Práctica 2

Los ejercicios marcados con asterisco (*) son opcionales.

2.1 Principio de incerteza **1**

2.2 Esquemas de Schrödinger y Heisenberg **3**

2.3 Teorema de Ehrenfest **4**

2.4 Simetrías y leyes de conservación **4**

2.1 Principio de incerteza

21. Sean $\hat{A}$ y $\hat{B}$ dos observables cualesquiera, y sean $(\Delta A)^2 = \left\langle \left(\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle\right)^2 \right\rangle$, $(\Delta B)^2 = \left\langle \left(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle\right)^2 \right\rangle$ sus incertezas cuadráticas calculadas respecto de un estado (normalizado) completamente arbitrario.

    a. Probar $(\Delta A)^2 = \langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2$ y $(\Delta B)^2 = \langle \hat{B}^2 \rangle - \langle \hat{B} \rangle^2$.

    b. Usando la desigualdad de Cauchy-Schwarz, probar $(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq |z|^2$ donde $z = \left\langle (\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle)(\hat{B} - \langle \hat{B} \rangle) \right\rangle \in \mathbb{C}$.

    c. Probar $z = \langle \hat{A}\hat{B} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle$ y $z^* = \langle \hat{B}\hat{A} \rangle - \langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle$, donde z^* denota el complejo conjugado de z.

    d. Probar

    $$\Big(\mathrm{Re}(z)\Big)^2 = \left(\frac{z + z^*}{2}\right)^2 = \left(\frac{\langle \{\hat{A}, \hat{B}\} \rangle - 2\langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle}{2}\right)^2 \geq 0 \; .$$

    e. Probar

    $$\Big(\mathrm{Im}(z)\Big)^2 = \left(\frac{z - z^*}{2i}\right)^2 = \left(\frac{\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle}{2i}\right)^2 \geq 0 \; .$$

    f. Concluir que debe satisfacerse

    $$(\Delta A)^2 (\Delta B)^2 \geq \left(\frac{\langle \{\hat{A}, \hat{B}\} \rangle - 2\langle \hat{A} \rangle \langle \hat{B} \rangle}{2}\right)^2 + \left(\frac{\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle}{2i}\right)^2 .$$

    Esta desigualdad se conoce como *relación de incerteza de Schrödinger*.

g. A partir de la expresión anterior, probar como corolario la relación

$$\Delta A\,\Delta B \geq \frac{1}{2}\big|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\big|\ .$$

Esta desigualdad se conoce como *relación de incerteza de Robertson*. Mostrar que, en particular, $\Delta x\,\Delta p \geq \hbar/2$.

22. Considerar un estado cuya función de onda normalizada es una gaussiana:

$$\Psi(x) = N(\sigma_x)\,e^{-x^2/4\sigma_x^2}\ ,$$

donde $\sigma_x > 0$ es el ancho de probabilidad de la gaussiana y $N(\sigma_x)$ una constante de normalización.

a. Determinar $N(\sigma_x)$.

b. Probar que para dicho estado, la función de onda $\widetilde{\Psi}(p)$ en la base de momentos es también una gaussiana, con $\widetilde{\Psi}(p)$ dada por la transformada de Fourier

$$\widetilde{\Psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\,e^{-ipx/\hbar}\Psi(x)\ . \tag{1}$$

Determinar su ancho de probabilidad σ_p como función de σ_x.

c. Probar que las incertezas son $\Delta x = \sigma_x$ y $\Delta p = \sigma_p$. Verificar que un estado gaussiano satura la cota del principio de incerteza (es decir, verificar $\Delta x\,\Delta p = \hbar/2$).

23. Considerar una partícula de espín 1/2 que se encuentra en un estado arbitrario de la forma $|\Psi\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle$, con $|a|^2 + |b|^2 = 1$.

a. Calcular $\langle \boldsymbol{S}\rangle = (\langle S_x\rangle\,,\,\langle S_y\rangle\,,\,\langle S_z\rangle)$.

b. Calcular el producto $\Delta S_x\,\Delta S_y$ y verificar el principio de incerteza.

c. Verificar que el estado con $a = 1/\sqrt{2}$ y $b = (1+i)/2$ no satura la cota del principio de incerteza. ¿Para qué valores del par (a, b) sí se satura la cota?

