Clase 11 - Viernes 24/09/2021

La clase pasada vimos:

- Estados estacionarios
- Constantes de movimiento
- Operadores unitarios
- Operador evolución
- Representación de Heisenberg

En esta clase veremos:

- Oscilador armónico: formulación
- Operadores de subida y de bajada
- Autovalores de N
- Estado fundamental y estados excitados

REPASO

Sistemas conservativos: $H \neq H(t)$

$$H|\varphi_{ni}\rangle = E_n|\varphi_{ni}\rangle$$

Evolución de un **estado estacionario:** $|\psi(t)\rangle = e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar}|\psi(t_0)\rangle$

Constante de movimiento: $[A,H]=0$ $\quad \frac{\partial A}{\partial t}=0$

- $\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \frac{d}{dt}\langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle = 0$ $\quad \forall$ estado
- $\mathcal{P}(a_p,t) = \sum_{ni}|c_{npi}(t)|^2 = \sum_{ni}|c_{npi}(t_0)|^2$ /// indep. de t
- Provee un buen número cuántico, a_p

Frecuencias de Bohr

$$\langle\psi(t)|B|\psi(t)\rangle = \sum_{ni}\sum_{mj} c^*_{mj}(t_0)\,c_{ni}(t_0)\,\langle\varphi_{mj}|B|\varphi_{ni}\rangle\, e^{i(E_m-E_n)t/\hbar}$$

$$\omega_{mn} \equiv \frac{E_m-E_n}{\hbar}$$

REPASO

Operadores unitarios (Complemento C_{II})

Definicion: $U^{-1} = U^\dagger$

- U conserva el producto escalar y la norma
- A hermítico $\Rightarrow$ $T = e^{iA}$ es unitario
- U transforma una base ortonormal en otra base ortonormal
- Autovalores: $u = e^{i\varphi}, \qquad \varphi \in \mathbb{R}$

REPASO

Transformaciones unitarias

$$\left\{ \begin{array}{l} |\tilde{\psi}\rangle = U|\psi\rangle \\ \tilde{A} = U A U^\dagger \end{array} \right\}$$

$$\Rightarrow \quad \langle\tilde{\psi}|\tilde{A}|\tilde{\psi}\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

Conservan los elementos de matriz

Operador unitario infinitesimal: $U(\varepsilon) = \mathbb{1} - i\varepsilon F$ con F hermítico

REPASO

Operador de evolución

Como ESDT es lineal, podremos escribir:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)\,|\psi(t_0)\rangle$$

Caso conservativo $H \neq H(t)$ → $U(t,t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$

Operador de evolución infinitesimal:

$$|\psi(t+\mathrm{d}t)\rangle = \underbrace{\left[\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H(t)\,\mathrm{d}t\right]}_{U(t+dt,\,t)} |\psi(t)\rangle$$

REPASO

Representación de Heisenberg

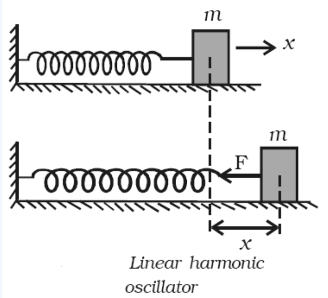
$$|\Psi_H\rangle = U^{+}(t,t_0)\,|\Psi_S(t)\rangle = |\Psi_S(t_0)\rangle$$

El estado no evoluciona

$$A_H(t) = U^{+}(t,t_0)\,A_S(t)\,U(t,t_0)$$

Evolucionan los operadores

Oscilador armónico unidimensional: definición del problema



Tratamiento clásico

$$V(x) = \frac{1}{2} k x^2 \quad \rightarrow \quad F_x = -\frac{dV}{dx} = -kx$$

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{dV}{dx} = -kx \quad \rightarrow \quad x = x_M \cos(\omega t - \varphi)$$

