

# Física Teórica 2 - Guía 5: Dinámica: Schrödinger y Heisenberg

Vladimir Daniel Rodríguez Chariarse

7 de mayo de 2021

## 1. Breve resumen: Dinámica, representaciones de Schrödinger y Heisenberg

En Mecánica Clásica, el Hamiltoniano  $H$  es el generador de la transformación canónica infinitesimal que lleva a las variables  $\{\mathbf{r}, \mathbf{p}\}$  de un tiempo  $t$  a un tiempo posterior  $t + \delta t$ . En Mecánica Cuántica, la evolución temporal de un sistema dado se obtiene usando el operador evolución  $U(t, 0)$ , que es un operador unitario,  $U(t, 0)U(t, 0)^\dagger = U(t, 0)^\dagger U(t, 0) = \mathbb{I}$ . El generador infinitesimal de estas transformaciones es del mismo modo, el Hamiltoniano.

En la representación de Schrödinger, los estados son los que evolucionan:

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, 0) |\Psi(0)\rangle$$

$U(t, 0)$  satisface la ecuación

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, 0) = H U(t, 0)$$

que lleva inmediatamente a la de Schrödinger para el vector de estado

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle$$

Si  $H$  no depende del tiempo, el operador de evolución se expresa

$$U(t, 0) = e^{-iHt/\hbar}$$

El valor medio de un observable  $A$  se obtiene en este esquema de la forma usual

$$\langle A \rangle_{|\Psi(t)\rangle} = \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(0) | U(t, 0)^\dagger A U(t, 0) | \Psi(0) \rangle$$

Esta última ecuación nos sirve para introducir una representación en la cual los operadores evolucionan, y no el estado del sistema. En la nueva representación tenemos al operador  $A_H(t)$  definido por

$$A_H(t) = U(t, 0)^\dagger A_H(0) U(t, 0)$$

de la cual podemos obtener la ecuación de Heisenberg

$$i\hbar\dot{A}_H(t) = [A_H(t), H] + U(t, 0)^\dagger \frac{\partial A_S}{\partial t} U(t, 0)$$

donde  $A_S$  ( $A_S = A_H(0)$ ) puede depender explícitamente del tiempo. El caso más común es que esto no sea así en cuyo caso tenemos

$$\dot{A}_H(t) = \frac{[A_H(t), H]}{i\hbar}$$

Por la forma en que se introdujo esta representación es claro que los valores medios no dependen de la representación usada:

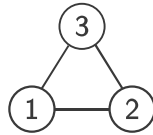
$$\langle A \rangle = \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi_H | A_H(t) | \Psi_H \rangle, \quad | \Psi_H \rangle = | \Psi(0) \rangle = U(t, 0)^\dagger | \Psi(t) \rangle$$

## 2. Problema 4

**Molécula triatómica.** 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  $n$ . Definimos el operador de *traslación cíclica*  $R$  según

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

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



- Muestre que los autovalores de  $R$  son las raíces cúbicas de la unidad y halle los autovectores asociados. ¿Puede asegurar que estos autovectores de  $R$  lo son también de  $H_0$ ?
- 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

$$W|\psi_n\rangle = -V_0(|\psi_{n-1}\rangle + |\psi_{n+1}\rangle),$$

donde  $V_0 > 0$  es una constante con unidades de energía 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 inicialmente 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 a un tiempo  $t > 0$  posterior.

