



Ayudantía 11: Resumen Mecánica Cuántica

Fabián Cádiz

0.1. Principios

0.1.1. El espacio de Hilbert

La primera etapa en el tratamiento de un problema físico mediante la mecánica cuántica consiste en identificar el espacio de Hilbert apropiado al problema. Un espacio de Hilbert es un espacio vectorial sobre el cuerpo de los complejos, dotado de un producto escalar. Los vectores del espacio son llamados kets, y anotados $|\psi\rangle$. El producto escalar entre el ket $|\psi_1\rangle$ y el ket $|\psi_2\rangle$ se anota $\langle\psi_2|\psi_1\rangle$. Éste es lineal en $|\psi_1\rangle$ y antilineal en $|\psi_2\rangle$, y se tiene:

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\psi_1\rangle^*$$

0.1.2. Definición del estado de un sistema

El estado de un sistema físico está enteramente definido en todo instante t por un vector del espacio de Hilbert de norma 1, notado $|\psi(t)\rangle$. El principio de superposición establece que si $|\psi_1\rangle$ y $|\psi_2\rangle$ son dos estados posibles para un sistema físico dado, entonces toda combinación lineal

$$|\psi\rangle = c_1|\psi_1\rangle + c_2|\psi_2\rangle$$

es igualmente un estado posible del sistema. Los coeficientes deben cumplir $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.

0.1.3. Medida

A toda cantidad física A se le asocia un operador \hat{A} autoadjunto (o hermítico) del espacio de Hilbert. En una medida de la cantidad física A , los únicos resultados posibles son los valores propios a_α de \hat{A} . Consideremos un sistema que inicialmente (justo antes de la medida) está en el estado $|\psi\rangle$. La probabilidad $P(a_\alpha)$ de encontrar el resultado a_α es

$$P(a_\alpha) = \left\| \hat{P}_\alpha |\psi\rangle \right\|^2$$

donde \hat{P}_α es el proyector sobre el sub-espacio propio asociado al valor propio a_α . Una vez que la medida de \hat{A} haya dado un valor a_α , el estado del sistema justo después de la medida es proporcional a $\hat{P}_\alpha |\psi\rangle$.

0.1.4. Evolución hamiltoniana

Cuando el sistema no es sometido a ninguna observación, la evolución del vector de estado está dada por la ecuación de Schrodinger:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle = \hat{H}(t) |\psi\rangle$$

El operador hermítico $\hat{H}(t)$ es el hamiltoniano (operador asociado a la energía) en el instante t . En el caso de un sistema aislado, el hamiltoniano es independiente del tiempo. Los estados propios $|\phi_n\rangle$ del hamiltoniano, soluciones de la ecuación de Schrodinger independiente del tiempo:

$$\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle$$

forman una base ortogonal del espacio de Hilbert particularmente útil. En efecto, una vez expresado el estado inicial $|\psi(0)\rangle$ en términos de esta base, se conoce su expresión en cualquier tiempo posterior t :

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n \alpha_n |\phi_n\rangle \quad \rightarrow \quad |\psi(t)\rangle = \sum_n \alpha_n e^{-iE_n t/\hbar} |\phi_n\rangle$$

Los coeficientes α_n son $\langle \phi_n | \psi(0) \rangle$. Escrito de otra forma:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \psi(0) \rangle$$

0.1.5. Conjunto completo de observables que conmutan (CCOC)

Un conjunto $\{\hat{A}, \hat{B}, \dots, \hat{X}\}$ forma un CCOC si todos los operadores conmutan de a pares y si su base propia común $\{|\alpha, \beta, \dots, \zeta\rangle\}$ es única (salvo por un factor de fase). La medida del conjunto de cantidades físicas $\{\hat{A}, \hat{B}, \dots, \hat{X}\}$ sobre un sistema dado permite preparar el sistema de manera certera, si estas medidas han dado los resultados α de \hat{A} , β para \hat{B} , ... , ζ para \hat{X} , entonces el estado del sistema es, con certeza, $|\alpha, \beta, \dots, \zeta\rangle$.