Ecuación de Newton

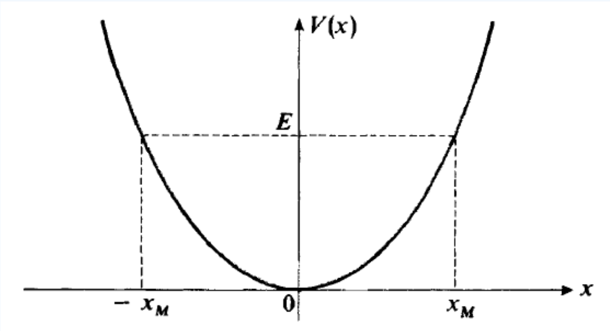
Solución general

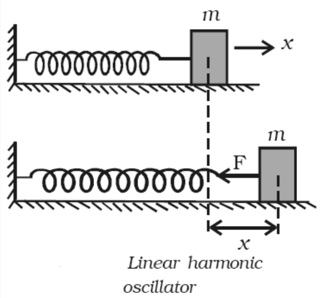
con $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$

$$T = \frac{1}{2} m \left(\frac{dx}{dt}\right)^2 = \frac{p^2}{2m}$$

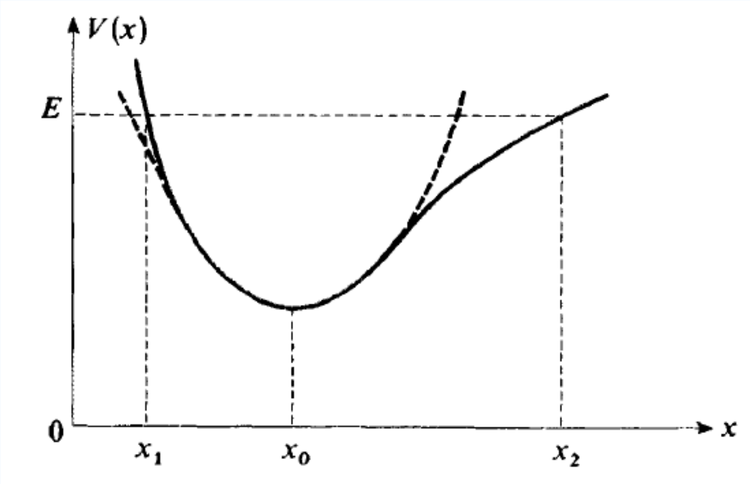
$$E = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

$$\rightarrow \quad E = \frac{1}{2} m \omega^2 x_M^2$$



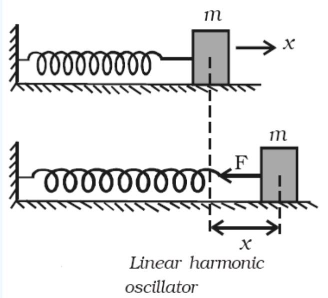


Aplicabilidad del modelo de oscilador armónico



$$V(x) = a + b(x - x_0)^2 + c(x - x_0)^3 + \ldots$$

oscilador armónico   anarmonicidad



El oscilador armónico en mecánica cuántica

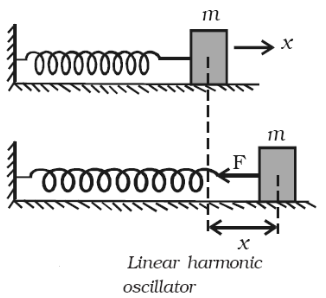
$$E = T + V = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

$$x \longrightarrow X$$

$$p \longrightarrow P$$

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2$$

con $[X, P] = i\hbar$



El oscilador armónico en mecánica cuántica

Hamiltoniano: $$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2$$

Queremos resolver el problema de autovalores: → $$H \, | \, \varphi \rangle = E \, | \, \varphi \rangle$$

Trabajando en la representación de coordenadas $\{|x>\}$:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right] \varphi(x) = E \, \varphi(x)$$

Oscilador armónico unidimensional

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right] \varphi(x) = E\, \varphi(x)$$

Propiedades

Complement M_{III}

BOUND STATES OF A PARTICLE IN A "POTENTIAL WELL" OF ARBITRARY SHAPE

1. Quantization of the bound state energies
2. Minimum value of the ground state energy

(i) $E > V_{min} = 0$

(ii) El espectro de energía es discreto (todos estados ligados)

