Pontificia Universidad Católica de Chile
Facultad de Física
FIZ0322 Física Cuántica I

Ayudantía 9: Mecánica Cuántica en el formalismo de Dirac

Fabián Cádiz

0.1. Primer principio

A cada sistema físico se le asocia un espacio de Hilbert H. El estado del sistema se define a cada instante por un vector normado $|\psi(t)\rangle$ de H.

0.2. Segundo principio

1. A toda cantidad física A se le asocia un operador lineal autoadjunto $\hat{A}$ de H, $\hat{A}$ es el observable que representa a la cantidad A.

2. Principio de cuantificación: Sea $|\psi\rangle$ el estado en el cual se encuentra el sistema al momento de efectuar una medida de A. Para cualquier $|\psi\rangle$, los únicos resultados posibles son los valores propios a_α del observable $\hat{A}$.

3. Principio de descomposición espectral: Sea $\hat{P}_\alpha$ el operador de proyección sobre el subespacio asociado al valor propio a_α. La probabilidad de encontrar el valor a_α al realizar una medida de A es:

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

Se tiene la equivalencia

$$\hat{P}_\alpha |\psi\rangle = \langle\psi|\hat{P}_\alpha|\psi\rangle$$

4. Principio de reducción de la función de onda: Inmediatamente después de una medida de A que dio por resultado el valor a_α, el estado del sistema es:

$$|\psi'\rangle = \frac{\hat{P}_\alpha|\psi\rangle}{\left\| \hat{P}_\alpha|\psi\rangle \right\|}$$

0.3. Tercer principio: evolución temporal

Sea $|\psi(t)\rangle$ el estado del sistema al instante t. Si el sistema no es sometido a ninguna observación, su evolución en el tiempo está regida por la ecuación de Schrodinguer:

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

donde $\hat{H}$ es el observable asociado a la energía: el hamiltoniano del sistema.

Problema 1: Operador de evolución

Considere un sistema cuyo hamiltoniano $\hat{H}$ es independiente del tiempo (sistema aislado). Muestre que el vector de estado al instante t, notado $|\psi(t)\rangle$, se deduce del vector de estado $|\psi(t_0)\rangle$ por la fórmula:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t-t_0)|\psi(t_0)\rangle \quad \text{con} \quad \hat{U}(\tau) = e^{-i\hat{H}\tau/\hbar}$$

Muestre que $\hat{U}(\tau)$ es unitario, es decir $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$.

Solución

Dado que $\hat{H}$ no depende del tiempo, se tiene:

$$\frac{d}{dt}\hat{U}(t-t_0) = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U}(t-t_0)$$

Dado que $\hat{U}$ y $\hat{H}$ conmutan:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{U}(t-t_0) = \hat{U}(t-t_0)\hat{H}$$

Se deduce entonces que:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t-t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

es solución de la ecuación de Schrodinguer con la condición inicial correcta, pues $\hat{U}(0) = \mathbb{1}$. El hecho de que el operador de evolución temporal sea unitario es consecuencia de la hermiticidad del hamiltoniano:

$$\hat{U}(t-t_0)^\dagger = e^{i\hat{H}(t-t_0)/\hbar}$$

de forma que:

$$\hat{U}(t-t_0)^\dagger\hat{U}(t-t_0) = \mathbb{1}$$

y se sigue que $\hat{U}$ es unitario, $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$. Esto es consistente con la conservación de la norma:

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|\hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$$

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

De esta forma, una solución de la ecuación de Schrodinguer tiene norma 1 para todo t. Por último, notar que para un desplazamiento temporal diferencial dt:

$$|\psi(t_0+dt)\rangle = e^{-i\hat{H}dt/\hbar}|\psi(t_0)\rangle \approx \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}dt\hat{H}\right)|\psi(t_0)\rangle$$

$$\frac{i\hbar}{dt}\left(|\psi(t_0+dt)\rangle - |\psi(t_0)\rangle\right) = \hat{H}|\psi(t_0)\rangle$$

Se reconoce la ecuación de Schrodinguer al tomar $dt \to 0$.

