Física Teórica 2 - Guía 2: Formalismo

Vladimir Daniel Rodríguez Chariarse

14 de abril de 2021

1. Breve resumen: dimensión infinita

En la primera parte ejercitamos las herramientas matemáticas necesarias para representar a los estados cuánticos y operadores de dimensión finita. Como se vio en la teórica, los estados están asociados a vectores que pertenecen a un espacio vectorial con producto interno hermitiano que satisface el axioma de completitud denominado espacio de Hilbert $\mathcal{H}$. Este axioma es trivial para el caso de dimensión finita por lo que los espacios vectoriales empleados son espacios de Hilbert. Los estados físicos serán representados por funciones de onda continuas de cuadrado integrable $\mathcal{L}^2$. En esta parte nos concentraremos en la representación de estados y operadores en espacios de dimensión infinita. Estos espacios aparecen naturalmente por ejemplo en la descripción de la posición y momento de una partícula que se mueve bajo la acción de un dado potencial. A diferencia de lo que ocurre con el spin, estos observables pueden tomar infinitos valores (no numerables). Para estos sistemas, la mecánica cuántica provee una descripción de los estados en términos de la función de onda. En esta parte se enlaza el formalismo de Dirac con la mecánica cuántica ondulatoria vista en Física 4.

Una forma de extender en forma sencilla los resultados previos es:

- Introducimos los operadores posición y momento (X y P, analizamos el caso 1D). Los autoestados correspondientes son $|x\rangle$ y $|p\rangle$:

  $$X|x\rangle = x|x\rangle \qquad\qquad P|p\rangle = p|p\rangle$$

  la completitud de la base se expresa:

  $$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,|x\rangle\langle x| = \mathbb{I} \qquad\qquad \int_{-\infty}^{+\infty} dp\,|p\rangle\langle p| = \mathbb{I}$$

  donde la suma finita da lugar a una integral continua.

- Los vectores de estado o *kets* se describen en dichas bases completas

  $$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,|x\rangle\,\langle x|\psi\rangle$$

  $$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\,|p\rangle\,\langle p|\psi\rangle$$

- Si en el ítem anterior proyectamos sobre un $\langle x'|$ o un $\langle p'|$ se deduce la la normalización de los autoestados de X y P:

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x - x')$$
$$\langle p'|p\rangle = \delta(p - p')$$

- Las componentes complejas del estado sobre la base de posición $\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$ y momento $\langle x|\psi\rangle = \psi(p) = \tilde{\psi}(p)$ son las tradicionales funciones de onda en la representación de posición y momento, respectivamente.

- La probabilidad de medir X en un intervalo $[x, x{+}dx]$ es $|\psi(x)|^2 dx$. La probabilidad de medir P en un intervalo $[p, p{+}dp$ es $|\psi(p)|^2 dp$. Para intervalos finitos se procede a integrar las respectivas densidades de probabilidad.

- Los operadores X y P poseen la relación de conmutación canónica:

$$[X, P] = i\hbar\mathbb{I}$$

  que se puede imponer en la llamada cuantización canónica. La justificación proviene de la relación canónica de corchetes de Poisson: $\{x, p\} = 1$. En mecánica clásica esta propiedad es la que asocia al momento como generador de traslaciones infinitesimales en posición y a la coordenada como generador de traslaciones infinitesimales del momento. Este rol se mantiene en su contrapartida cuántica debido a la relación de conmutación.

- **Traslación en el espacio de coordenadas** Sea $\mathcal{T}(d) = e^{-iPd/\hbar}$ el llamado operador de traslación en coordenada en un valor d. Vamos a ver que si $X\,|x\rangle = x\,|x\rangle$, entonces $X\,\mathcal{T}(d)\,|x\rangle = (x + d)\mathcal{T}(d)\;|x\rangle$ por lo que $|x + d\rangle = \mathcal{T}(d)\,|x\rangle$, y $\mathcal{T}(d)$ traslado el autoestado de posición x a un nuevo autoestado con autovalor $x + d$ ($\mathcal{T}(d)$ es un operador unitario).

$$\begin{aligned} X\,\mathcal{T}(d)\,|x\rangle &= (\mathcal{T}(d)\,X + \underbrace{[X, \mathcal{T}(d)]}_{\frac{\partial \mathcal{T}(d)}{\partial P}[X,P]})\,|x\rangle \\ &= \left(x + \frac{-i}{\hbar} i\hbar\right)\mathcal{T}(d)\,|x\rangle \\ &= (x + d)\mathcal{T}(d)\,|x\rangle \end{aligned}$$

- *Traslación infinitesimal en coordenadas: Operador de momento y posición en la representación de coordenadas*

