

# Física Teórica 2

Primer cuatrimestre de 2018

## Guía 4: Dinámica cuántica

1. La representación matricial del Hamiltoniano correspondiente a un fotón propagándose en dirección del eje óptico de un cristal de cuarzo usando como base los estados de polarización lineal  $\{|x\rangle, |y\rangle\}$  es

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -iE_0 \\ iE_0 & 0 \end{pmatrix}.$$

- a) Encuentre los autoestados y autovalores del Hamiltoniano.
- b) Un fotón entra al cristal linealmente polarizado en dirección  $x$ . Encuentre el estado del fotón a todo tiempo. Diga qué le ocurre a la polarización del fotón mientras viaja a través del cristal.
2. 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  $\omega_0$ ,  $a$  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) A  $t = 0$  se mide la energía del sistema. ¿Qué valores pueden encontrarse y con qué probabilidad? Calcule  $\langle H \rangle$  y  $\langle \Delta H \rangle$  para el estado  $|\psi(0)\rangle$ .
- b) Si a  $t = 0$  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 a  $t = 0$  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  $A$  en el instante  $t$ . Ídem para: (i)  $H$ , y (ii)  $B$ .
3. 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  $\nu = |E_2 - E_1|/\hbar$ . Note que el período  $\tau$  de esta oscilación satisface  $|E_2 - E_1|\tau = \hbar$ .
4. Considere el Hamiltoniano de un espín 1/2 electrónico en un campo magnético externo uniforme  $B$  en la dirección  $z$ ,

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

donde  $e < 0$ .

- 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 a  $t = 0$  el sistema está descrito por  $|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$ , que corresponde al estado  $|S_x+\rangle$ . Calcule el ket del estado  $|\alpha, t\rangle$  en un instante  $t$  posterior.
- c) Calcule la probabilidad de hallar al sistema en los estados  $|S_x+\rangle$  y  $|S_x-\rangle$  en un instante posterior  $t$ .
- 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  $\hat{n}$  tal que  $|\alpha(t)\rangle$  es autoestado del operador  $\mathbf{S} \cdot \hat{n}(t)$ .
5. 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

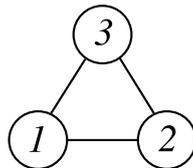
$$H = \delta (|a'\rangle\langle a''| + |a''\rangle\langle a'|),$$

donde  $\delta$  es un número real con unidades de energía.

- 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  $t = 0$ ?
6. 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 raíces 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

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

- 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  $t > 0$ .

7. Una caja que contiene una partícula se divide 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. Considerando a  $\{|R\rangle, |L\rangle\}$  como base ortonormal, el vector de estado más general puede ser escrito como

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

La partícula puede *tunear* a través del separador; este efecto túnel es caracterizado por el Hamiltoniano

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

donde  $\Delta$  es un número real con dimensiones de energía.

- Encuentre los autoestados de energía normalizados. ¿Cuáles son los autovalores de energía correspondientes?
- Suponga que inicialmente a  $t = 0$  el estado del sistema está dado por el  $|\alpha\rangle$  dado anteriormente. Encuentre el vector de estado  $|\alpha, t\rangle$  para un tiempo  $t > 0$  aplicando a  $|\alpha\rangle$  el operador de evolución temporal apropiado.
- 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?
- Escriba explícitamente la ecuación de Schrödinger para el estado  $|\alpha, t\rangle$  en la base  $\{|R\rangle, |L\rangle\}$ . Resuelva las ecuaciones acopladas de los coeficientes  $\langle R|\alpha, t\rangle$ ,  $\langle L|\alpha, t\rangle$  y verifique que obtiene el mismo resultado del punto (b) como debe ser.
- Suponga que por error se escribió  $H$  como

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

Resolviendo el problema de evolución temporal más general con este operador, muestre que se viola la conservación de la probabilidad. ¿Qué propiedad de todo Hamiltoniano válido no satisface este  $H$  y por qué implica esto que no se conserve la probabilidad?

8. Considere nuevamente el problema de la precesión del espín. Utilizando el Hamiltoniano del problema 4, 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  $|\alpha\rangle$  del ítem (b) del problema 4 con el antes obtenido en dicho ejercicio.
9. 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

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

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

- b) Pruebe que

$$\frac{d}{dt} \langle x \rangle = \left\langle \frac{\partial H}{\partial p} \right\rangle \quad \frac{d}{dt} \langle p \rangle = - \left\langle \frac{\partial H}{\partial x} \right\rangle,$$

donde  $H$  es el Hamiltoniano.

10. Considere una partícula libre unidimensional y suponga que a  $t_0$  la función de onda del sistema satisface la relación de incerteza mínima

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

- 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, tomando  $t_0 = 0$ , se satisface la relación

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

donde  $\langle (\Delta x)_0^2 \rangle$  y  $\langle (\Delta p)_0^2 \rangle$  son las dispersiones en el instante  $t_0 = 0$ . (Ayuda: tenga presente el ejercicio 3 de la guía 3 sobre la relación de incerteza generalizada). ¿Cómo varía el ancho del paquete en función del tiempo? Interprete el resultado.

11. Sea  $x(t)$  el operador posición para una partícula libre en una dimensión en el esquema de Heisenberg. Calcule

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

12. 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 de momentos. 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.

13. 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 esto?

- b) Para este caso en particular, considere un potencial homogéneo de grado  $\alpha$ , 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?
14. a) 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

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

donde  $\text{Im}$  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 (independiente de  $\mathbf{r}$ ).

- b) Muestre que la corriente de probabilidad  $\mathbf{j}$  y la densidad  $\rho$  satisfacen la ecuación de continuidad

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$$

para toda solución de la ecuación de Schrödinger. Interprete.

15. 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

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

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

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