0.2. Resultados generales

0.2.1. Relaciones de incertidumbre

Considere $2N$ sistemas físicos idénticos e independientes, todos preparados en el mismo estado $|\psi\rangle$ (tomamos $N \gg 1$). Para N de entre ellos, se mide la cantidad física A , para los N restantes, se mide otra cantidad B . Las dispersiones Δa y Δb de las dos series de mediciones verifican la desigualdad:

$$\Delta a \Delta b \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi \rangle \right|$$

0.2.2. Teorema de Ehrenfest

Considere un sistema que evoluciona bajo el efecto del hamiltoniano $\hat{H}(t)$, y un observable $\hat{A}(t)$. El valor medio de este observable evoluciona entonces según:

$$\frac{d}{dt} \langle a \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \psi \rangle$$

En particular, si \hat{A} es independiente del tiempo y si conmuta con \hat{H} , el valor medio $\langle a \rangle$ es constante.

0.3. Caso de una partícula puntual, física ondulatoria

0.3.1. Función de onda

Para una partícula puntual sin spin, el espacio de Hilbert está constituido por el conjunto de las funciones de cuadrado integrable. El vector de estado $|\psi\rangle$ es una función de onda $\psi(\vec{x})$. La cantidad $|\psi(\vec{x})|^2$ representa la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula en \vec{x} . La transformada de Fourier $\varphi(\vec{p})$

$$\varphi(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \psi(\vec{x}) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}/\hbar}$$

da la amplitud de probabilidad para encontrar la partícula con un momentum \vec{p} .

0.3.2. Operadores

Entre los operadores asociados a las cantidades físicas usuales, se encuentran:

1. El operador posición $\hat{r} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ que consiste en multiplicar por \vec{r} la función de onda $\psi(\vec{r})$.
2. El operador momentum \hat{p} cuya acción sobre la función de onda $\psi(\vec{x})$ es la operación $-i\hbar\vec{\nabla}$.
3. El hamiltoniano (u operador energía) para una partícula colocada en el potencial $V(\vec{x})$:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad \rightarrow \quad \hat{H}\psi(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}^2\psi(\vec{x}) + V(\vec{x})\psi(\vec{x})$$

donde m es la masa de la partícula.

0.3.3. Continuidad de las funciones de onda

Si el potencial V es continuo, los estados propios del hamiltoniano $\psi_\alpha(\vec{x})$ son continuas y de derivada continua. Esto sigue siendo válido si el potencial $V(\vec{x})$ posee discontinuidades finitas. Si se consideran saltos de potencial infinitos (por ejemplo en un punto x_0), la función de onda sigue siendo continua y se anula ($\psi(x_0) = 0$), su primera derivada es ahora discontinua. En una dimensión, se utilizan a veces potenciales en distribución de Dirac, por ejemplo $V(x) = g\delta(x)$. La función de onda es continua en este punto y la discontinuidad de la derivada se obtiene integrando la ecuación de Schrodinger sobre la vecindad del punto donde se encuentra la distribución de Dirac. Se obtiene $[\psi(0_+)' - \psi(0_-)'] = 2mg/\hbar^2\psi(0)$, en nuestro ejemplo.

0.3.4. Relación de incertidumbre posición-momentum

Utilizando el resultado general indicado anteriormente, se encuentra:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \quad \rightarrow \quad \Delta x \Delta p \geq \hbar/2$$

e igualmente para los ejes y y z .

0.4. Momento angular

0.4.1. Observable momento angular

Se llama observable de momento angular \hat{J} a un conjunto de tres operadores $\{\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z\}$ que verifican las relaciones de conmutación siguientes:

$$[\hat{J}_x, \hat{J}_y] = i\hbar\hat{J}_z, \quad [\hat{J}_y, \hat{J}_z] = i\hbar\hat{J}_x, \quad [\hat{J}_z, \hat{J}_x] = i\hbar\hat{J}_y$$

El momento angular orbital $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$ es un observable de momento angular. El observable $\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2$ conmuta con cada una de las tres componentes \hat{J}_i . Se puede encontrar entonces una base común a \hat{J}^2 y una de estas tres componentes \hat{J}_i . Se escoge tradicionalmente $i = z$.

