle x^2 \rangle$ y $\langle \{x,p\} \rangle$.

   (c) Muestre que para una elección conveniente del origen de tiempo, se satisface la relación

$$\left\langle (\Delta x)^2 \right\rangle = \frac{\langle (\Delta p)_0^2 \rangle}{m^2} t^2 + \left\langle (\Delta x)_0^2 \right\rangle \ ,$$

donde $\langle (\Delta x)_0^2 \rangle$ y $\langle (\Delta p)_0^2 \rangle$ son las dispersiones en el instante t_0. ¿Cómo varía el ancho del paquete en función del tiempo? Interprete el resultado.

7. Sea $x(t)$ el operador coordenada para una partícula libre en una dimensión en el esquema de Heisenberg. Evalúe

$$[x(t), x(0)] \ .$$

8. Considere una partícula en un potencial unidimensional $V(x) = -kx$ (por ejemplo, puede corresponder a un campo gravitatorio o a un campo eléctrico uniforme).

   (a) Escriba el teorema de Ehrenfest para los valores medios de la posición x y el momento p de la partícula. Integre las ecuaciones y compare con el resultado clásico.

   (b) Muestre que la dispersión $\langle (\Delta p)^2 \rangle$ no varía en el tiempo.

   (c) Escriba la ecuación de Schrödinger en la representación $\{|p\rangle\}$. Deduzca luego una relación entre $\partial_t |\langle p|\psi(t)\rangle|^2$ y $\partial_p |\langle p|\psi(t)\rangle|^2$. Integre la ecuación e interprete.

9. Considere una partícula en tres dimensiones cuyo hamiltoniano está dado por

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \ .$$

   (a) Calculando $[\mathbf{x}\cdot\mathbf{p}, H]$ obtenga

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{x}\cdot\mathbf{p} \rangle = \left\langle \frac{\mathbf{p}^2}{m} \right\rangle - \langle \mathbf{x}\cdot\nabla V \rangle \ .$$

Para identificar la relación anterior con el análogo en mecánica cuántica del teorema del virial, resulta esencial que el miembro izquierdo sea nulo. ¿Bajo qué condición ocurre ésto?

(b) Para este caso en particular, considere un potencial homogéneo de grado α, es decir $V(\lambda \mathbf{x}) = \lambda^\alpha V(\mathbf{x})$. Analice los casos particulares $\alpha = -1$ (potencial de Coulomb) y $\alpha = 2$ (oscilador armónico).

(c) ¿Es el operador $\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}$ hermítico? Repita el cálculo realizado en (a) para $[\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}, H]$. ¿Puede construir un análogo cuántico del producto clásico $\mathbf{x} \cdot \mathbf{p}$ que sea hermítico?

10. Muestre que el estado físico de una partícula sin espín está completamente especificado por la densidad de probabilidad $\rho(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2$ y la corriente de probabilidad

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{m} \Im \left(\psi^* \nabla \psi\right) \ ,$$

donde $\Im$ denota la parte imaginaria de la expresión entre paréntesis. Para ello, asuma la función de onda $\psi(\mathbf{r})$ conocida y con argumento $\xi(\mathbf{r})$,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sqrt{\rho(\mathbf{r})}\, e^{i\xi(\mathbf{r})} \ .$$

Muestre que

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{m} \rho(\mathbf{r}) \nabla \xi(\mathbf{r}) \ .$$

Deduzca que dos funciones de onda con la misma densidad $\rho(\mathbf{r})$ y corriente $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ solo pueden diferir en una fase global.

11. Sea $\mathbf{j}(\mathbf{r})$ la corriente de probabilidad asociada a la función de onda $\psi(\mathbf{r})$ que describe el estado de una partícula de masa m en tres dimensiones.

(a) Muestre que

$$m \int \mathbf{j}(\mathbf{r})\, d^3 r = \langle \mathbf{p} \rangle \ .$$

(b) Considere el operador $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Muestre que

$$m \int \mathbf{r} \times \mathbf{j}(\mathbf{r})\, d^3 r = \langle \mathbf{L} \rangle \ .$$

12. Sean $|a'\rangle$ y $|a''\rangle$ autoestados de un operador hermítico A con autovalores a' y a'' respectivamente ($a' \neq a''$). El operador hamiltoniano está dado por

$$H = \delta \left(|a'\rangle \langle a''| + |a''\rangle \langle a'| \right)$$

donde δ es un número real.