(iii) V(x) es par $\longrightarrow \varphi(x)$ es par o impar

Adimensionalización

Adimensionalizamos :

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, X$$

$$\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\, P$$

Notar:

$$[\hbar] = \text{Acción} = \text{energía} \times \text{tiempo}$$

$$[\hbar] = \text{momento angular} = \text{momento lineal} \times \text{distancia}$$

Adimensionalización

Adimensionalizamos :

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, X$$

$$\hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}}\, P$$

$$[X, P] = i\hbar \quad \rightarrow \quad [\hat{X}, \hat{P}] = i$$

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 \quad \rightarrow \quad \begin{cases} H = \hbar\omega\, \hat{H} \\ \hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2) \end{cases}$$

Buscaremos soluciones de : $\hat{H} \,|\, \varphi_v^i \rangle = \varepsilon_v \,|\, \varphi_v^i \rangle$

Operadores de subida y de bajada o de creación y destrucción

Operadores de subida y de bajada

Notar la particular forma del Hamiltoniano :

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2)$$

Veremos que se puede reescribir en forma conveniente con los operadores :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P})$$ op. de bajada o destrucción

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P})$$ op. de subida o creación

Notar: estos operadores **no son hermíticos** (por la presencia de la i en su definición)

Operadores de subida y de bajada

Invirtiendo la definición obtenemos :

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P})$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P})$$

$\rightarrow$

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a)$$

$$\hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a)$$

Vemos que : $[a, a^\dagger] = 1$

En efecto :

$$[a, a^\dagger] = \frac{1}{2}[\hat{X} + i\hat{P}, \hat{X} - i\hat{P}]$$

$$= \frac{i}{2}[\hat{P}, \hat{X}] - \frac{i}{2}[\hat{X}, \hat{P}] = \frac{i}{2}(-i) - \frac{i}{2}i = 1$$

Relación con el Hamiltoniano :

$$a^\dagger a = \frac{1}{2}(\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P})$$

$$= \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 + i\hat{X}\hat{P} - i\hat{P}\hat{X})$$

$$= \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 - 1)$$

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2)$$

$$\hat{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}(\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P}) + \frac{1}{2}$$

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad \Rightarrow \quad \hat{H} = aa^\dagger - \frac{1}{2}$$

Operadores de subida y de bajada

Definimos el operador : $N = a^\dagger a$

$$\hat{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2}$$

$$\hat{H} = N + \frac{1}{2}$$

N es hermítico

H y *N* tienen los mismos autovectores

$$N \,|\, \varphi_\nu^i \rangle = \nu \,|\, \varphi_\nu^i \rangle$$

$$H \,|\, \varphi_\nu^i \rangle = (\nu + 1/2)\hbar\omega \,|\, \varphi_\nu^i \rangle$$

$$[N, a] = [a^\dagger a, a] = a^\dagger[a, a] + [a^\dagger, a]a = -a$$
$$[N, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = a^\dagger[a, a^\dagger] + [a^\dagger, a^\dagger]\ a = a^\dagger$$

$$[a, a^\dagger] = 1$$

Autovalores de N

Consideremos $N\,|\,\varphi_\nu^i\,\rangle = \nu\,|\,\varphi_\nu^i\,\rangle$

Teorema I: $\nu \geq 0$

Sabemos que : $\|\,a\,|\,\varphi_\nu^i\,\rangle\,\|^2 = \langle\,\varphi_\nu^i\,|\,a^\dagger a\,|\,\varphi_\nu^i\,\rangle \geqslant 0$

$N = a^\dagger a$

⇒

$\langle\,\varphi_\nu^i\,|\,a^\dagger a\,|\,\varphi_\nu^i\,\rangle = \langle\,\varphi_\nu^i\,|\,N\,|\,\varphi_\nu^i\,\rangle = \nu\,\langle\,\varphi_\nu^i\,|\,\varphi_\nu^i\,\rangle \geqslant 0$