Problema 2: Representación de Heisenberg

Considere un sistema cuántico aislado de hamiltoniano $\hat{H}$. Sea $|\psi(0)\rangle$ el estado del sistema al instante $t = 0$. Sea $a(t)$ el valor medio de las medidas de un observable $\hat{A}$ al instante t.
a) Exprese $a(t)$ en función de $|\psi(0)\rangle$, $\hat{A}$ y del operador de evolución $\hat{U}$ introducido en el problema anterior.
b) Muestre que $a(t)$ puede interpretarse como el valor medio de un operador $\hat{A}(t)_H$ en el estado $|\psi(0)\rangle$, y que $\hat{A}(t)_H$ satisface:

$$i\hbar \frac{d\hat{A}(t)_H}{dt} = [\hat{A}, \hat{H}](t)_H \quad \text{y} \quad \hat{A}(0) = \hat{A} \tag{1}$$

Esta es la representación de Heisenberg: el vector de estado es independiente del tiempo, y los operadores obedecen la ecuación de Heisenberg (1).

Solución

a) El valor medio del observable $\hat{A}$ en el estado $|\psi(t)\rangle$ es:

$$\langle a\rangle(t) = \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle$$

Utilizando el operador de evolución temporal, si $|\psi(0)\rangle$ es la función de onda en $t = 0$, entonces $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle$ y:

$$\langle a\rangle(t) = \langle\psi(0)|e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}\hat{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(0)\rangle$$

Notar que esto equivale a tomar el valor medio del operador $\hat{A}(t)_H = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}\hat{e}^{-i\hat{H}t/\hbar}$ en el estado $|\psi(0)\rangle$. Esto puede ser interpretado de la siguiente manera: el estado físico de una partícula es constante en el tiempo, mientras que los observables asociados a cantidades físicas son operadores que dependen del tiempo, y se relacionan con los observables en el cuadro de Schrodinguer mediante $\hat{A}(t)_H = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}e^{-i\hat{H}t/\hbar}$. Además:

$$\frac{d}{dt}\hat{A}(t)_H = \frac{i}{\hbar}\left(\hat{H}e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}e^{i\hat{H}t/\hbar} - e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}\hat{H}e^{-i\hat{H}t/\hbar}\right)$$

$$\frac{d}{dt}\hat{A}(t)_H = \frac{i}{\hbar}e^{i\hat{H}t/\hbar}\left(\hat{H}\hat{A} - \hat{A}\hat{H}\right)e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{A}(t)_H = [\hat{A}, \hat{H}](t)_H$$

Esta es la ecuación de Heisenberg para los operadores. En resumen:

1. Cuadro de Schrodinguer: el estado físico es un elemento $|\psi(t)\rangle$ de un espacio de Hilbert que evoluciona en el tiempo de acuerdo a $i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle$, o equivalentemente, $|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi(0)\rangle$. A toda cantidad física se le asocia un observable $\hat{A}$.

2. Cuadro de Heisenberg: el estado físico es un elemento constante en el tiempo $|\psi(0)\rangle$ de un espacio de Hilbert. A toda cantidad física se le asocia un observable $\hat{A}(t)$ que evoluciona en el tiempo según $i\hbar\frac{d}{dt}\hat{A}(t)_H = [\hat{A}, \hat{H}](t)_H$, equivalentemente $\hat{A}(t)_H = e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{A}e^{-i\hat{H}t/\hbar}$.

Problema 3:Ecuación de movimiento clásico para el oscilador armónico

Considere un oscilador armónico unidimensional de frecuencia w. En $t = 0$ la partícula se encuentra en un estado $|\psi(0)\rangle$ arbitrario. Utilizando el cuadro de Heisenberg, deduzca $\hat{x}(t)$, $\hat{p}(t)$ y encuentre las ecuaciones que satifacen el valor medio de la posición y del momentum como función del tiempo.

Solución

El hamiltoniano del oscilador armónico es:

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

En el cuadro de Heisenberg, los operadores posición y momentum satisfacen:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{x}(t)_H = [\hat{x}, \hat{H}](t)_H$$

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{p}(t)_H = [\hat{p}, \hat{H}](t)_H$$

pero

$$[\hat{x}, \hat{H}] = \frac{1}{2m}[\hat{x}, \hat{p}^2] = \frac{1}{2m}\left(\hat{p}[\hat{x}, \hat{p}] + [\hat{x}, \hat{p}]\hat{p}\right) = \frac{i\hbar}{m}\hat{p}$$

$$[\hat{p}, \hat{H}] = \frac{1}{2}mw^2[\hat{p}, \hat{x}^2] = -i\hbar mw^2\hat{x}$$