(a) Podemos usar la propiedad cíclica para encontrar los autovalores. Sea  $|\lambda\rangle$  un autovector correspondiente al autovalor  $\lambda$ , entonces

$$R|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \implies R^3|\lambda\rangle = \lambda^3|\lambda\rangle$$

Es intuitivo que  $R^3 = \mathbb{I}$ , pero podemos probarlo por su acción sobre un estado general  $\phi = \sum_n c_n |\psi_n\rangle$ :

$$R^3|\phi\rangle = R^3 \sum_{n=1}^3 c_n |\psi_n\rangle = \sum_{n=1}^3 c_n R^3 |\psi_n\rangle = \sum_{n=1}^3 c_n \underbrace{|\psi_{n+3}\rangle}_{|\psi_n\rangle} = |\phi\rangle$$

por lo que  $R^3 = \mathbb{I}$ . Entonces

$$R^3|\lambda\rangle = \lambda^3|\lambda\rangle = |\lambda\rangle \implies \lambda^3 = 1,$$

esto es, los autovalores  $\lambda_j$  son las raíces cúbicas de la unidad

$$\lambda_j = e^{\frac{2\pi(j-1)}{3}i}, \quad j = 1, 2, 3$$

Para encontrar los autovectores correspondientes operamos sobre  $|\lambda_j\rangle$

$$\begin{aligned} R|\lambda_j\rangle &= \lambda_j|\lambda_j\rangle \\ R \sum_{n=1}^3 |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \lambda_j \rangle &= \lambda_j \sum_{n=1}^3 |\psi_n\rangle \langle \psi_n | \lambda_j \rangle \\ \sum_{n=1}^3 |\psi_{n+1}\rangle \langle \psi_n | \lambda_j \rangle &= \sum_{n=1}^3 |\psi_n\rangle \lambda_j \langle \psi_n | \lambda_j \rangle \end{aligned}$$

de la última igualdad obtenemos:

$$\langle \psi_n | \lambda_j \rangle = \lambda_j \langle \psi_{n+1} | \lambda_j \rangle \implies \langle \psi_{n+1} | \lambda_j \rangle = \langle \psi_n | \lambda_j \rangle / \lambda_j$$

usando como punto de partida en la iteración:  $\langle \psi_1 | \lambda_j \rangle = 1 = \lambda_j^3$  obtenemos:

$$\langle \psi_1 | \lambda_j \rangle = 1 = \lambda_j^3, \quad \langle \psi_2 | \lambda_j \rangle = \lambda_j^2, \quad \langle \psi_3 | \lambda_j \rangle = \lambda_j.$$

Por lo que los autoestados normalizados son:

$$|\lambda_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|\psi_1\rangle + \lambda_j^2|\psi_2\rangle + \lambda_j|\psi_3\rangle)$$

donde recordamos que  $|\lambda_j| = 1$ .

Como conocemos los autovalores y los autovectores de  $H_0$  podemos escribir la representación espectral de  $H_0$ :

$$H_0 = E_0 |\psi_1\rangle\langle\psi_1| + E_0 |\psi_2\rangle\langle\psi_1| + E_0 |\psi_2\rangle\langle\psi_2| = E_0 \mathbb{I}$$

Claramente los autoestados de  $R$  son autoestados de  $H_0$ , pues  $H_0$  es proporcional a la identidad y conmuta con  $R$ . Como  $R$  es no degenerado la base común son sus autoestados.

$R$  no es un observable, es un operador unitario que realiza una transformación física del sistema. En efecto empleando la descomposición espectral de  $R$

$$R = \sum_j \lambda_j |\lambda_j\rangle\langle\lambda_j|$$

$$R^\dagger = \sum_j \lambda_j^* |\lambda_j\rangle\langle\lambda_j|$$

por lo que

$$RR^\dagger = R^\dagger R = \mathbb{I}$$

donde se usó que los  $\lambda_j$  son fases, por lo que  $|\lambda_j| = 1$ . El operador  $R^\dagger = R^{-1}$  y su acción sobre los estados  $\{|\psi_n\rangle\}$  y  $\{|\lambda_j\rangle\}$  es

$$R^\dagger |\psi_n\rangle = |\psi_{n-1}\rangle, \quad R^\dagger |\lambda\rangle = \lambda^* |\lambda\rangle$$

