Mecánica Cuántica I
DF - FCEx - UNLP
2do semestre 2023

PROF: Pablo Pisani
JTP: Lucas Manzo
AD: Tomás Vignau

Práctica 1

Los ejercicios marcados con asterisco (*) son opcionales.

1.1 Operadores - relaciones de conmutación 1

1.2 Notación de Dirac 2

1.3 Observables y medidas 3

1.4 Estados de espín y matrices de Pauli 4

1.5 Traslación espacial y evolución temporal 5

1.1 Operadores - relaciones de conmutación

1. Probar que para operadores $\hat{A}, \hat{B}$ y $\hat{C}$ cualesquiera, las siguientes identidades son válidas:

   a. $[\hat{A}, \hat{B}] = -[\hat{B}, \hat{A}]$,
   b. $[\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{C}] + [\hat{B}, \hat{C}]$,
   c. $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$.
   d.* ¿Qué relación encuentra entre los conmutadores y las derivadas?

2. Probar que para operadores $\hat{A}, \hat{B}$ y $\hat{C}$ cualesquiera, las siguientes identidades son válidas:

   a. $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \{\hat{B}, \hat{A}\}$,
   b. $\{\hat{A} + \hat{B}, \hat{C}\} = \{\hat{A}, \hat{C}\} + \{\hat{B}, \hat{C}\}$,
   c. $\{\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\} = \{\hat{A}, \hat{B}\}\hat{C} - \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}\{\hat{A}, \hat{C}\}$.
   d. $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = \{\hat{A}, \hat{B}\}\hat{C} - \hat{B}\{\hat{A}, \hat{C}\}$.

3. Supóngase que los operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ conmutan con su conmutador, es decir $[\hat{A}, [\hat{A}, \hat{B}]] = [\hat{B}, [\hat{A}, \hat{B}]] = 0$. Mostrar que:

   a. $[\hat{A}, \hat{B}^n] = n\hat{B}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}]$,

b. $[\hat{A}^n, \hat{B}] = n\hat{A}^{n-1}[\hat{A}, \hat{B}]$,

c. para cualquier función analítica $f(x)$ –es decir, desarrollable en serie de Taylor– se cumple la identidad $[\hat{A}, f(\hat{B})] = f'(\hat{B})[\hat{A}, \hat{B}]$, en donde $f'(x)$ denota la derivada de $f(x)$ respecto a su argumento,

d. $e^{t\hat{A}}e^{t\hat{B}} = e^{t(\hat{A}+\hat{B})}e^{t^2[\hat{A},\hat{B}]/2} \quad \forall t \in \mathbb{R}$.
Sugerencia: derivar tanto el lado izquierdo como el lado derecho respecto de t para probar que ambas cantidades satisfacen la misma ecuación diferencial con la misma condición inicial en $t = 0$. Luego, por el teorema de unicidad de la solución de las ecuaciones diferenciales, concluya que ambas cantidades son idénticas.

4. A partir de una función de prueba y de las identificaciones $(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3) \equiv (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$, $(\hat{p}_1, \hat{p}_2, \hat{p}_3) \equiv -i\hbar(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \frac{\partial}{\partial x_3}) \equiv -i\hbar(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$, mostrar:

   a. $[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0$,
   b. $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$,
   c. $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\,\delta_{ij}$.

5. Probar $e^{i\alpha\hat{x}}e^{i\beta\hat{p}_x} = e^{i\beta\hat{p}_x}e^{i\alpha\hat{x}}e^{-i\alpha\beta\hbar} \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}$. ¿Para qué valores de α y β resulta $[e^{i\alpha\hat{x}}, e^{i\beta\hat{p}_x}] = 0$? ¿Y para cuáles resulta $\{e^{i\alpha\hat{x}}, e^{i\beta\hat{p}_x}\} = 0$?

1.2 Notación de Dirac

6. Si los estados $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ forman una base ortonormal y el operador $\hat{G}$ cumple las siguientes propiedades:

$$\begin{aligned}
\hat{G}|1\rangle &= 3|1\rangle - 4|2\rangle + 7|3\rangle, \\
\hat{G}|2\rangle &= -5|1\rangle + |3\rangle, \\
\hat{G}|3\rangle &= 11|1\rangle + 6|2\rangle,
\end{aligned}$$

¿cuál es la representación matricial de $\hat{G}$ en esta base?

7. Si los estados $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ forman una base ortonormal y el operador $\hat{K}$ cumple las siguientes propiedades:

$$\begin{aligned}
\hat{K}|1\rangle &= 2|1\rangle, \\
\hat{K}|2\rangle &= 3|2\rangle, \\
\hat{K}|3\rangle &= -6|3\rangle,
\end{aligned}$$

   a. encontrar una expresión para $\hat{K}$ en términos de sus autovalores y autovectores (representación “ket-bra” de operadores).

   b. Dado el estado $|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{83}}\big(-3|1\rangle + 5|2\rangle + 7|3\rangle\big)$, calcular el valor de expectación $\langle K\rangle_\alpha \equiv \langle\alpha|\hat{K}|\alpha\rangle$.