  Usemos la fórmula anterior para un desplazamiento infinitesimal $d = \epsilon$ aplicado sobre un estado general ψ en la representación de coordenadas:

$$\begin{aligned} \langle x|\;\mathcal{T}(\epsilon)\,|\psi\rangle &= \langle x|\;(\mathbb{I} - \frac{iP\epsilon}{\hbar}\,|\psi\rangle \\ \underbrace{\langle x - \epsilon|\psi\rangle}_{\psi(x-\epsilon)} &= \underbrace{\langle x|\psi\rangle}_{\psi(x)} - i\frac{\epsilon}{\hbar}\,\langle x|\,P\,|\psi\rangle \\ \psi(x) - \frac{\partial\psi(x)}{\partial x}\epsilon &= \psi(x) - i\frac{\epsilon}{\hbar}\,\langle x|\,P\,|\psi\rangle \end{aligned}$$

en la ultima igualdad hemos usado una expansión de Taylor. Podemos identificar el operador momento P en representación de coordenadas:

$$\boxed{\langle x| P |\psi\rangle = -i\hbar\frac{\partial\psi(x)}{\partial x}}$$

- **Traslación en el espacio de momentos** Sea $\mathcal{T}(q) = e^{iXq/\hbar}$ el llamado operador de traslación en momentos en un valor q. Del mismo modo se puede verificar que si $P|p\rangle = p|P\rangle$, entonces $P\mathcal{T}(q)|p\rangle = (p+q)\mathcal{T}(q)|p\rangle$ por lo que $|p+q\rangle = \mathcal{T}(q)|p\rangle$, y $\mathcal{T}(q)$ traslado el autoestado de momento p a un nuevo autoestado con autovalor $p+q$ ($\mathcal{T}(q)$ es un operador unitario).

  Como antes haciendo un desplazamiento infinitesimal $q = \epsilon$ aplicado sobre un estado general ψ en la representación de momentos obtenemos el operador coordenada X en representación de momentos:

$$\boxed{\langle p| X |\psi\rangle = i\hbar\frac{\partial\psi(p)}{\partial p}}$$

- **Autoestado de momento en la representación de posición**

  Usando lo anterior encontraremos la expresión para $\phi(x) = \langle x|p\rangle$:

$$\begin{aligned}\langle x| P |p\rangle &= i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|p\rangle\\ p\langle x|p\rangle &= i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\langle x|p\rangle\end{aligned}$$

  esta ecuación diferencial se resuelve obteniéndose:

$$\boxed{\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ipx/\hbar}}$$

  donde el factor es el apropiado para la normalización: $\langle p'|p\rangle = \delta(p-p')$.

- **Autoestado de energía en la representación de posición**

  Usando lo anterior encontrar la ecuación diferencial para para $\phi_E(x) = \langle x|\phi_E\rangle$. Consideremos un Hamiltoniano en 1D de la forma: $H = \frac{P^2}{2m} + V(X)$. Necesitaremos:

$$\begin{aligned}\langle x| P^2 |\psi\rangle &= \langle x| P(P|\psi\rangle)\\ &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\underbrace{\langle x| P |\psi\rangle}_{-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)}\\ &= -\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x)\end{aligned}$$

de donde se obtiene la ecuación diferencial que determina los autoestados de energía:

$$H\,|\psi_E\rangle = E\,|\psi_E\rangle \implies H\psi_E(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\right)\psi_E(x) = E\psi_E(x)$$

esta ecuación diferencial se resuelve pidiendo que $\psi(x)$ sea continua, lo mismo para su primera derivada. Queda a los alumnos escribir la misma ecuación en la representación de momento.

2. Problema 16

Considere un sistema cuyo estado $|\psi\rangle$ es tal que

$$\langle x|\psi\rangle = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}\, e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}}\, e^{ix/r}, \tag{1}$$

con σ y r constantes reales con unidades de longitud.

(a) Calcule la representación del estado $|\psi\rangle$ en la base de momento, $\langle p|\psi\rangle$.

(b) Calcule $\langle\psi|p|\psi\rangle$, usando: (i) la representación en momento de $|\psi\rangle$; (ii) usando la representación en posición de $|\psi\rangle$ y la propiedad $\langle x|p|\psi\rangle = -i\hbar\frac{\partial\langle x|\psi\rangle}{\partial x}$.

(c) Sea $\mathcal{T}(d)$ el operador de traslación en una distancia d. Calcule entonces la representación en las bases de posición y de momento del estado $|\phi\rangle = \mathcal{T}(d)\,|\psi\rangle$.