$\langle\,\varphi_\nu^i\,|\,\varphi_\nu^i\,\rangle \geqslant 0$

⇒ $\nu \geqslant 0$ ///

Consideremos $N\,|\,\varphi^i_\nu\,\rangle = \nu\,|\,\varphi^i_\nu\,\rangle$ y sea $|\varphi^i_\nu\rangle \neq 0$

Teorema II :

(a) Si $\nu = 0$, entonces $a|\varphi^i_{\nu=0}\rangle = 0$

(b) Si $\nu > 0$, entonces $a|\varphi^i_\nu\rangle \neq 0$ y $Na|\varphi^i_\nu\rangle = (\nu - 1)a|\varphi^i_\nu\rangle$

Teorema III :

(a) $\forall\nu \longrightarrow a^\dagger|\varphi^i_\nu\rangle \neq 0$

(b) $Na^\dagger|\varphi^i_\nu\rangle = (\nu + 1)a^\dagger|\varphi^i_\nu\rangle$

Consideremos $N\,|\,\varphi_\nu^i\,\rangle = \nu\,|\,\varphi_\nu^i\,\rangle$

Teorema II :

(a) Si $\nu = 0$, entonces $a|\varphi^i_{\nu=0}\rangle = 0$ (es el ket nulo)

Vimos que :

$$\|\,a\,|\,\varphi_\nu^i\,\rangle\,\|^2 = \langle\,\varphi_\nu^i\,|\,a^\dagger a\,|\,\varphi_\nu^i\,\rangle = \langle\,\varphi_\nu^i\,|\,N\,|\,\varphi_\nu^i\,\rangle = \nu\,\langle\,\varphi_\nu^i\,|\,\varphi_\nu^i\,\rangle$$

Entonces, si $\nu = 0 \longrightarrow \|\,a\,|\varphi^i_{\nu=0}\rangle\,\|^2 = 0$ ///

Consideremos $N\,|\varphi_\nu^i\rangle = \nu\,|\varphi_\nu^i\rangle$ y sea $|\varphi_\nu^i\rangle \neq 0$

Teorema II :

$$\text{(b) Si } \nu > 0, \text{ entonces } a|\varphi_\nu^i\rangle \neq 0 \text{ y } Na|\varphi_\nu^i\rangle = (\nu - 1)a|\varphi_\nu^i\rangle$$

$$\begin{aligned} Na|\varphi_\nu^i\rangle &= (Na - aN + aN)|\varphi_\nu^i\rangle \\ &= ([N, a] + aN)|\varphi_\nu^i\rangle \\ &= (-a + aN)|\varphi_\nu^i\rangle \\ &= a(N - 1)|\varphi_\nu^i\rangle \\ &= a(\nu - 1)|\varphi_\nu^i\rangle = (\nu - 1)\,a\,|\varphi_\nu^i\rangle \end{aligned}$$

///

Consideremos $N|\varphi_\nu^i\rangle = \nu|\varphi_\nu^i\rangle$ y sea $|\varphi_n^i\rangle \neq 0$

Teorema III :

(a) $\forall\nu \longrightarrow a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle \neq 0$