0.4.2. Valores propios del momento angular

Los valores propios de \hat{J}^2 son de la forma $\hbar^2 j(j+1)$ con j entero o semi-entero. En un subespacio propio correspondiente a un valor de j dado, los valores propios de \hat{J}_z son de la forma

$$\hbar m, \quad \text{con } m \in \{-j, -j+1, \dots, j-1, j\} \quad (2j+1 \text{ valores})$$

Los estados propios correspondientes son anotados $|\alpha, j, m\rangle$, donde α representa los otros números cuánticos asociados necesarios para definir completamente el estado. Se puede pasar de $|\alpha, j, m\rangle$ a $|\alpha, j, m \pm 1\rangle$ gracias a los operadores $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$:

$$\hat{J}_\pm |\alpha, j, m \pm 1\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |\alpha, j, m \pm 1\rangle$$

0.4.3. Momento cinético orbital de una partícula puntual

Para un momento cinético orbital, se tiene:

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right)$$

y en coordenadas esféricas

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

con φ el ángulo azimutal ($0 \leq \varphi \leq 2\pi$). Considere un estado propio de \hat{L}_z con valor propio $m\hbar$. La función de onda correspondiente $\psi_m(\vec{r})$ satisface entonces:

$$\hat{L}_z \psi_m(\vec{r}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi_m(\vec{r}) = m\hbar \psi_m(\vec{r})$$

Esto significa que la dependencia de la función de onda en φ es muy simple:

$$\psi_m(\vec{x}) = \Phi_m(r, \vartheta) e^{im\varphi}$$

Claramente debe tenerse $e^{im(\varphi+2\pi)} = e^{im\varphi}$, luego m está restringido a ser un entero, y por lo tanto, l (autovalor de \hat{L}^2) también. El operador \hat{L}^2 toma la forma:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

0.4.4. Armónicos esféricos

Se llaman armónicos esféricos $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$ a las funciones propias comunes a los observables \hat{L}^2 y \hat{L}_z asociados a los valores propios $l(l+1)\hbar^2$ y $m\hbar$

$$\hat{L}^2 Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = l(l+1)\hbar^2 Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$$

$$\hat{L}_z Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = m\hbar Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$$

Los armónicos esféricos forman una base hilbertiana de las funciones de cuadrado sumable definidas sobre la esfera de radio uno. Ellas están normalizadas a uno

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)^* Y_{l',m'}(\vartheta, \varphi) = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}$$

Además, se sabe que la dependencia en φ es de la forma $e^{im\varphi}$, luego:

$$Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = F_{l,m}(\vartheta) e^{im\varphi}$$

Problema 1: Medidas sucesivas sobre la molécula de NH₃

Sea una molécula de amoníaco, y nos interesamos por las combinaciones lineales de sus dos estados de más baja energía, $|\psi_S\rangle$, y $|\psi_A\rangle$. En la base $\{|\psi_S\rangle, |\psi_A\rangle\}$ se escoge el origen de las energías de forma que el hamiltoniano se escribe bajo la forma:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} -\hbar\omega/2 & 0 \\ 0 & \hbar\omega/2 \end{pmatrix}$$

donde $\hbar\omega = E_A - E_S$. En esta base, el operador posición (no es exactamente el operador posición \hat{x}) se define por:

$$\hat{X} = x_0 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

- Sea un estado de la forma $|\psi_\vartheta\rangle = \cos\vartheta|\psi_S\rangle + \sin\vartheta|\psi_A\rangle$ donde ϑ es un ángulo cualquiera. Calcule $\langle E \rangle$, ΔE , $\langle X \rangle$ y ΔX en este estado.
- Sea un estado $|\psi(t)\rangle$ tal que $|\psi(t=0)\rangle = |\psi_\vartheta\rangle$. Escriba la expresión de $|\psi(t)\rangle$ en un instante posterior $t > 0$.
- En lo que sigue, considere el caso $\vartheta = \pi/4$. Designamos por $|\psi(t)\rangle$ al estado tal que $|\psi(t=0)\rangle = |\psi_{\vartheta=\pi/4}\rangle$. Cuáles son los valores de $\langle E \rangle$, ΔE , $\langle X \rangle$, y ΔX en el estado $|\psi(t=0)\rangle$?
- Se deja evolucionar el sistema durante un tiempo T . Cuál es la probabilidad de encontrar el resultado x_0 en la medida de X al instante T ?
- Suponiendo que se ha encontrado el valor x_0 , cuál es el estado $|\psi(t=T(1+\epsilon))\rangle$ inmediatamente después de la medida ($0 < \epsilon \ll 1$)?
- Se efectúa sobre el mismo sistema una serie de N medidas sucesivas de X en los instantes $t = T/N, t = 2T/N, \dots, (N-1)T/N, T$. Cuál es la probabilidad $P_N(T)$ de que cada una de estas medidas de el mismo resultado, x_0 ?
- Cuánto vale $P_N(T)$ en el límite de un gran número de medidas, $N \rightarrow \infty$? (Recuerde: $\cos \epsilon \approx 1 - \epsilon^2/2$ para $|\epsilon| \ll 1$ y $(1 + \epsilon)^N \approx 1 + N\epsilon$. Comente.