Se obtiene entonces:

$$\frac{d}{dt}\hat{x}(t)_H = \frac{1}{m}\hat{p}(t)_H$$

$$\frac{d}{dt}\hat{p}(t)_H = -mw^2\hat{x}(t)_H$$

Se ve que los operadores posición y momentum satisfacen ecuaciones análogas a las del movimiento clásico!. Por ejemplo, se tiene para el operador posición:

$$\frac{d^2}{dt^2}\hat{x}(t)_H + w^2\hat{x}(t)_H = 0$$

Finalmente, si en $t = 0$ el estado de la partícula es $|\psi(0)\rangle$, el valor medio de la posición y del momentum al instante t es:

$$\langle\hat{x}\rangle(t) = \langle\psi(0)|\hat{x}(t)_H|\psi(0)\rangle$$

y entonces:

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle(t) = \langle\psi(0)|\frac{d}{dt}\hat{x}(t)_H|\psi(0)\rangle$$

$$= \frac{1}{m}\langle\psi(0)|\hat{p}(t)_H|\psi(0)\rangle = \frac{1}{m}\langle p\rangle(t)$$

De igual modo :

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle(t) = \langle\psi(0)|\frac{d}{dt}\hat{p}(t)_H|\psi(0)\rangle$$

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle(t) = -mw^2\langle x\rangle(t)$$

Se reconoce el teorema de Ehrenfest para el caso particular del oscilador armónico:

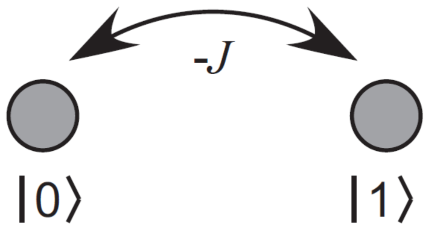
$$\frac{d}{dt}\langle\hat{x}\rangle(t) = \frac{1}{m}\langle p\rangle(t)$$

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{p}\rangle(t) = -mw^2\langle x\rangle(t)$$

Los valores medios de los observables posición y momentum satisfacen las ecuaciones de movimiento de la mecánica clásica.

Problema 4: Problema a dos sitios

Considere una partícula que puede ocupar únicamente 2 sitios del espacio, separados una distancia a. Se denotan respectivamente $|0\rangle$ y $|1\rangle$ los estados correspondientes a la partícula localizada sobre el sitio de la izquierda y sobre el sitio de la derecha.



El conjunto $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ forma una base ortonormal. Se supone que la partícula tiene la misma energía E_0 sobre cada uno de los dos sitios. La partícula puede igualmente saltar de un sitio a otro por efecto túnel, siendo $-J$ el elemento de matriz correspondiente. El hamiltoniano total de la partícula es entonces:

$$\hat{H} = E_0 \left(|0\rangle\langle 0| + |1\rangle\langle 1|\right) - J \left(|0\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 0|\right)$$

a) Escriba el hamiltoniano bajo la forma de una matriz 2×2 en la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$.
b) Calcule los estados propios y las energías propias correspondientes.
c) Se prepara la partícula en el estado $|0\rangle$ al instante inicial $t = 0$. Cuál es la probabilidad de encontrar a la partícula en el estado $|1\rangle$ al instante t?

Solución

a) A partir de la definición de los elementos de matriz de un operador, se obtiene la siguiente matriz para el hamiltoniano:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & -J \\ -J & E_0 \end{pmatrix}$$

b) Los autovalores se encuentran al resolver:

$$\det |H - \lambda \mathbb{1}| = 0$$

$$(E_0 - \lambda)^2 - J^2 = E_0^2 - J^2 - 2E_0\lambda + \lambda^2 = 0$$

Las soluciones son:

$$\lambda = \frac{2E_0 \pm \sqrt{4E_0^2 - 4E_0^2 + 4J^2}}{2} = E_0 \pm J$$

Es decir, los valores propios son $\lambda_1 = E_0 - J$ y $\lambda_2 = E_0 + J$. Para encontrar el vector propio asociado a λ_1 resolvemos:

$$(H - (E_0 - J))\,|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} J & -J \\ -J & J \end{pmatrix} |\psi_1\rangle = 0$$

Se obtiene:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|0\rangle + |1\rangle\right)$$

De forma análoga, para el vector propio asociado a $E_0 + J$:

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle - |1\rangle)$$

c) Descomponiendo el estado inicial $|\psi(0)\rangle = |0\rangle$ sobre la base de autoestados del hamiltoniano:

$$|\psi(0)\rangle = |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle)$$

Se deduce que el estado del sistema al instante t es:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(e^{-i(E_0-J)t/\hbar} |\psi_1\rangle + e^{-i(E_0+J)t/\hbar} |\psi_2\rangle \right)$$