(b) Consideremos ahora  $H = H_0 + W$ , donde  $W$  es una interacción que permite al electrón saltar de un átomo a otro, definido por

$$W |\psi_n\rangle = -V_0(|\psi_{n-1}\rangle + |\psi_{n+1}\rangle) = -V_0(R + R^\dagger) |\psi_n\rangle \implies W = -V_0(R + R^\dagger)$$

donde  $V_0 > 0$ . Vamos a probar que  $[H, R] = 0$ . Basta con probar que  $[W, R] = 0$ , calculemos

$$[W, R] = WR - RW = -V_0((R+R^\dagger)R - R(R+R^\dagger)) = -V_0(R^2 + R^\dagger R - R^2 - RR^\dagger) = 0$$

Por consiguiente

$$[H, R] = 0$$

$\{H, R\}$  son dos operadores que conmutan (compatibles) por consiguiente poseen una base común de autovectores. Como  $R$  es no degenerado, la base de autoestados de  $R$  es única ( $\{|\lambda_j\rangle\}$ ) por consiguiente los autovectores de  $R$  son los autovectores comunes de  $R$  y de  $H$ .

Calculemos los autovalores de  $H$ :

$$H |\lambda_j\rangle = (H_0 + -V_0(R + R^\dagger)) |\lambda_j\rangle = (E_0 - V_0 \underbrace{(\lambda_j + \lambda_j^*)}_{2\text{Re}\lambda_j}) |\lambda_j\rangle$$

lo que prueba que  $\{|\lambda_j\rangle\}$  son autovectores con autovalores

$$E_j = E_0 - 2V_0 \cos\left(\frac{2\pi(j-1)}{3}\right), \quad j = 1, 2, 3.$$

El estado fundamental corresponde al menor valor de energía, con  $j = 1$ ,  $E_1 = E_0 - 2V_0$ . Los otros dos autovectores son degenerados con energía  $E_2 = E_3 = E_0 - 2V_0 \cos(\frac{2\pi}{3})$ . El estado fundamental de  $H$  se calcula con  $\lambda_1 = 1$ :

$$|E_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle)$$

En el estado fundamental la probabilidad de encontrar al electrón en cualquier átomo es la misma. El electrón está totalmente deslocalizado. Lo mismo pasa con los dos estados degenerados.

(c) Sea el estado inicial  $|\Psi(0)\rangle = |\psi_1\rangle$ , en la representación de Schrödinger, los estados evolucionan con el operador evolución  $U(t, 0) = e^{-iHt/\hbar}$ ,

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, 0) |\Psi(0)\rangle = e^{-iHt/\hbar} \sum_j |\lambda_j\rangle \langle \lambda_j | \psi_1\rangle$$

de donde se obtiene

$$|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [e^{-iE_1 t/\hbar} |\lambda_1\rangle + e^{-iE_2 t/\hbar} (|\lambda_2\rangle + |\lambda_3\rangle)]$$

Necesitaremos:

$$\begin{aligned} \Pi_1 |\Psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} [e^{-iE_1 t/\hbar} |\psi_1\rangle \langle \psi_1 | \lambda_1\rangle + e^{-iE_2 t/\hbar} (|\psi_1\rangle \langle \psi_1 | \lambda_2\rangle + |\psi_1\rangle \langle \psi_1 | \lambda_3\rangle)] \\ &= \frac{1}{3} |\psi_1\rangle [e^{-iE_1 t/\hbar} + 2e^{-iE_2 t/\hbar}] \end{aligned}$$

$$\text{Prob}(|\psi_1\rangle | |\Psi(t)\rangle) = |\Pi_1 |\Psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{9} (5 + 4 \cos[(E_2 - E_1)t/\hbar])$$

Una verificación es que a  $t = 0$  esta probabilidad da correctamente uno. Se deja a los alumnos el cálculo de las otras probabilidades. Sería importante verificar que la suma de las probabilidades da 1 para todo tiempo.