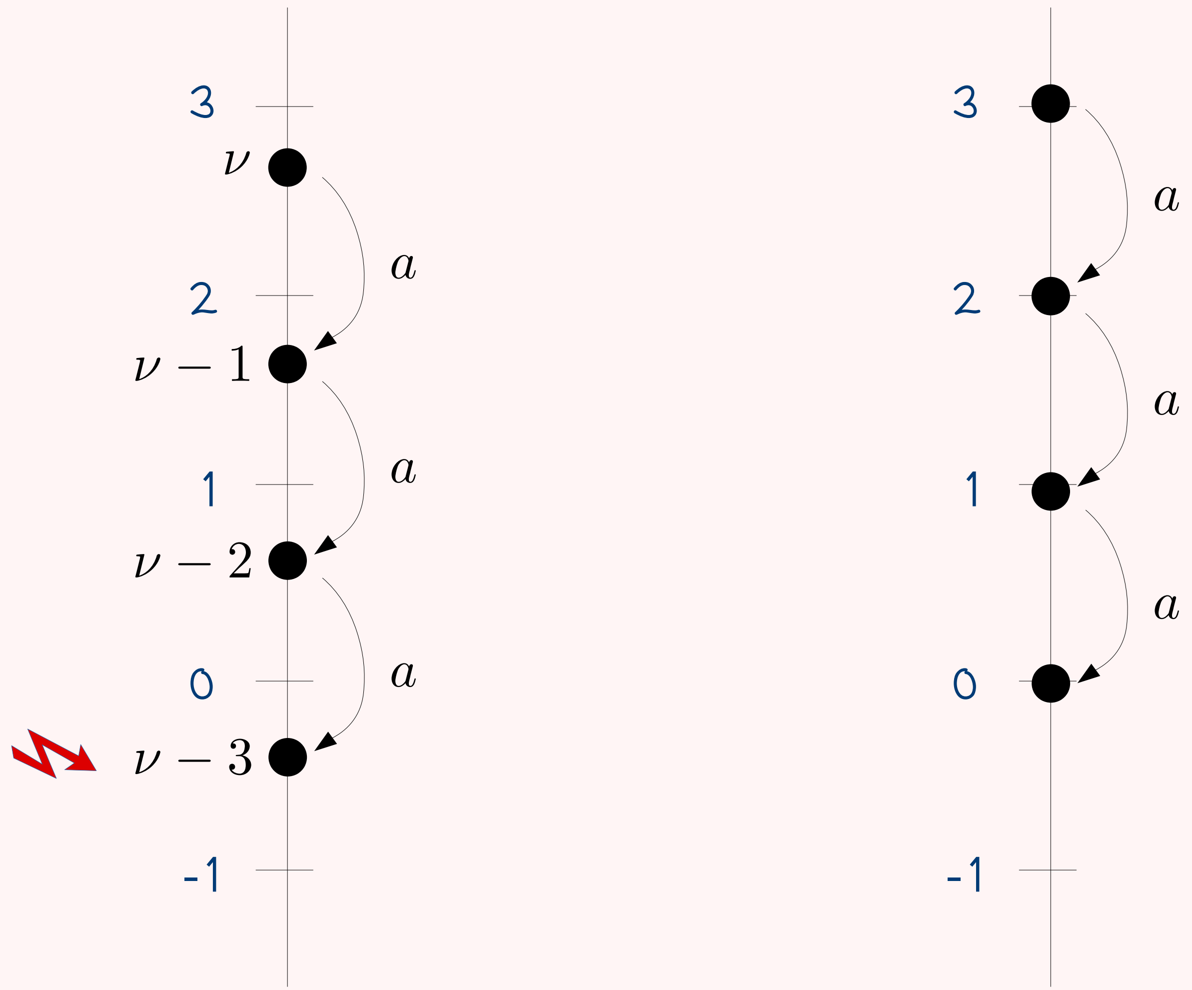
$$\begin{aligned} \| a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle \|^2 &= \langle \varphi_\nu^i | a a^\dagger | \varphi_\nu^i \rangle \\ &= \langle \varphi_\nu^i | (N+1) | \varphi_\nu^i \rangle \\ &= (\nu+1)\langle \varphi_\nu^i | \varphi_\nu^i \rangle \end{aligned}$$

(b) $Na^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle = (\nu+1)a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle$

$$[N, a^\dagger]|\varphi_\nu^i\rangle = a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle$$
$$Na^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle = a^\dagger N|\varphi_\nu^i\rangle + a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle = (\nu+1)a^\dagger|\varphi_\nu^i\rangle$$