La probabilidad de volver a encontrar al electrón en el sitio $|1\rangle$ al instante t será:

$$P_1(t) = |\langle 1|\psi(t)\rangle|^2 = \frac{1}{4} \left| e^{-i(E_0-J)t/\hbar} - e^{-i(E_0+J)t/\hbar} \right|^2 = \sin^2(Jt/\hbar)$$

$$P_1(t) = \frac{1}{2} (1 - \cos(2Jt/\hbar))$$

Se encuentra una oscilación periódica entre los estados localizados $|0\rangle$, $|1\rangle$ gracias al efecto túnel. La frecuencia de esta oscilación es $w = 2J/\hbar$

Problema 5: Cadena cerrada de 8 centros

Considere los estados de un electrón en una estructura formada por 8 átomos en los vértices de un octágono regular. Designamos $|\xi_n\rangle$, $n = 1, ..., 8$ los estados del electrón localizados respectivamente en la vecindad de los átomos $n = 1, ..., 8$. Estos estados se suponen ortogonales, $\langle\xi_n|\xi_m\rangle = \delta_{n,m}$. El hamiltoniano de este sistema está definido en la base $\{|\xi_n\rangle\}$, por $\hat{H} = -A\hat{W}$, donde $A > 0$, y $\hat{W}$ está definido por:

$$\hat{W}|\xi_n\rangle = (|\xi_{n+1}\rangle + |\xi_{n-1}\rangle)$$

donde se definen las condiciones cíclicas $|\xi_9\rangle = |\xi_1\rangle$ y $|\xi_0\rangle = |\xi_8\rangle$. Sean $|\varphi_k\rangle$ los estados propios de $\hat{H}$, y E_k, $k = 1, ..., 8$ los valores propios correspondientes.
Definimos el operador de traslación $\hat{R}$ por $\hat{R}|\xi_n\rangle = |\xi_{n+1}\rangle$.
a) Verificar que $\hat{R}^8 = \mathbb{1}$ y deducir los valores propios λ_k, $k = 1, .., 8$ de $\hat{R}$ (Son todos diferentes).
b) Escribiendo los vectorios propios de $\hat{R}$ bajo la forma $|\psi_k\rangle = \sum_{p=1}^{8} c_k^p|\xi_p\rangle$, escriba la relación de recurrencia para los coeficientes c_k^p y determine estos coeficientes normalizando $|\psi_k\rangle$.
c) Verifique que los vectores $|\psi_k\rangle$ forman una base ortonormal del espacio a 8 dimensiones considerado.
d) Verifique que estos mismos vectores $|\psi_k\rangle$ son vectores propios del operador $\hat{R}^{-1} = \hat{R}^\dagger$ definido por $R^{-1}|\xi_n\rangle = |\xi_{n-1}\rangle$ y calcule los valores propios correspondientes.
e) Exprese $\hat{W}$ en función de $\hat{R}$ y $\hat{R}^{-1}$. Deduzca los vectores propios $|\varphi_k\rangle$ de $\hat{H}$ y los niveles de energía correspondientes. Discuta la degeneración de los niveles.
f) Exprese los estados localizados $|\xi_n\rangle$, $n = 1, ..., 8$ en función de los estados propios de la energía $|\varphi_k\rangle$, $k = 1, ..,8$.
g) Al instante inicial $t = 0$ el electrón está localizado sobre el sitio $n = 1$, $|\psi(t = 0)\rangle = |\xi_1\rangle$. Calcule la probabilidad $p_1(t)$ de volver a encontrar al electrón sobre el sitio $n = 1$ a un instante posterior t, escriba $w = A/\hbar$.
h) Existen instantes t para los cuales $p(t) = 1$?. Explique por qué. La propagación de un electrón sobre la cadena es periódica?. Qué piensa de la generalización de este resultado a un número cualquiera de centros?