8. Dado un sistema de dos estados ortonormales $\{|1\rangle, |2\rangle\}$, considerar el operador

$$\hat{H} = a\Big(|1\rangle\langle 1| - |2\rangle\langle 2| + |1\rangle\langle 2| + |2\rangle\langle 1|\Big) \ , \quad a \in \mathbb{R} \ .$$

Encontrar los autovalores y autovectores correspondientes.

9.* Sean $\{|\alpha^{(k)}\rangle\}$ y $\{|\beta^{(k)}\rangle\}$ dos bases completas y ortonormales del mismo espacio de Hilbert.

a. Verificar que la matriz de cambio de base es $S = \sum_k |\beta^{(k)}\rangle\langle\alpha^{(k)}|$.

b. Probar que S es un operador unitario, es decir, que satisface la relación $S^\dagger S = SS^\dagger = 1$ donde $S^\dagger = \sum_k |\alpha^{(k)}\rangle\langle\beta^{(k)}|$.

c. Hallar los elementos de matriz de S en la base $\{|\alpha^{(k)}\rangle\}$ (es decir $S^{(\alpha)}_{ij} = \langle\alpha^{(i)}|S|\alpha^{(j)}\rangle$) y en la base $\{|\beta^{(k)}\rangle\}$ (es decir $S^{(\beta)}_{ij} = \langle\beta^{(i)}|S|\beta^{(j)}\rangle$). Verificar que son iguales, por lo que puede simplemente llamarse $S^{(\alpha)}_{ij} = S^{(\beta)}_{ij} \equiv S_{ij}$.

d. Repetir el inciso anterior con los elementos de matriz de $S^\dagger$.

e. Dado un estado arbitrario $|\psi\rangle$ cuyos coeficientes $\psi^{(\alpha)}_i \equiv \langle\alpha^{(i)}|\psi\rangle$ en la base $\{|\alpha^{(k)}\rangle\}$ son conocidos, probar que los coeficientes $\psi^{(\beta)}_i \equiv \langle\beta^{(i)}|\psi\rangle$ en la base $\{|\beta^{(k)}\rangle\}$ están dados por $\psi^{(\beta)}_i = \sum_j S^\dagger_{ij}\psi^{(\alpha)}_j$.

1.3 Observables y medidas

10. Volver a considerar el operador $\hat{K}$ y el estado $|\alpha\rangle$ del problema 7.

a. ¿Cuáles son los posibles resultados experimentales asociados al observable $\hat{K}$?

b. ¿Cuál es la probabilidad asociada a cada posible valor experimental cuando las partículas se encuentran en el estado $|\alpha\rangle$?

11. Probar que:

a. los autovalores de un operador hermítico son reales;

b. las autofunciones de un operador hermítico correspondientes a autovalores distintos son ortogonales.

c. ¿Cómo se vincula el resultado (11.a) con el hecho de que los operadores asociados a observables físicos son siempre hermíticos? ¿Es esta una condición necesaria o una condición suficiente?

12. Sea un sistema de tres estados con dos observables $\hat{A}$ y $\hat{B}$ tales que

$$\hat{A} = a\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \ , \qquad \hat{B} = b\begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 5 \end{pmatrix} \ .$$

a. Supóngase que primero se mide el observable $\hat{A}$ y se obtiene $2a$. Si se mide $\hat{B}$ inmediatamente después, ¿qué posibles valores del observable $\hat{B}$ se pueden obtener?

b. Supóngase que primero se mide el observable $\hat{A}$ y se obtiene $3a$. Si se mide $\hat{B}$ inmediatamente después, ¿qué posibles valores del observable $\hat{B}$ se pueden obtener?

c. Supóngase que primero se mide el observable $\hat{B}$ y se obtiene $4b$. Si se mide $\hat{A}$ inmediatamente después, ¿qué posibles valores del observable $\hat{A}$ se pueden obtener?

d. Supóngase que primero se mide el observable $\hat{A}$ y se obtiene $5b$. Si se mide $\hat{A}$ inmediatamente después, ¿qué posibles valores del observable $\hat{A}$ se pueden obtener?

1.4 Estados de espín y matrices de Pauli

13. Considerar las matrices hermíticas de 2×2 de traza nula

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \, , \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \, , \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \, ,$$

denominadas *matrices de Pauli.*

a. Probar $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \, \epsilon_{ijk} \, \sigma_k$.

b. Probar $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij} \, \mathbb{I}_2$.

c. Dados los *estados de espín*

$$|+\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \, , \qquad |-\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \, ,$$

verificar la acción de cada matriz de Pauli sobre ellos.

d. Escribir a las matrices de Pauli en la representación “ket-bra” en términos de los estados $|+\rangle$ y $|-\rangle$.

e. Dado el vector unitario $\mathbf{n} = (\cos\phi \sin\theta, \sin\phi \sin\theta, \cos\theta)$, determinar la representación matricial de $\sigma_n \equiv \mathbf{n} \cdot \sigma = \mathbf{n_i} \sigma_\mathbf{i}$.