///

El espectro de N consiste en los enteros ≥ 0



Autovalores de N

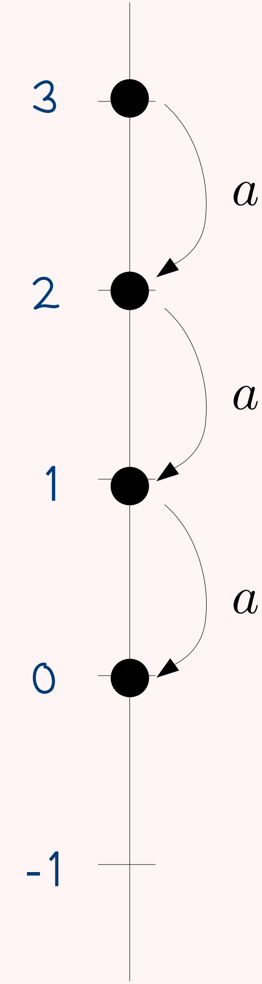
Aplicando a repetidamente llegamos a estado $|\varphi_0\rangle$ tal que:

$$a|\varphi_0\rangle = 0$$

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\tilde{X} + i\tilde{P}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, X + \frac{i}{\sqrt{m\omega\hbar}}\, P\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x + \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\, \frac{d}{dx}\right)$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}\, x + \frac{d}{dx}\right)$$



$$\Rightarrow \left(\frac{m\omega}{\hbar}\, x + \frac{d}{dx}\right)\varphi_0(x) = 0$$

DETERMINACIÓN DEL ESTADO FUNDAMENTAL

Autovalores de N

$$\Rightarrow \left(\frac{m\omega}{\hbar} x + \frac{d}{dx} \right) \varphi_0(x) = 0$$

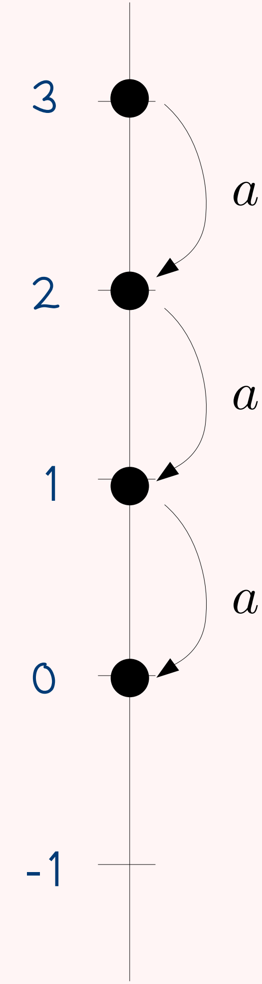
$$\Rightarrow \varphi_0(x) = A_0 \, e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

con $E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$ (verificar)

El resto de las autofunciones se obtiene aplicando a^+

$$\varphi_n(x) = A_n \, a^{+n} \, e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2}$$

y $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega$



Explícitamente, los autoestados normalizados son:

$$\varphi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\Big(\underbrace{\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x}_{=\,\xi}\Big)\, e^{-\xi^2/2}$$

$H_n(\xi)$ son los polinomios de Hermite. Ejemplos:

$$H_0 = 1$$

$$H_1 = 2\xi$$

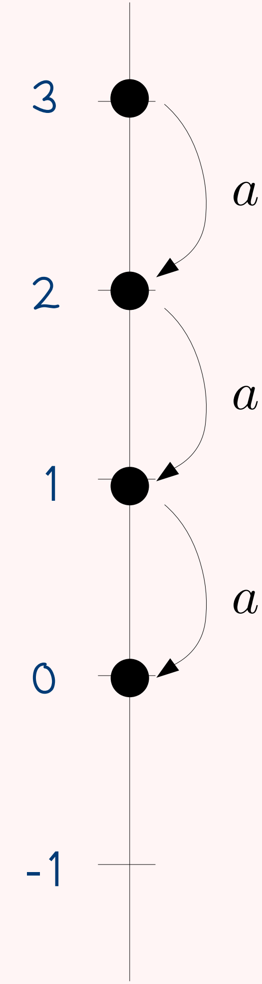
$$H_2 = 4\xi^2 - 2$$

$$H_3 = 8\xi^3 - 12\xi$$

$$H_4 = 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12$$

$$H_5 = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi$$

Notar que tienen paridad bien definida.



Resumen de la Clase 11

En esta clase vimos:

- Oscilador armónico: formulación
- Operadores de subida y de bajada
- Autovalores de N
- Estado fundamental y estados excitados