Solución

a) Se obtiene:

$$\langle E \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = -\frac{\hbar\omega}{2} (\cos^2 \vartheta - \sin^2 \vartheta) = -\frac{\hbar\omega}{2} \cos 2\vartheta$$

Se tiene además que $\hat{H}^2 = (\hbar\omega/2)^2 \mathbb{1}$, de forma que:

$$\Delta E = \sqrt{\hbar^2\omega^2/4 - (-\hbar\omega/2 \cos 2\vartheta)^2} = \frac{\hbar\omega}{2} |\sin 2\vartheta|$$

De igual forma:

$$\langle X \rangle = \langle \psi | \hat{X} | \psi \rangle = x_0 \sin 2\vartheta$$

y como $\hat{X}^2 = x_0^2 \mathbb{1}$:

$$\Delta X = \sqrt{x_0^2 - (x_0 \sin 2\vartheta)^2} = x_0 |\cos 2\vartheta|$$

b) Ya que $|\psi_S\rangle$ y $|\psi_A\rangle$ son estados propios de la energía, se tiene:

$$|\psi(t)\rangle = \cos \vartheta e^{i\omega t/2} |\psi_S\rangle + \sin \vartheta e^{-i\omega t/2} |\psi_A\rangle$$

c) Para $\vartheta = \pi/4$:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{i\omega t/2}|\psi_S\rangle + e^{-i\omega t/2}|\psi_A\rangle)$$

Los valores pedidos son, en $t = 0$:

$$\langle E \rangle = 0$$

$$\Delta E = \frac{\hbar\omega}{2}$$

$$\langle X \rangle = x_0$$

$$\Delta X = 0$$

el estado $|\psi(0)\rangle$ es vector propio de \hat{X} !

d) Los estados propios de \hat{X} son:

$$|\psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_S\rangle \pm |\psi_A\rangle)$$

con autovalores $\pm x_0$. La probabilidad pedida es:

$$P_+(T) = |\langle \psi_+ | \psi(T) \rangle|^2 = \cos^2 \left(\frac{\omega T}{2} \right)$$

e) Si el resultado encontrado es x_0 , el estado justo después de la medida es

$$|\psi(T + \epsilon)\rangle = |\psi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_S\rangle + |\psi_A\rangle) = |\psi(0)\rangle$$

f) Debido a que el sistema justo después de cada medida se encuentra nuevamente en el estado inicial $|\psi_+\rangle$, y dado que los intervalos de tiempo son los mismos entre 2 medidas consecutivas, la probabilidad pedida es simplemente:

$$P_N(T) = (\cos \omega T/2N)^N$$

g) En el límite $N \rightarrow \infty$, se tiene:

$$P_n \sim \left(1 - \frac{\omega^2 T^2}{8N^2} \right)^{2N} \sim 1 - \frac{\omega^2 T^2}{4N} \rightarrow 1$$

El hecho de medir, es decir, de observar el sistema, le impide evolucionar. En la práctica, no es posible dividir el intervalo T infinitamente salvo si se interactúa permanentemente con el sistema, lo que es en realidad otro problema!.

Problema 2: Operadores de translación y rotación

a) Considere un problema a una dimensión y una función de onda $\psi(x)$ desarrollable en serie de Taylor. Muestre que el operador $\hat{T}(x_0) = e^{-ix_0\hat{p}/\hbar}$, donde x_0 es una longitud y \hat{p} es el operador momentum, es tal que:

$$\hat{T}(x_0)\psi(x) = \psi(x - x_0)$$

b) Considere ahora un problema a dos dimensiones en un plano xy e introducimos la componente z del operador momento angular

$$\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

donde las coordenadas polares r, ϕ son definidas por $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, $\phi = \arctan(y/x)$. Muestre que el operador $\hat{R}(\varphi) = e^{-i\varphi\hat{L}_z/\hbar}$, donde φ es una cantidad adimensional, es tal que:

$$\hat{R}(\varphi)\psi(r, \phi) = \psi(r, \phi - \varphi)$$

Solución

a) La demostración es inmediata, tenemos:

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad \rightarrow \quad \hat{T}(x_0) = e^{-x_0 \frac{d}{dx}}$$

Luego:

$$\hat{T}(x_0)\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-x_0)^n}{n!} \left(\frac{d}{dx} \right)^n \psi(x)$$

que es el desarrollo en serie de Taylor de $\psi(x - x_0)$. Notar que dada la hermiticidad del operador momentum \hat{p} , $\hat{T}(x_0)$ es un operador unitario. En resumen, toda traslación espacial se puede expresar como $e^{-ix_0\hat{p}/\hbar}$, se dice que el momentum es el generador infinitesimal del grupo de traslaciones.

b) De igual forma, se tiene que $\hat{R}(\varphi) = e^{-\varphi \frac{\partial}{\partial \phi}}$, y entonces:

$$\hat{R}(\varphi)\psi(r, \phi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\varphi)^n}{n!} \left(\frac{\partial}{\partial \phi} \right)^n \psi(r, \phi)$$

y se reconoce la expansión en serie de Taylor de $\psi(r, \phi - \varphi)$. Se dice que el operador de momento angular \hat{L}_z es el generador infinitesimal del grupo de rotaciones en torno a z .

Problema 3: Estados cuasi-clásicos del oscilador armónico

Considere el problema del oscilador armónico en una dimensión, de masa m y frecuencia ω . El hamiltoniano se escribe:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2$$

Denotamos $\{|n\rangle\}$ la base propia de \hat{H} , el valor propio asociado a $|n\rangle$ es $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$. Introducimos los observables $\hat{X} = \hat{x}\sqrt{m\omega/\hbar}$ y $\hat{P} = \hat{p}/\sqrt{m\hbar\omega}$, y también:

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

Recuerde que $[\hat{X}, \hat{P}] = i$, $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$, y las relaciones $\hat{H} = \hbar\omega(\hat{N} + 1/2)$ y $\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle$.

a) Justifique que trabajando con las variables sin dimensión X y P , se tiene:

$$\hat{P} = -i\frac{\partial}{\partial X} \quad \hat{X} = i\frac{\partial}{\partial P}$$

b) Evalúe el conmutador $[\hat{N}, \hat{a}]$, y deduzca que:

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle \quad (1)$$

c) Utilizando (1) para $n=0$ y reemplazando \hat{a} por su expresión en términos de \hat{X} y \hat{P} , deduzca la función de onda del estado fundamental $\psi_0(X)$, y su transformada de Fourier $\varphi_0(P)$. No es necesario normalizar el resultado obtenido.

d) Ahora estudiaremos las propiedades de los estados propios del operador \hat{a} , llamados estados cuasi-clásicos. Sea $\alpha \in \mathbb{C}$ cualquiera. Muestre que el estado:

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle$$

es estado propio normado de \hat{a} con valor propio α .

e) Calcule el valor medio de la energía en un estado cuasi-clásico $|\alpha\rangle$. Calcule igualmente los valores medios $\langle x \rangle$, $\langle p \rangle$ y las dispersiones Δx , Δp . Muestre que $\Delta x \Delta p = \hbar/2$.

f) De forma análoga a la parte c), calcule la función de onda de un estado cuasi-clásico $\psi_\alpha(X)$, y su transformada de Fourier $\varphi_\alpha(P)$.

g) Suponga que en $t=0$, el oscilador está en un estado cuasi-clásico $|\alpha_0\rangle$ con $\alpha_0 = \rho e^{i\varphi}$ (con ρ un real positivo). Muestre que a todo instante posterior t , el oscilador se encuentra en un estado cuasi-clásico que podemos escribir $e^{-i\omega t/2}|\alpha(t)\rangle$. Determine $\alpha(t)$.

h) Evalúe $\langle x \rangle_t$, $\langle p \rangle_t$. Utilizando el resultado de e), justifique por qué estos estados son llamados cuasi-clásicos para $|\alpha| \gg 1$.