Solución

a) Imponiendo las condiciones de periodicidad de la cadena, se tiene

$$\forall n, \quad \hat{R}^8|\xi_n\rangle = |\xi_{n+8}\rangle = |\xi_n\rangle$$

Se deduce que $\hat{R}^8 = \mathbb{1}$. Si λ_k es un valor propio de $\hat{R}$ con vector propio $|\psi_k\rangle$, entonces:

$$\hat{R}^8|\psi_k\rangle = \lambda_k^8|\psi_k\rangle = |\psi_k\rangle$$

Se tiene de esta forma que los valores propios de $\hat{R}$ cumplen:

$$\lambda_k^8 = 1$$

Luego:

$$\lambda_k = e^{i\frac{2\pi}{8}k} = e^{i\frac{\pi}{4}k}, \quad k = 1, ..., 8$$

b) Escribiendo los vectores propios de $\hat{R}$ en la base $\{|\xi_n\rangle\}$, $|\psi_k\rangle = \sum_{n=1}^{8} c_k^n|\xi_n\rangle$, se tiene:

$$\hat{R}|\psi_k\rangle = e^{i\frac{\pi}{4}k}|\psi_k\rangle$$

pero:

$$\hat{R}|\psi_k\rangle = \hat{R}\left(\sum_{n=1}^{8} c_k^n|\xi_n\rangle\right) = \sum_{n=1}^{8} c_k^n \hat{R}|\xi_n\rangle$$

$$\hat{R}|\psi_k\rangle = \sum_{n=1}^{8} c_k^n|\xi_{n+1}\rangle = \sum_{n=1}^{8} c_k^{n-1}|\xi_n\rangle$$

Finalmente:

$$\sum_{n=1}^{8} c_k^{n-1}|\xi_n\rangle = e^{i\frac{\pi}{4}k}\sum_{n=1}^{8} c_k^n|\xi_n\rangle$$

Dado que $\{|\xi_n\rangle\}$ es base,

$$c_k^{n-1} = e^{i\frac{\pi}{4}k}c_k^n$$

Esto significa:

$$c_k^2 = e^{-i\frac{\pi}{4}k}c_k^1$$

$$c_k^3 = e^{-i2\frac{\pi}{4}k}c_k^1$$

En general:

$$c_k^n = e^{-i(n-1)\frac{\pi}{4}k}c_k^1 \quad n = 1, ..., 8$$

De esta forma, los vectores propios de $\hat{R}$ son de la forma:

$$|\psi_k\rangle = c_k^1\sum_{n=1}^{8} e^{-in\frac{\pi}{4}k}|\xi_n\rangle$$

Imponiendo la normalización $\|\psi_k\| = 1$:

$$\|\psi_k\|^2 = |c_k^1|^2\sum_{n=1}^{8} |e^{-in\frac{\pi}{4}k}|^2\,\|\xi_n\|^2 = 8|c_k^1|^2 = 1$$

Eligiendo $c_k^1 = \frac{1}{\sqrt{8}}e^{-i\frac{\pi}{4}k}$ (la elección de fase es arbitraria!), se tiene:

$$c_k^n = \frac{1}{\sqrt{8}}e^{-in\frac{\pi}{4}k} \quad k, n = 1, ..., 8$$

c) Los vectores propios de $\hat{R}$ normalizados tienen la forma:

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}}\sum_{n=1}^{8} e^{-in\frac{\pi}{4}k}|\xi_n\rangle$$

Se tiene entonces:

$$\langle\psi_{k'}|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}}\sum_{n'=1}^{8} e^{in'\frac{\pi}{4}k'}\langle\xi_{n'}|\left(\frac{1}{\sqrt{8}}\sum_{n=1}^{8} e^{-in\frac{\pi}{4}k}|\xi_n\rangle\right)$$

$$\langle\psi_{k'}|\psi_k\rangle = \frac{1}{8}\sum_{n=1}^{8}\sum_{n'=1}^{8} e^{i(n'k'-nk)\frac{\pi}{4}}\langle\xi_{n'}|\xi_n\rangle = \frac{1}{8}\sum_{n=1}^{8} e^{in(k'-k)\frac{\pi}{4}} = \delta_{k,k'}$$

Pues es claro que si $k = k'$, la sumatoria es igual a $1/8 \times 8 = 1$. Por otro lado, si $k \neq k'$, las fases $e^{in(k'-k)\frac{\pi}{4}}$, $n = 1, ..., 8$ son los vértices de un octágono regular centrado en el origen, siendo la suma de todas igual a este último. En conclusión, el conjunto de vectores propios $|\psi_k\rangle$ de $\hat{R}$ forma una base ortonormal.