Antes de empezar encontremos una integral útil:

$$\int_{\infty}^{\infty}\int_{\infty}^{\infty} dx\, dy e^{-(x^2+y^2)/\delta^2} = \int_0^{\pi} d\theta \int_0^{\infty} r dr e^{-r^2/\delta^2}$$

$$\left(\int_{\infty}^{\infty} dx e^{-x^2/\delta^2}\right)^2 = 2\pi\frac{\delta^2}{2}\underbrace{\int_0^{\infty} du e^{-u}}_{1}$$

de donde obtenemos:

$$\boxed{\int_{\infty}^{\infty} dx e^{-x^2/\delta^2} = \sqrt{\pi\delta^2}}$$

Verifiquemos normalización:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_{\infty}^{\infty}\langle\psi|x\rangle\,\langle x|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}}\underbrace{\int_{\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}}}_{\sqrt{2\pi\sigma^2}} = 1$$

(a) Hallar $\langle p|\psi\rangle$,

$$\langle p|\psi\rangle = \int_{\infty}^{\infty} \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int_{\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-ipx/\hbar} \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-\frac{x^2}{4\sigma^2}} e^{ix/r}$$

reescribimos el exponente del producto de exponenciales:

$$-i\frac{x}{\hbar}\underbrace{(p-\frac{\hbar}{r})}_{p'} - \frac{x^2}{4\sigma^2} = -\frac{(x+\lambda)^2}{4\sigma^2} + \frac{\lambda^2}{4\sigma^2}$$

de donde identificamos

$$-\frac{2\lambda x}{4\sigma^2} = -\frac{ixp'}{\hbar} \quad \Longrightarrow \quad \lambda = i\frac{2p'\sigma^2}{\hbar}$$

haciendo el cambio de variables $\xi = x + \lambda$ y usando $\frac{\lambda^2}{4\sigma^2} = -\frac{4p'^2\sigma^2}{\hbar^2}$,

$$\langle p|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-\frac{p'^2\sigma^2}{\hbar^2}} \underbrace{\int d\xi e^{-\frac{\xi^2}{4\sigma^2}}}_{\sqrt{4\pi\sigma^2}}$$

obteniendo

$$\langle p|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-\frac{p'^2\sigma^2}{\hbar^2}} \underbrace{\int d\xi e^{-\frac{\xi^2}{4\sigma^2}}}_{\sqrt{4\pi\sigma^2}}$$

finalmente

$$\boxed{\langle p|\psi\rangle = \frac{1}{\left(\frac{\pi}{2}(\frac{\hbar}{\sigma})^2\right)^{1/4}} e^{-\frac{(p-\hbar/r)^2}{(\hbar/\sigma)^2}}}$$

Se puede verificar que este estado está normalizado correctamente.

(b) i) Calculo de $\langle\psi|p|\psi\rangle$, usando la representación de momentos:

$$\langle\psi|p|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dpp|\psi(p)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dp' (\underbrace{p-\frac{\hbar}{r}}_{p'} + \frac{\hbar}{r}) \frac{1}{\left(\frac{\pi}{2}(\frac{\hbar}{\sigma})^2\right)^{1/2}} e^{-\frac{2p'^2}{(\hbar/\sigma)^2}}$$

la integral impar en p' es cero, y la otra se obtiene por normalización:

$$\langle\psi|p|\psi\rangle = \frac{\hbar}{r}$$

(b)ii) Lo puede calcular el alumno del mismo modo.

(c) Sea $\mathcal{T}(d)$ el operador de traslación en una distancia d. Calcule entonces la representación en las bases de posición y de momento del estado $|\phi\rangle = \mathcal{T}(d)\,|\psi\rangle$.
i) posición:

$$\langle x|\phi\rangle = \langle x|\,\mathcal{T}(d)\,|\psi\rangle = \underbrace{\langle x-d|\psi\rangle}_{\psi(x-d)} = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}}\,e^{-\frac{(x-d)^2}{4\sigma^2}}\,e^{i(x-d)/r},$$

ii) momentum:

$$\langle p|\phi\rangle = \langle p|\,\mathcal{T}(d)\,|\psi\rangle = \underbrace{\langle p|\,e^{-íP\,d/\hbar\psi}}_{e^{-ipd\hbar}\langle p|}|\psi\rangle = \frac{1}{\left(\frac{\pi}{2}(\frac{\hbar}{\sigma})^2\right)^{1/4}}e^{-\frac{(p-\hbar/r)^2}{(\hbar/\sigma)^2}-i\frac{pd}{\hbar}}$$

aparece como una fase.

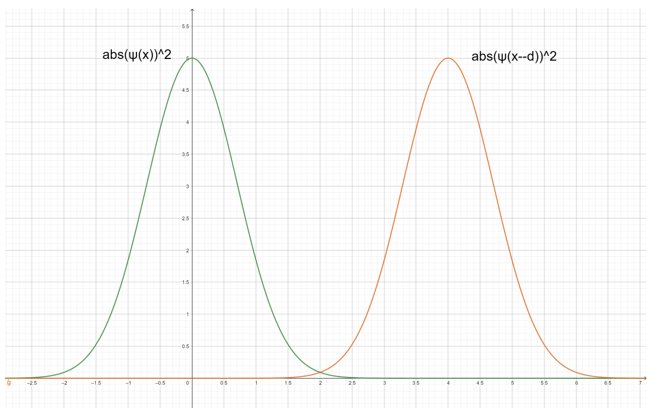

Figura 1: *Paquete gausiano y paquete gausiano desplazado en posición*