Solución

a) Un cambio de variable inmediato da:

$$\hat{P} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{m\hbar\omega}} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} = -i\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{\partial}{\partial x} = -i\frac{\partial}{\partial X}$$

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} i\hbar \frac{\partial}{\partial p} = i\sqrt{m\hbar\omega} \frac{\partial}{\partial p} = i\frac{\partial}{\partial P}$$

b) Se tiene:

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

De esta forma:

$$[\hat{N}, \hat{a}]|n\rangle = \hat{N}\hat{a}|n\rangle - \hat{a}n|n\rangle = -\hat{a}|n\rangle$$

$$\hat{N}\hat{a}|n\rangle = (n-1)\hat{a}|n\rangle$$

Se concluye que $\hat{a}|n\rangle$ es vector propio de \hat{N} con valor propio $n-1$. Esto implica:

$$\hat{a}|n\rangle = \mu|n-1\rangle$$

El coeficiente de proporcionalidad μ se determina calculando la norma de $\hat{a}|n\rangle$:

$$\|\hat{a}|n\rangle\|^2 = \langle n|\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle = n$$

Luego $\mu = \sqrt{n}$:

$$\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

c) La ecuación $\hat{a}|0\rangle = 0$ corresponde a $(\hat{X} + i\hat{P})|0\rangle = 0$. En función de la variable X :

$$\left(X + \frac{\partial}{\partial X}\right) \psi_0(X) = 0 \rightarrow \psi_0(X) = C e^{-X^2/2}$$

en función de la variable P :

$$\left(P + \frac{\partial}{\partial P}\right) \varphi_0(P) = 0 \rightarrow \varphi_0(P) = C' e^{-P^2/2}$$

d) Se verifica:

$$\hat{a}|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \hat{a}|n\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \sqrt{n}|n-1\rangle$$

$$\hat{a}|\alpha\rangle = \alpha e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{\alpha^{n-1}}{\sqrt{(n-1)!}} |n-1\rangle = \alpha|\alpha\rangle$$

Por otro lado, la norma de $|\alpha\rangle$ da:

$$\langle \alpha|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_n \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = 1$$

e) El valor medio de la energía es:

$$\langle E \rangle = \langle \alpha|\hat{H}|\alpha\rangle = \hbar\omega \langle \alpha|\hat{N} + \frac{1}{2}|\alpha\rangle = \hbar\omega \left(\frac{1}{2} + |\alpha|^2\right)$$

Pues $\langle \alpha|\hat{N}|\alpha\rangle = \langle \alpha|\hat{a}^\dagger \hat{a}|\alpha\rangle = \|\hat{a}|\alpha\rangle\|^2 = |\alpha|^2$. Además:

$$\langle x \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \alpha|\hat{a} + \hat{a}^\dagger|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha + \alpha^*)$$

$$\langle p \rangle = \sqrt{m\hbar\omega} \frac{1}{i\sqrt{2}} \langle \alpha | \hat{a} - \hat{a}^\dagger | \alpha \rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\alpha^* - \alpha)$$

y:

$$\Delta x^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} \langle \alpha | (\hat{a} + \hat{a}^\dagger)^2 | \alpha \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} ((\alpha + \alpha^*)^2 + 1) - \langle x \rangle^2$$

es decir:

$$\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$$

que es independiente de α . De igual forma:

$$\Delta p^2 = -\frac{m\hbar\omega}{2} \langle \alpha | (\hat{a} - \hat{a}^\dagger)^2 | \alpha \rangle - \langle p \rangle^2 = -\frac{m\hbar\omega}{2} ((\alpha - \alpha^*)^2 - 1) - \langle p \rangle^2$$

$$\Delta p = \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}$$

igualmente independiente de α . La desigualdad de Heisenberg está saturada:

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

para cualquier valor de α !

f) En función de la variable X :

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(X + \frac{\partial}{\partial X} \right) \psi_\alpha(X) = \alpha \psi_\alpha(X) \quad \rightarrow \quad \psi_\alpha(X) = C e^{-(X - \alpha\sqrt{2})^2/2}$$

$$\frac{i}{\sqrt{2}} \left(P + \frac{\partial}{\partial P} \right) \varphi_\alpha(P) = \alpha \varphi_\alpha(P) \quad \rightarrow \quad \varphi_\alpha(P) = C' e^{-(P + i\alpha\sqrt{2})^2/2}$$

g) Se obtiene:

$$|\psi(0)\rangle = |\alpha_0\rangle$$

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-|\alpha_0|^2/2} \sum_n \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \\ &= e^{-|\alpha_0|^2/2} e^{-i\omega t/2} \sum_n \frac{\alpha_0^n}{\sqrt{n!}} e^{-in\omega t} |n\rangle \\ &= e^{-i\omega t/2} |\alpha(t)\rangle \end{aligned}$$

$$\text{con } \alpha(t) = \alpha_0 e^{-i\omega t} = \rho e^{-i(\omega t - \varphi)}$$

h) Se obtiene:

$$\langle x \rangle_t = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}} \rho \cos(\omega t - \varphi) = x_0 \cos(\omega t - \varphi) \quad x_0 = \rho \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}$$

$$\langle p \rangle_t = -\sqrt{2m\hbar\omega} \rho \sin(\omega t - \varphi) = -p_0 \sin(\omega t - \varphi) \quad p_0 = \rho \sqrt{2m\hbar\omega}$$