d) Se tiene:

$$\hat{R}^{-1}|\psi_k\rangle = \hat{R}^{-1}\left(\frac{1}{\sqrt{8}}\sum_{n=1}^{8} e^{-in\frac{\pi}{4}k}|\xi_n\rangle\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{8}}\sum_{n=1}^{8} e^{-in\frac{\pi}{4}k}\hat{R}^{-1}|\xi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}}\sum_{n=1}^{8} e^{-in\frac{\pi}{4}k}|\xi_{n-1}\rangle$$

$$\hat{R}^{-1}|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}}\sum_{n=1}^{8} e^{-i(n+1)\frac{\pi}{4}k}|\xi_n\rangle = e^{-i\frac{\pi}{4}k}|\psi_k\rangle$$

Luego, $|\psi_k\rangle$ es también vector propio de $\hat{R}^{-1}$, con autovalor λ_k^*.

e) Dado que el Hamiltoniano se escribe $\hat{H} = -A\hat{W} = -A\left(\hat{R} + \hat{R}^{-1}\right)$, es claro que $|\psi_k\rangle$ es vector propio de $\hat{H}$ con autovalor:

$$E_k = -A\left(\lambda_k + \lambda_k^*\right) = -2A\cos\left(k\frac{\pi}{4}\right), \quad k = 1, ..., 8$$

El estado fundamental se obtiene para $k = 8$, $E_8 = -2A$. Se tiene además:

$$E_1 = E_7 = -A\sqrt{2}$$
$$E_2 = E_6 = 0$$
$$E_3 = E_5 = A\sqrt{2}$$
$$E_4 = 2A$$

f) Dado que $\{|\varphi_k\rangle\}$ forma una base hilbertiana, se tiene:

$$|\xi_n\rangle = \sum_{k=1}^{8}|\varphi_k\rangle\langle\varphi_k|\xi_n\rangle = \sum_{k=1}^{8}(c_k^n)^*|\varphi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}}\sum_{k=1}^{8} e^{ikn\frac{\pi}{4}}|\varphi_k\rangle$$

g) Suponiendo que

$$|\psi(t=0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}}\sum_{k=1}^{8} e^{ik\frac{\pi}{4}}|\varphi_k\rangle = |\xi_1\rangle$$

En un instante posterior t se tendrá:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}}\sum_{k=1}^{8} e^{i(k\frac{\pi}{4} - E_k t/\hbar)}|\varphi_k\rangle$$

La probabilidad de encontrar al electrón en el sitio 1 al instante t es:

$$p_1(t) = |\langle \xi_1 | \psi(t) \rangle|^2 = \left| \frac{1}{8} \sum_{k=1}^{8} e^{-iE_k t/\hbar} \right|^2$$

Utilizando los valores encontrados para E_k, y definiendo $w = A/\hbar$:

$$p_1(t) = \left| \frac{1}{8} \left(2e^{\sqrt{2}wt} + 2 + 2e^{-\sqrt{2}wt} + e^{-2wt} + e^{2wt} \right) \right|^2 = \left| \frac{1}{4} \left(1 + 2\cos(wt\sqrt{2}) + \cos(wt) \right) \right|^2$$

h) Se tiene evidentemente $p_1(0) = 1$. Para obtener $p_1(t) = 1$ en un instante posterior se debe encontrar $t \neq 0$ tal que:

$$\cos(wt\sqrt{2}) = 1 \qquad \cos(2wt) = 1$$

Esto significa $wt\sqrt{2} = 2N\pi$ y $2wt = 2N'\pi$ donde N, N' son enteros. Tomando el cuociente entre estas dos expresiones, encontramos:

$$\sqrt{2} = \frac{N'}{N}$$

Es decir, $\sqrt{2}$ tendría que ser racional! En consecuencia, la partícula no se encuentra jamás sobre el sitio 1 con probabilidad 1. La evolución del sistema no es periódica. De forma análoga se pueden resolver problemas de n sitios con $n \neq 8$, en particular, cuando se tienen 2, 4 y 6 sitios, los niveles de energía tienen cuocientes racionales y la evolución es periódica. Más allá de $n = 6$ centros, la evolución nunca será periódica.