14. Considerar una matriz hermítica arbitraria de 2×2:

$$X = \begin{pmatrix} a & c - id \\ c + id & b \end{pmatrix} \, , \qquad a, b, c, d \in \mathbb{R} \, .$$

a. Calcular las cuatro trazas $x_\mu = \mathrm{tr}(\sigma_\mu X)$, con $\mu = 0, 1, 2, 3$ y $\sigma_0 \equiv \mathbb{I}_2$.

b. Probar que $X = \frac{1}{2} \sum_\mu x_\mu \sigma_\mu$.

c. Mostrar que el intervalo relativista s^2, definido como $s^2 \equiv x_0^2 - x_1^2 - x_2^2 - x_3^2$, puede ser escrito como $s^2 = 4 \, \mathrm{det} X$.

d. Usar estos resultados para establecer un isomorfismo entre los vectores del tetra-espacio de Minkowski y las matrices hermíticas de 2×2.

15. Un chorro no polarizado de partículas de espín 1/2 pasa a través de una serie de experimentos de Stern-Gerlach que lo filtran de la siguiente manera:

- El primero descarta $s_n = -\hbar/2$.
- El segundo descarta $s_z = -\hbar/2$.
- El tercero descarta $s_n = +\hbar/2$.

Aquí $\mathbf{n}$ es un vector unitario en el plano $x - z$ que forma un ángulo θ con el eje z.

a. ¿Qué fracción del chorro inicial se mide luego del tercer filtro?

b. ¿Para qué valor de θ es máxima dicha intensidad?

1.5 Traslación espacial y evolución temporal

16. a. Mediante la identificación $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$, probar que para cualquier función analítica $\phi(x)$ vale

$$\phi(x+a) = e^{ia\hat{p}/\hbar}\phi(x) \qquad \forall a \in \mathbb{R} .$$

Es decir, $\hat{p}$ es el generador de traslaciones espaciales y $\hat{T}(a) = e^{ia\hat{p}/\hbar}$ es el operador de traslaciones espaciales.

b. Probar

$$e^{ia\hat{p}/\hbar}\,\hat{x}\,e^{-ia\hat{p}/\hbar} = \hat{x} + a .$$

17. a. Mostrar que si ψ_0 es solución de la ecuación de autovalores $\hat{H}\psi_0 = E\psi_0$, entonces $\psi(t) \equiv e^{-itE/\hbar}\psi_0$ es solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

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

b. Probar que, en dicho caso, $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi_0|\psi_0\rangle$.

18. a. Expandiendo en serie de Taylor, probar que si $\psi(t)$ es solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con hamiltoniano independiente del tiempo, entonces

$$\psi(t+\tau) = e^{-i\tau\hat{H}/\hbar}\psi(t) .$$

Es decir, $\hat{H}$ es el generador de evoluciones temporales y $\hat{U}(\tau) = e^{-i\tau\hat{H}/\hbar}$ es el operador de evolución temporal.

b. Sea $\psi(t)$ autoestado del operador $\hat{A}(t)$ con autovalor $a = $ cte. Probar que $\psi(t+\tau)$ es autoestado de $e^{-i\tau\hat{H}/\hbar}\,\hat{A}(t)\,e^{i\tau\hat{H}/\hbar}$ con el mismo autovalor.

19. Considerar un sistema de tres estados, cuyo hamiltoniano en una dada base está dado por la matriz

$$\hat{H} = E_0 \begin{pmatrix} 30 & 0 & 0 \\ 0 & 66 & 12 \\ 0 & 12 & 59 \end{pmatrix} , \quad E_0 \in \mathbb{R} .$$

a. Hallar las energías y los respectivos estados estacionarios.

b. Determinar la matriz de evolución temporal $\hat{U}(t) = e^{-it\hat{H}/\hbar}$.

c. Suponer que el sistema se encuentra en el estado $\psi_0 = (0, 1, 0)^T$ en el instante $t = 0$, con $a, b, c \in \mathbb{C}$. ¿En qué estado se encontrará el sistema en un instante $t > 0$ arbitrario? ¿Para qué instantes es este resultado proporcional a ψ_0?

20. Siguiendo los siguientes pasos, estudiar la evolución temporal de un electrón (sistema de dos estados) en presencia del campo magnético terrestre. Suponer que su estado inicial a tiempo $t = 0$ corresponde a $s_x = +\hbar/2$, y que el campo magnético terrestre es $\mathbf{B} = (0, B, 0)$.

a. Escribir el estado inicial.

b. Escribir el hamiltoniano del sistema $\hat{H} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B}$ donde $\boldsymbol{\mu} = g\frac{e}{2m}\boldsymbol{S}$ es el momento magnético del electrón (el factor de Landé es $g \approx 2$).

c. Determinar el estado del sistema a tiempo $t > 0$.

d. Determinar el valor de expectación del espín $\langle \boldsymbol{S} \rangle$ a tiempo $t > 0$.

e. ¿Cuál es la magnitud de la frecuencia de precesión de este valor de expectación? ¿Cuál es su orden de magnitud? Usar $B \sim 10^{-4}T$.

f. Comparar con el resultado clásico, según el cual el torque ejercido sobre el electrón es $\frac{d\boldsymbol{S}}{dt} = \boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\mu} \times \boldsymbol{B}$.