Son las ecuaciones de movimiento de un oscilador clásico. Por otro lado, utilizando el resultado encontrado en e) para las varianzas:

$$\frac{\Delta x}{x_0} = \frac{1}{2\rho} \ll 1$$

$$\frac{\Delta p}{p_0} = \frac{1}{2\rho} \ll 1$$

La posición y el momentum del oscilador están entonces muy bien definidos en valor relativo, de ahí la nomenclatura de estados cuasi-clásicos.

Problema 4: Momento angular uno

Considere un sistema en un estado propio de \hat{L}^2 asociado al valor propio $2\hbar^2$, es decir $l = 1$.

a) Partiendo de la expresión de los operadores \hat{L}_+ y \hat{L}_- sobre los vectores $\{|l, m\rangle\}$ de la base propia común a \hat{L}^2 y \hat{L}_z , encuentre las matrices que representan a \hat{L}_x , \hat{L}_y y \hat{L}_z .

b) Exprese en términos de los ángulos ϑ y φ la densidad de probabilidad para un sistema preparado en el estado propio de \hat{L}^2 y \hat{L}_x correspondiente a los valores $l = 1$ y $m_x = 1$.

Solución

a) Si el sistema se encuentra en un estado propio de \hat{L}^2 con autovalor $2\hbar^2 = \hbar^2 l(l+1)$ significa que $l = 1$. Es decir, el sistema pertenece al subespacio asociado al autovalor $l = 1$, de dimensión 3 pues los posibles valores de m son $m = -1, 0, 1$. La acción de \hat{L}_z sobre la base $|l = 1, m\rangle = |1, m\rangle$ es:

$$\hat{L}_z |l = 1, m\rangle = m\hbar |l = 1, m\rangle$$

Luego la representación es una matriz diagonal de la forma:

$$\hat{L}_z = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

La acción de \hat{L}_x y \hat{L}_y se obtiene utilizando los operadores \hat{L}_+ y \hat{L}_- , cuyos elementos de matrices se obtienen utilizando $\hat{L}_\pm |l = 1, m\rangle = \hbar\sqrt{2 - m(m \pm 1)} |l = 1, m \pm 1\rangle$:

$$\hat{L}_+ |1, 1\rangle = 0 \quad \hat{L}_+ |1, 0\rangle = \hbar\sqrt{2} |1, 1\rangle \quad \hat{L}_+ |1, -1\rangle = \hbar\sqrt{2} |1, 0\rangle$$

$$\hat{L}_- |1, 1\rangle = \hbar\sqrt{2} |1, 0\rangle \quad \hat{L}_- |1, 0\rangle = \hbar\sqrt{2} |1, -1\rangle \quad \hat{L}_- |1, -1\rangle = 0$$

Luego, considerando $\hat{L}_x = \frac{1}{2} (\hat{L}_+ + \hat{L}_-)$ y $\hat{L}_y = \frac{i}{2} (\hat{L}_- - \hat{L}_+)$:

$$\hat{L}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \hat{L}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}$$

b) Los vectores propios de \hat{L}_x se encuentran utilizando la representación matricial. Se obtiene:

$$|1, \pm 1\rangle_x = \frac{1}{2} (|1, 1\rangle \pm \sqrt{2} |1, 0\rangle + |1, -1\rangle) \quad \text{valor propio } \pm \hbar$$

$$|1, 0\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 1\rangle - |1, -1\rangle) \quad \text{valor propio } 0$$

La función propia correspondiente a $m_x = +1$ es:

$$\begin{aligned} \psi(\vartheta, \varphi) &= \frac{1}{2} (Y_{1,1}(\vartheta, \varphi) + Y_{1,-1}(\vartheta, \varphi)) + \frac{1}{\sqrt{2}} Y_{1,0}(\vartheta, \varphi) \\ &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} (\cos \vartheta - i \sin \vartheta \sin \varphi) \end{aligned}$$

Luego:

$$|\psi(\vartheta, \varphi)|^2 = \frac{3}{8\pi} (1 - \sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi)$$

Problema 5: Principio de incertidumbre para momento angular

Considere un sistema descrito por un autoestado $|j, m\rangle$ de los operadores \hat{J}^2 y \hat{J}_z .

a) Deduzca el valor medio de \hat{J}_x y \hat{J}_y en este estado.

b) Calcule $\Delta\hat{J}_x$, $\Delta\hat{J}_y$ y muestre que es consistente con el principio de incertidumbre.

