# Mecánica Cuántica I

DF - FCEx - UNLP

2do semestre 2024

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

# Práctica 2

*Los ejercicios marcados con asterisco (*) son opcionales.*



## 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

$$\left(\mathrm{Re}(z)\right)^2 = \left(\frac{z + z^*}{2}\right)^2 = \left(\frac{\langle\{\hat{A}, \hat{B}\}\rangle - 2\langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle}{2}\right)^2 \geq 0 \; . \tag{2.1.1}$$

   e. Probar

$$\left(\mathrm{Im}(z)\right)^2 = \left(\frac{z - z^*}{2i}\right)^2 = \left(\frac{\langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle}{2i}\right)^2 \geq 0 \; . \tag{2.1.2}$$

f. Concluir que debe satisfacerse

$$(\Delta A)^2(\Delta B)^2 \geq \left(\frac{\langle\{\hat{A},\hat{B}\}\rangle - 2\langle\hat{A}\rangle\langle\hat{B}\rangle}{2}\right)^2 + \left(\frac{\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle}{2i}\right)^2 . \tag{2.1.3}$$

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

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

$$\Delta A\,\Delta B \geq \frac{1}{2}\left|\langle[\hat{A},\hat{B}]\rangle\right| . \tag{2.1.4}$$

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:

$$\Psi(x) = N(\sigma_x)\,e^{-x^2/4\sigma_x^2} , \tag{2.1.5}$$

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

$$\widetilde{\Psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\,e^{-ipx/\hbar}\Psi(x) . \tag{2.1.6}$$

Determinar su ancho de probabilidad $\sigma_p$ como función de $\sigma_x$.

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 (2.1.6). Se define la *entropía de Shannon en la base de posición* como

$$S = -\int_{-\infty}^{\infty} dx\,|\Psi(x)|^2\,\ln\left(a\,|\Psi(x)|^2\right) , \tag{2.1.7}$$

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

$$\widetilde{S} = -\int_{-\infty}^{\infty} dp\, |\widetilde{\Psi}(p)|^2 \ln\left(b\, |\widetilde{\Psi}(p)|^2\right), \tag{2.1.8}$$

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

$$S + \widetilde{S} \geq \ln\left(\pi e\, \frac{\hbar}{ab}\right). \tag{2.1.9}$$

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 $\alpha$ 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

$$\hat{x}_H(t) = \cos(\omega t)\,\hat{x} - \frac{i\hbar}{m\omega}\sin(\omega t)\frac{d}{dx}\ , \tag{2.2.1}$$

$$\hat{p}_H(t) = -m\omega\sin(\omega t)\,\hat{x} - i\hbar\cos(\omega t)\frac{d}{dx}\ . \tag{2.2.2}$$

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:

$$i\hbar\frac{d\langle\hat{A}\rangle}{dt} = \langle[\hat{A}, \hat{H}]\rangle + i\hbar\left\langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right\rangle\ . \tag{2.3.1}$$

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

$$m\frac{d^2}{dt^2}\langle\boldsymbol{x}\rangle = -\big\langle\nabla V(\hat{\boldsymbol{x}})\big\rangle\ . \tag{2.3.2}$$

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 $\theta$. 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.

## 2.5 Bases de posición y momento

36. Se definen las bases (unidimensionales) de posición y momento como $\{|x\rangle : x \in \mathbb{R}\}$ y $\{|p\rangle : p \in \mathbb{R}\}$, respectivamente. Los *labels* $x$ y $p$ corresponden a los respectivos autovalores ante la acción de los operadores $\hat{x}$ y $\hat{p}$, es decir,

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \; , \tag{2.5.1}$$
$$\hat{p}|p\rangle = p|p\rangle \; . \tag{2.5.2}$$

Los estados en estas bases están normalizados acorde con

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x - x') \; , \tag{2.5.3}$$
$$\langle p'|p\rangle = \delta(p - p') \; . \tag{2.5.4}$$

Por otro lado, la relación entre ambas bases está dada por la identidad

$$|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{ipx/\hbar}\, |x\rangle \; . \tag{2.5.5}$$

Esta relación nos permite identificar a la base de momentos como la *base dual de Fourier* de la base de posición. A partir de estas definiciones, probar:

a. $\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{ipx/\hbar}$.

b. $|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp\, e^{-ipx/\hbar}\, |p\rangle$.

c. $\int_{-\infty}^{\infty} dx\, |x\rangle\langle x| = \hat{\mathbb{I}}$.

d. $\int_{-\infty}^{\infty} dp\, |p\rangle\langle p| = \hat{\mathbb{I}}$.

Nota: el operador identidad $\hat{\mathbb{I}}$ suele ser identificado mediante el número 1.

37. Dado un estado $|\Psi\rangle$, se define a su representación en la base de coordenadas como $\Psi(x) := \langle x|\Psi\rangle$, y a su representación en la base de momentos como $\widetilde{\Psi}(p) := \langle p|\Psi\rangle$.

a. A partir de estas definiciones, probar la identidad (2.1.6).

b. Probar $\langle x|\hat{p}|\Psi\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\Psi(x)$.

38.* Seguir los siguientes pasos para probar la relación $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$ partiendo de las definiciones y resultados del problema 36.

a. Considerar el elemento de matrix $\langle x|\hat{p}\,\hat{x}|p\rangle$. Insertando las relaciones de completitud (resultados de los incisos 36c y 36d), probar

$$\langle x|\hat{p}\,\hat{x}|p\rangle = \int dx'\, dp'\, x'\, p' \langle x|p'\rangle\langle p'|x'\rangle\langle x'|p\rangle \; . \tag{2.5.6}$$

b. A partir de la relación de onda (resultado del inciso 36a), probar

$$\int dx'\, dp'\, x'\, p' \langle x|p'\rangle\langle p'|x'\rangle\langle x'|p\rangle = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx\, dp} \int dx'\, dp'\, \langle x|p'\rangle\langle p'|x'\rangle\langle x'|p\rangle \ . \tag{2.5.7}$$

c. "Deshaciendo" las relaciones de completitud, y usando las ecuaciones (2.5.6) y (2.5.7), probar

$$\langle x|\hat{p}\,\hat{x}|p\rangle = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx\, dp} \langle x|p\rangle \ . \tag{2.5.8}$$

d. Usando nuevamente el resultado del inciso 36a, probar

$$\langle x|\hat{p}\,\hat{x}|p\rangle = (-i\hbar + xp)\langle x|p\rangle \ . \tag{2.5.9}$$

e. Calcular $\langle x|\hat{x}\,\hat{p}|p\rangle$ y concluir, usando (2.5.9), que $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.