(a) Claramente, $|a'\rangle$ y $|a''\rangle$ no son autoestados del hamiltoniano. Escriba los autoestados del hamiltoniano. ¿Cuáles son sus autovalores de energía?

(b) Suponga que se sabe que el sistema está en el estado $|a'\rangle$ a $t = 0$. Escriba el vector de estado en el esquema de Schrödinger para $t > 0$.

(c) ¿Cuál es la probabilidad de encontrar al sistema en $|a'\rangle$ para $t > 0$ si se sabe que está en el estado $|a'\rangle$ a $t = 0$?

13. Una caja conteniendo una partícula es dividida en dos compartimientos (izquierdo y derecho) a través de un separador fino. Si se sabe que la partícula está del lado derecho (izquierdo) con certeza, el estado se representa por el autoestado de posición $|R\rangle$ ($|L\rangle$), donde se han despreciado variaciones espaciales dentro de cada mitad de la caja. El vector de estado más general puede ser escrito como

$$|\alpha\rangle = |R\rangle \langle R|\alpha\rangle + |L\rangle \langle L|\alpha\rangle$$

donde $\langle R|\alpha\rangle$ y $\langle L|\alpha\rangle$ pueden ser consideradas como funciones de onda. La partícula puede *tunelear* a través del separador; este efecto túnel es caracterizado por el hamiltoniano

$$H = \Delta \left(|L\rangle \langle R| + |R\rangle \langle L| \right)$$

donde Δ es un número real con dimensiones de energía.

(a) Encuentre los autoestados de energía normalizados. ¿Cuáles son los autovalores de energía correspondientes?

(b) En el esquema de Schrödinger los kets base $|R\rangle$ y $|L\rangle$ están fijos y el vector de estado varía con el tiempo. Suponga que el sistema está dado por el $|\alpha\rangle$ dado anteriormente a $t = 0$. Encuentre el vector de estado $|\alpha, t\rangle$ para un tiempo $t > 0$ aplicando a $|\alpha\rangle$ el operador de evolución temporal apropiado.

(c) Suponga que a $t = 0$ la partícula está del lado derecho con certeza. ¿Cuál es la probabilidad de observar a la partícula en el lado izquierdo como función del tiempo?

(d) Escriba las ecuaciones de Schrödinger acopladas para las funciones de onda $\langle R|\alpha, t\rangle$ y $\langle L|\alpha, t\rangle$. Muestre que las soluciones de las ecuaciones de Schrödinger acopladas son lo que esperaría del punto (b).

(e) Suponga que por error se escribió H como

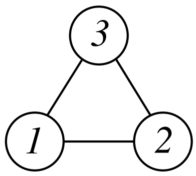
$$H = \Delta \, |L\rangle \langle R| \ .$$

Resolviendo el problema de evolución temporal más general con este hamiltoniano, muestre que se viola la conservación de la probabilidad.

14. Considere una molécula cíclica triatómica como se muestra en la figura. Suponga que $|\psi_n\rangle$ con $n = 1, 2, 3$ representa el estado de un electrón localizado en el átomo n-ésimo. Los $|\psi_n\rangle$ son vectores ortonormales y en lo que sigue consideraremos el espacio de Hilbert generado por ellos. Si despreciamos la posibilidad de que el electrón salte de un átomo a otro, el hamiltoniano H_0 es tal que $|\psi_n\rangle$ es autovector con autovalor E_0 independiente de n. Definamos el operador de *traslación cíclica* R según

$$R\,|\psi_n\rangle = |\psi_{n+1}\rangle$$

donde hemos utilizado cíclicamente los índices (es decir, $3 + 1 \equiv 1$).



(a) Muestre que los autovalores de R son las raices cúbicas de la unidad y halle los autovectores asociados. ¿Puede asegurar que estos autovectores de R lo son también de H_0?

(b) Suponga ahora que se agrega al hamiltoniano H_0 un término suplementario W que hace que el electrón pueda saltar de un átomo a otro, dado por

$$W\,|\psi_n\rangle = -a \left(|\psi_{n-1}\rangle + |\psi_{n+1}\rangle \right)$$

donde $a > 0$ y se ha usado la notación cíclica. Muestre que el operador R conmuta con el hamiltoniano total $H = H_0 + W$. Determine los autoestados de H. ¿Está localizado el estado fundamental?

(c) Suponga que a $t = 0$ el electrón está localizado en el átomo 1. Halle la probabilidad de que el electrón esté localizado en el átomo n-ésimo para $t > 0$.