Solución

a) Utilizando $\hat{J}_x = (\hat{J}_+ + \hat{J}_-)/2$ y $\hat{J}_y = (\hat{J}_+ - \hat{J}_-)/2i$, se tiene:

$$\langle j, m | \hat{J}_x | j, m \rangle = \frac{1}{2} \langle j, m | \hat{J}_+ | j, m \rangle + \frac{1}{2} \langle j, m | \hat{J}_- | j, m \rangle$$

Dado que $\hat{J}_+ |j, m\rangle$ es proporcional a $|j, m+1\rangle$, y considerando que $\langle l', m' | l, m \rangle = \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}$, entonces

$$\langle j, m | \hat{J}_+ | j, m \rangle = \langle j, m | \hat{J}_- | j, m \rangle = 0$$

Y se deduce entonces que si el sistema está preparado en un autoestado $|j, m\rangle$ de \hat{J}^2 y \hat{J}_z , el valor medio de \hat{J}_x es cero:

$$\langle J_x \rangle = \langle j, m | \hat{J}_x | j, m \rangle = 0$$

De igual forma se demuestra que:

$$\langle J_y \rangle = \langle j, m | \hat{J}_y | j, m \rangle = 0$$

b) Utilizemos el siguiente hecho:

$$\begin{aligned} \langle j, m | \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 | j, m \rangle &= \langle j, m | \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 | j, m \rangle \\ \langle j, m | \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 | j, m \rangle &= (j(j+1) - m^2) \hbar^2 \end{aligned} \quad (2)$$

Por otro lado:

$$\langle j, m | \hat{J}_x^2 | j, m \rangle = \frac{1}{4} \langle j, m | \hat{J}_+^2 + \hat{J}_-^2 + \hat{J}_+ \hat{J}_- + \hat{J}_- \hat{J}_+ | j, m \rangle$$

mientras que:

$$\langle j, m | \hat{J}_y^2 | j, m \rangle = -\frac{1}{4} \langle j, m | \hat{J}_x^2 + \hat{J}_z^2 - \hat{J}_+ \hat{J}_- - \hat{J}_- \hat{J}_+ | j, m \rangle$$

Finalmente, por el mismo argumento utilizado en a), $\langle j, m | \hat{J}_+^2 | j, m \rangle = \langle j, m | \hat{J}_-^2 | j, m \rangle = 0$, y se sigue que

$$\langle j, m | \hat{J}_x^2 | j, m \rangle = \langle j, m | \hat{J}_y^2 | j, m \rangle$$

Esto junto a (2) nos da:

$$\Delta J_x^2 = \langle j, m | \hat{J}_x^2 | j, m \rangle = \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - m^2) = \Delta J_y^2$$

$$\Delta J_x = \Delta J_y = \hbar \sqrt{\frac{j(j+1) - m^2}{2}}$$

Se ve entonces que la incertidumbre en la medición de J_x y J_y no es nula salvo en el caso particular $j = 0$. Notar que a partir del principio de incertidumbre generalizado se obtiene:

$$\Delta J_x \Delta J_y \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [\hat{J}_x, \hat{J}_y] | \psi \rangle$$

$$\Delta J_x \Delta J_y \geq \frac{\hbar}{2} |\langle \psi | \hat{J}_z | \psi \rangle|$$

Y vemos entonces que se cumple esta desigualdad, ya que:

$$\Delta J_x \Delta J_y = \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - m^2) \geq \frac{\hbar^2}{2} (|m|(|m|+1) - m^2)$$

pues $|m| \leq j$, luego :

$$\Delta J_x \Delta J_y \geq \frac{\hbar^2}{2} |m| = \frac{\hbar}{2} |\langle j, m | \hat{J}_z | j, m \rangle|$$

Muy bien!