Problema 6: Fórmula de Glauber

Si dos operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ no conmutan, no existe relación simple entre $e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}$ y $e^{\hat{A}+\hat{B}}$. Suponga aquí que $\hat{A}$ y $\hat{B}$ conmutan con su conmutador $[\hat{A},\hat{B}]$. Muestre la fórmula de Glauber:

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}}e^{[\hat{A},\hat{B}]/2}$$

Para ello, introduzca el operador $\hat{F}(t) = e^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}}$, donde t es una variable sin dimensión, y establezca la ecuación diferencial:

$$\frac{dF}{dt} = \left(\hat{A}+\hat{B}+t[\hat{A},\hat{B}]\right)\hat{F}(t)$$

y luego integre la ecuación entre $t=0$ y $t=1$. Utilize además el resultado $[\hat{B},\hat{A}^n] = \sum_{k=0}^{n-1}\hat{A}^k[\hat{B},\hat{A}]\hat{A}^{n-k-1}$

Solución

Se tiene:

$$\frac{d}{dt}\hat{F} = \left(\frac{d}{dt}e^{t\hat{A}}\right)e^{t\hat{B}} + e^{\hat{A}}\left(\frac{d}{dt}e^{t\hat{B}}\right)$$

$$\frac{d}{dt}\hat{F} = \hat{A}e^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}} + e^{\hat{A}t}\hat{B}e^{t\hat{B}}$$

El segundo término de la derecha se puede reescribir como:

$$e^{\hat{A}t}\hat{B}e^{t\hat{B}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}\hat{A}^n\hat{B}e^{t\hat{B}}$$

Pero $\hat{A}^n\hat{B} = [\hat{A}^n,\hat{B}] + \hat{B}\hat{A}^n$, luego:

$$e^{\hat{A}t}\hat{B}e^{t\hat{B}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}[\hat{A}^n,\hat{B}]e^{t\hat{B}} + Be^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}}$$

y ahora utilizamos el siguiente resultado:

$$[\hat{A}^n,\hat{B}] = \sum_{k=0}^{n-1}\hat{A}^k[\hat{A},\hat{B}]\hat{A}^{n-k-1}$$

y como $\hat{A}$ conmuta con $[\hat{A},\hat{B}]$:

$$[\hat{A}^n,\hat{B}] = \sum_{k=0}^{n-1}[\hat{A},\hat{B}]\hat{A}^k\hat{A}^{n-k-1} = n[\hat{A},\hat{B}]A^{n-1} = n\hat{A}^{n-1}[\hat{A},\hat{B}]$$

Usando esto:

$$e^{\hat{A}t}\hat{B}e^{t\hat{B}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{t^n}{n!}nA^{n-1}[\hat{A},\hat{B}]e^{t\hat{B}} + Be^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}} = t\sum_{n=1}^{\infty}\frac{t^{n-1}}{(n-1)!}A^{n-1}[\hat{A},\hat{B}]e^{t\hat{B}} + Be^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}}$$

$$e^{\hat{A}t}\hat{B}e^{t\hat{B}} = te^{t\hat{A}}[\hat{A},\hat{B}]e^{tB} + Be^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}}$$

De esta manera:

$$\frac{d}{dt}\hat{F} = \hat{A}e^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}} + t[\hat{A},\hat{B}]e^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}} + Be^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}}$$

$$\frac{d}{dt}\hat{F} = \left(\hat{A} + \hat{B} + t[\hat{A}, \hat{B}]\right)\hat{F}$$

La solución es:

$$\hat{F}(t) = e^{t(\hat{A}+\hat{B}) + \frac{t^2}{2}[\hat{A}, \hat{B}]}$$

Tomando $t = 1$, se obtiene la fórmula de Glauber:

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}+\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}$$

En el caso particular $\hat{A} = \hat{x}$, $\hat{B} = \hat{p}$:

$$e^{\hat{x}}e^{\hat{p}} = e^{\hat{x}+\hat{p}}e^{i\hbar/2}$$

Problema 7: Oscilador con fuerza constante en el cuadro de Heinsenberg

Use el cuadro de Heisenberg para encontrar los valores de expectación para $\hat{p}$ y $\hat{x}$ de una partícula bajo la influencia de un oscilador armónico y de una fuerza constante F. Asuma que el estado del sistema es el ground state del oscilador armónico simple sin la fuerza F.