24.* Sea $\Psi(x)$ la función de onda de un dado estado, y sea $\widetilde{\Psi}(p)$ su transformada de Fourier dada por la ecuación (1). Se define la *entropía de Shannon en la base de posición* como

$$S = -\int_{-\infty}^{\infty} dx\,|\Psi(x)|^2\,\ln\Big(a\,|\Psi(x)|^2\Big)\ ,$$

donde $a > 0$ es una constante arbitraria con unidades de longitud. Similarmente, se define la *entropía de Shannon en la base de momentos* como

$$\widetilde{S} = -\int_{-\infty}^{\infty} dp\,|\widetilde{\Psi}(p)|^2\,\ln\Big(b\,|\widetilde{\Psi}(p)|^2\Big)\ ,$$

donde $b > 0$ es una constante arbitraria con unidades de momento. A partir de estas expresiones, puede probarse la *relación de incerteza entrópica*:

$$S + \widetilde{S} \geq \ln\left(\pi e \, \frac{\hbar}{ab}\right) .$$

Esta expresión es una manifestación del principio de incerteza de Heisenberg en términos de entropías. Es una expresión fundamental en teoría de la información y es ampliamente usada en la actualidad.

a. Calcular las entropías de Shannon S y $\widetilde{S}$ para el caso particular del estado gaussiano del problema 22.

b. Verificar que dicho estado gaussiano satura la cota de la relación de incerteza entrópica.

2.2 Esquemas de Schrödinger y Heisenberg

25. a. Dado un hamiltoniano $\hat{H}$ que en general puede depender del tiempo, probar que el operador de evolución está dado por $\hat{U}(t, t_0) = \exp(-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^{t} dt \, \hat{H})$.

    b. Probar que el hamiltoniano $\hat{H}$ coincide tanto en el esquema de Schrödinger como en el de Heisenberg.

    c. Dados dos estados $|\Psi\rangle$ y $|\Phi\rangle$ cualesquiera y un observable arbitrario $\hat{A}$, probar que $\langle\Phi|\hat{A}|\Psi\rangle$ coincide tanto en el esquema de Schrödinger como en el de Heisenberg.

    En particular, tomando $|\Psi\rangle = |\Phi\rangle$, esta última relación implica que $\langle\hat{A}\rangle$ coincide en ambos esquemas para todo observable $\hat{A}$.

26. a. Probar que la ecuación de Schrödinger implica la ecuación de Heisenberg.

    b. Probar que la ecuación de Heisenberg implica la ecuación de Schrödinger.

27. Considerar un sistema de dos estados y un hamiltoniano que, en alguna dada base, toma la forma $\hat{H} = E_0 \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$. Considerar además un observable $\hat{O}$ que, en la misma base anterior y en el esquema de Schrödinger a tiempo t_0, toma la forma $\hat{O}_S = \alpha \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$. Tanto E_0 como α son constantes reales arbitrarias.

    a. Determinar el operador de evolución $\hat{U}(t, t_0)$.

    b. Determinar $\hat{O}_H$, es decir, al observable $\hat{O}$ en la representación de Heisenberg.

    c. A partir del resultado anterior, verificar explícitamente que $\hat{O}_H$ satisface la ecuación de Heisenberg.

28. Considerar el hamiltoniano del oscilador armónico $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} x^2$.

    a. Si en el esquema de Schrödinger se identifica $\hat{x}_S = \hat{x}$ y $\hat{p}_S = -i\hbar\frac{d}{dx}$, probar que en el esquema de Heisenberg (con $\hat{x}_H(0) = \hat{x}_S$ y $\hat{p}_H(0) = \hat{p}_S$) se tiene

$$\hat{x}_H(t) = \cos(\omega t)\, \hat{x} - \frac{i\hbar}{m\omega} \sin(\omega t) \frac{d}{dx} ,$$

$$\hat{p}_H(t) = -m\omega \sin(\omega t)\, \hat{x} - i\hbar \cos(\omega t) \frac{d}{dx} .$$

b. A partir de estas expresiones, verificar explícitamente que el hamiltoniano coincide en ambos esquemas.

c. Calcular los conmutadores $[\hat{x}_H(t_1), \hat{x}_H(t_2)]$, $[\hat{p}_H(t_1), \hat{p}_H(t_2)]$ y $[\hat{x}_H(t_1), \hat{p}_H(t_2)]$ para tiempos t_1 y t_2 arbitrarios. Verificar que si $t_1 = t_2$, se recuperan las relaciones de conmutación canónicas.

2.3 Teorema de Ehrenfest

29. Considerar un observable arbitrario $\hat{A}$ (que puede depender del tiempo tanto en el esquema de Schrödinger como en el de Heisenberg), y considerar su valor medio $\langle \hat{A} \rangle$ calculado respecto de un estado cualquiera.

a. Partiendo del esquema de Heisenberg, probar el teorema de Ehrenfest:

$$i\hbar \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = \langle [\hat{A}, \hat{H}] \rangle + i\hbar \left\langle \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right\rangle .$$

b. Partiendo del esquema de Schrödinger, probar el teorema de Ehrenfest (misma ecuación anterior).

30. Considerar un hamiltoniano de la forma $\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V(\hat{\boldsymbol{x}})$.

a. Probar la relación

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \boldsymbol{x} \rangle = -\big\langle \nabla V(\hat{\boldsymbol{x}}) \big\rangle .$$

b.* Probar que, en general, $\langle \nabla V(\hat{\boldsymbol{x}}) \rangle \neq \nabla V(\langle \hat{\boldsymbol{x}} \rangle)$.