Un comentario final sobre el problema: es posible reemplazar 3 por  $N$  y tendremos la misma solución para el caso de una cadena circular con  $N$  átomos. En este caso este modelo se llama modelo de ligaduras fuertes en Materia Condensada (versión  $1D$ ), lo interesante es que lleva al modelo de bandas de energía, útil para entender aisladores y semiconductores. Cerrar la cadena periódica es simplemente usar lo que se denomina condiciones periódicas de contorno. Un primer modelo de cristal  $1D$ .

### 3. Problema 8

**Representación de Heisenberg** Considere nuevamente el problema de la precesión del spin. 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 y calcule los valores medios de estos operadores para un estado general cualquiera. En particular, compare el valor medio  $\langle S_x(t) \rangle$  para el estado  $|+, \hat{\mathbf{x}}\rangle$  con el antes obtenido en el ejercicio 2.

Usamos:  $H = \omega S_z$  con  $\omega > 0$ . Las ecuaciones de Heisenberg para cada operador son:

$$\dot{S}_z(t) = \frac{[S_z(t), H]}{i\hbar} = 0 \implies S_z(t) = S_z(0) \quad (1)$$

$$\dot{S}_x(t) = \frac{[S_x(t), H]}{i\hbar} = \frac{-i\hbar S_y(t)\omega}{i\hbar} = -\omega S_y(t) \quad (2)$$

$$\dot{S}_y(t) = \frac{[S_y(t), H]}{i\hbar} = \frac{i\hbar S_x(t)\omega}{i\hbar} = \omega S_x(t) \quad (3)$$

de (2):

$$\ddot{S}_x(t) = -\omega \dot{S}_y(t) = -\omega^2 S_x(t)$$

cuya solución es de la forma:

$$\begin{aligned} S_x(t) &= A \cos(\omega t) + B \sin(\omega t) \\ \dot{S}_x(t) &= -\omega A \sin(\omega t) + \omega B \cos(\omega t) S_y(0) \end{aligned}$$

usando la condición inicial:  $S_x(0)$ , se tiene  $A = S_x(0)$ . Reemplazando esto en la ecuación (2) se tiene:

$$S_y(t) = S_x(0) \sin(\omega t) - B \cos(\omega t)$$

usando la condición inicial:  $S_y(0)$ , se tiene  $B = -S_y(0)$ . por lo que:

$$\begin{aligned} S_x(t) &= \cos(\omega t) S_x(0) - \sin(\omega t) S_y(0) \\ S_y(t) &= \sin(\omega t) S_x(0) + \cos(\omega t) S_y(0) \end{aligned}$$

Vemos que el vector (de operadores)  $\mathbf{S}_H(t)$  rota alrededor del eje  $z$  (dirección del campo magnético aplicado). Para el estado  $|\psi\rangle = |+, \hat{\mathbf{x}}\rangle$  el valor medio es:

$$\begin{aligned} \langle S_z(t) \rangle &= \langle +, \hat{\mathbf{x}} | S_z(0) | +, \hat{\mathbf{x}} \rangle = 0 \\ \langle S_x(t) \rangle &= \langle +, \hat{\mathbf{x}} | S_x(0) | +, \hat{\mathbf{x}} \rangle \cos(\omega t) + \langle +, \hat{\mathbf{x}} | S_y(0) | +, \hat{\mathbf{x}} \rangle \sin(\omega t) = \frac{\hbar}{2} \cos \omega t \\ \langle S_y(t) \rangle &= -\langle +, \hat{\mathbf{x}} | S_x(0) | +, \hat{\mathbf{x}} \rangle \sin(\omega t) + \langle +, \hat{\mathbf{x}} | S_y(0) | +, \hat{\mathbf{x}} \rangle \cos(\omega t) = \frac{\hbar}{2} \sin \omega t \end{aligned}$$

el vector valor medio del spin rota con velocidad angular  $\omega$  alrededor de la dirección de aplicación del campo  $\mathbf{B}$  (precesión de spin). Esto pasa también clásicamente. Los valores medios cuánticos siguen los valores clásicos (aplicación del teorema de Ehrenfest).