Solución

El hamiltoniano es:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}k\hat{x}^2 - F\hat{x}$$

Si $\hat{x}(t)_H$ y $\hat{p}(t)_H$ son los operadores en el cuadro de Heinsenberg, se tiene:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\hat{x}(t)_H = [\hat{x}, \hat{H}](t)_H = \frac{1}{2m}[\hat{x}, \hat{p}^2](t)_H$$

pero

$$[\hat{x}, \hat{p}^2] = [\hat{x}, \hat{p}]\hat{p} + \hat{p}[\hat{x}, \hat{p}] = 2i\hbar\hat{p}$$

Luego:

$$\frac{d}{dt}\hat{x}(t)_H = \frac{1}{m}\hat{p}(t)_H \tag{2}$$

Del mismo modo, tenemos:

$$i\hbar\frac{d\hat{p}(t)_H}{dt} = [\hat{p}, \hat{H}](t)_H$$

y:

$$[\hat{p}, \hat{H}] = \frac{1}{2}k[\hat{p}, \hat{x}^2] - F[\hat{p}, \hat{x}]$$

$$[\hat{p}, \hat{H}] = -i\hbar k\hat{x} + i\hbar F\mathbb{1}$$

Es decir:

$$\frac{d}{dt}\hat{p}(t)_H = -k\hat{x}(t)_H + F \tag{3}$$

El estado en el cuadro de Heisenberg es $|0\rangle$ (el ground state del oscilador armónico en $t = 0$ en el cuadro de Shrodinger). En términos de los operadores de creación y aniquilación, tenemos:

$$\hat{x}(t)_H = \sqrt{\frac{\hbar}{2mw}}\left(\hat{a}^\dagger(t)_H + \hat{a}(t)_H\right)$$

$$\hat{p}(t)_H = i\sqrt{\frac{mw\hbar}{2}}\left(\hat{a}^\dagger(t)_H - \hat{a}(t)_H\right)$$

o bien:

$$\hat{a}(t)_H = \sqrt{\frac{mw}{2\hbar}}\left(\hat{x}(t)_H + \frac{i\hat{p}(t)_H}{mw}\right)$$

$$\hat{a}^\dagger(t)_H = \sqrt{\frac{mw}{2\hbar}}\left(\hat{x}(t)_H - \frac{i\hat{p}(t)_H}{mw}\right)$$

La ecuación de movimiento para el operador de aniquilación en el cuadro de Heinsenberg es, usando (2) y (3):

$$\frac{d}{dt}\hat{a}(t)_H = \sqrt{\frac{mw}{2\hbar}}\left(\frac{1}{m}\hat{p}(t)_H - \frac{ik}{mw}\hat{x}(t)_H + \frac{i}{mw}F\right)$$

y $w = \sqrt{k/m}$

$$\frac{d}{dt}\hat{a}(t)_H = -iw\sqrt{\frac{mw}{2\hbar}}\left(\frac{i}{wm}\hat{p}(t)_H + \hat{x}(t)_H\right) + i\sqrt{\frac{1}{2\hbar mw}}F$$

$$\frac{d}{dt}\hat{a}(t)_H = -iw\hat{a}(t)_H + iF\sqrt{\frac{1}{2m\hbar w}}$$

De aquí se obtiene lo siguiente:

$$\frac{d}{dt}\hat{a}(t)_H + iw\hat{a}(t)_H = iF\sqrt{\frac{1}{2m\hbar w}}$$

$$\frac{d}{dt}\hat{a}(t)_H e^{iwt} + iw\hat{a}(t)_H e^{iwt} = iF\sqrt{\frac{1}{2m\hbar w}}e^{iwt}$$

$$\frac{d}{dt}\left(\hat{a}(t)_H e^{iwt}\right) = iF\sqrt{\frac{1}{2m\hbar w}}e^{iwt}$$

Finalmente, integrando :

$$\hat{a}(t)_H e^{iwt} - \hat{a}(0)_H = F\sqrt{\frac{1}{2m\hbar w}}\int_0^t dt\; e^{iwt} = F\sqrt{\frac{1}{2m\hbar w^3}}\left(e^{iwt} - 1\right)$$

$$\hat{a}(t)_H = \hat{a}(0)_H e^{-iwt} + F\sqrt{\frac{1}{2m\hbar w^3}}\left(1 - e^{-iwt}\right)$$

De igual forma:

$$\hat{a}^\dagger(t)_H = \hat{a}^\dagger(0)_H e^{iwt} + F\sqrt{\frac{1}{2m\hbar w^3}}\left(1 - e^{iwt}\right)$$

Usando que:

$$\langle 0|\hat{a}(0)|0\rangle = \langle 0|\hat{a}^\dagger(0)|0\rangle = 0$$

encontramos:

$$\langle \hat{x}\rangle_t = \langle 0|\hat{x}(t)_H|0\rangle = 0$$

y

$$\langle \hat{p}\rangle_t = \langle 0|\hat{p}(t)_H|0\rangle = \frac{F}{w}\left(1 - \cos wt\right)$$