31. Considerar nuevamente el hamiltoniano $\hat{H}$ y el operador $\hat{O}$ del problema 27. Considerar además el estado $|\Psi\rangle$ que, a tiempo $t_0 = 0$, toma la forma $|\Psi(t_0)\rangle = (1, 0)^T$ (ya sea en el esquema de Schrödinger o en el de Heisenberg).

a. Determinar, en el esquema de Schrödinger, el mismo estado a tiempo t.

b. Calcular $\langle \hat{O} \rangle$ para el estado $|\Psi\rangle$ en ambos esquemas y verificar que coinciden.

c. Verificar explícitamente que se satisface el teorema de Ehrenfest.

2.4 Simetrías y leyes de conservación

32. Sea $\{|\Psi_n\rangle\}$ el conjunto de los autoestados de un cierto hamiltoniano $\hat{H}$, de modo que se satisface la ecuación de autovalores $\hat{H}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle$. Sea además $\hat{D}$ un cierto operador unitario, y defínanse los estados transformados por $\hat{D}$ como $|\Psi_n'\rangle = \hat{D}|\Psi_n\rangle$. Decimos entonces que $\hat{D}$ es una simetría del hamiltoniano si y sólo si, para todo n, se cumple $\hat{H}|\Psi_n'\rangle = E_n|\Psi_n'\rangle$. Probar que $\hat{D}$ es una simetría del hamiltoniano $\iff [\hat{D}, \hat{H}] = 0$.

33. Sea $\hat{T}$ un operador hermítico arbitrario, y sea $\hat{D}(\theta) = e^{i\theta\hat{T}}$ un operador unitario con $\theta \in \mathbb{R}$. Dado un cierto hamiltoniano $\hat{H}$, probar que $[\hat{D}(\theta), \hat{H}] = 0 \;\; \forall\theta \iff [\hat{T}, \hat{H}] = 0$. En este caso decimos que $\hat{D}(\theta)$ es una *familia de simetrías continuas* de $\hat{H}$, y que $\hat{T}$ es el correspondiente *generador de simetrías.*

34. Utilizar el teorema de Ehrenfest para probar que si $\hat{D}$ es una simetría del hamiltoniano, entonces sus autovalores son constantes en el tiempo.

    Sugerencia: comenzar argumentando que, en el esquema de Heisenberg, $\hat{D}$ no puede tener dependencia explícita con el tiempo.

35.* Sea $R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{pmatrix}$ una matriz de rotación arbitraria en el plano, con $\theta \in [0, 2\pi)$.

    a. Probar que $R(\theta)$ es una matriz simétrica (es decir, $R^T R = \mathbb{I}_2$) y que $\det R = 1$.
    b. Probar que, para cualquier operador vectorial $\boldsymbol{v}$, vale $(\boldsymbol{v}')^2 = \boldsymbol{v}^2$ con $\boldsymbol{v}' = R\boldsymbol{v}$.

    Considerar ahora una función de onda arbitraria $\Psi(\boldsymbol{x})$, no necesariamente normalizada. Defínase el operador $\hat{D}_R(\theta)$, asociado a la rotación $R(\theta)$, de manera tal que $\hat{D}_R(\theta)\Psi(\boldsymbol{x}) = \Psi\big(R(-\theta)\boldsymbol{x}\big)$.

    c. Probar que $\hat{D}_R(\theta)$ es un operador unitario.
    d. Hallar el generador $\hat{T}$ asociado a las familia de transformaciones $\hat{D}_R(\theta)$.
       Sugerencia: expandir $\hat{D}_R(\theta)$ en potencias de θ. Notar que $i\hat{T}$ corresponde simplemente al coeficiente de primer orden en dicho desarrollo.
    e. Probar que $\hat{T} = -\frac{1}{\hbar}\hat{\boldsymbol{x}} \times \hat{\boldsymbol{p}}$.
       Nota: dados dos vectores $\boldsymbol{v}$ y $\boldsymbol{w}$ en el plano bidimensional, se define al *producto externo* $\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{w}$ como una cantidad escalar dada por $\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{w} = v_1 w_2 - v_2 w_1$.

    Considerar ahora un potencial $V(\hat{\boldsymbol{x}}^2)$ que sólo depende del módulo del operador $\hat{\boldsymbol{x}}$. A un potencial de tal forma se lo denomina *potencial central.* Considerar entonces el hamiltoniano $\hat{H} = \frac{\hat{\boldsymbol{p}}^2}{2m} + V(\hat{\boldsymbol{x}}^2)$.

    f. Probar que los operadores $\hat{D}_R(\theta)$ son simetrías de dicho hamiltoniano.
       Sugerencia: usar el resultado del problema 33.