

## Capítulo 1

---

# Dinámica cuántica

Queremos ver la evolución temporal de los kets

$$|\alpha, t_0, t\rangle,$$

notación que refiere al estado  $\alpha$  que partió en  $t_0$  al tiempo  $t$ . Pictóricamente

$$|\alpha, t_0\rangle \xrightarrow[\text{evoluciona}]{} |\alpha, t_0, t\rangle$$

Emplearemos para ello un operador de evolución temporal  $U_{(t, t_0)}$  al cual le pediremos

$$|\alpha, t_0, t\rangle = U |\alpha, t_0\rangle$$

con las propiedades

- Unitariedad

$$\langle \alpha, t_0, t | \alpha, t_0, t \rangle = 1 \forall t$$

$$\langle \alpha, t_0 | U^\dagger U | \alpha, t_0 \rangle = 1 \Rightarrow U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbb{1}$$

para conservación de la probabilidad.

- Linealidad

$$U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1)U(t_1, t_0) \quad t_2 > t_1 > t_0$$

- Límite a  $\mathbb{1}$

$$U_{(t, t_0)} \rightarrow \mathbb{1} \quad \text{si} \quad t \rightarrow t_0$$

o bien

$$U_{(t_0+dt, t_0)} \rightarrow \mathbb{1} \quad \text{si} \quad dt \rightarrow 0$$

Se propone entonces un

$$U_{(t+dt,t)} = \mathbb{1} - i\Omega dt$$

con  $\Omega$  hermitico. Comparando con clásica vemos que  $H$  origina la evolución temporal, entonces identificamos  $\Omega$  con  $H$ , del modo  $\Omega = H/\hbar$  así que

$$U_{(t+dt,t)} = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H dt.$$

De esta forma

$$U_{(t+dt,t_0)} = U_{(t+dt,t)} U_{(t,t_0)} = \left( \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H dt \right) U_{(t,t_0)}$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{U_{(t+dt,t_0)} - U_{(t,t_0)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H U_{(t,t_0)}$$

y entonces

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = H U$$

que es la ecuación para  $U_{(t,t_0)}$ .

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_{(t,t_0)} |\alpha, t_0\rangle = H U_{(t,t_0)} |\alpha, t_0\rangle$$

y arribamo a la ecuación de Schrödinger para kets

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\alpha, t_0, t\rangle = H |\alpha, t_0, t\rangle$$

donde el inconveniente es que  $H = H(t)$ .

El concepto se ilustra en la figura siguiente

## 1.1 Dinámica cuántica

### 1.1.1 Casos de solución de $U(t, t_0)$

- Supongamos  $H \neq H(t)$ , entonces

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

- Sea  $H = H(t)$ , entonces

$$U(t, t_0) = e^{-i/\hbar \int_{t_0}^t H(t') dt'}$$

y la integral puede hacerse una vez conocida la expresión de  $H(t)$ .

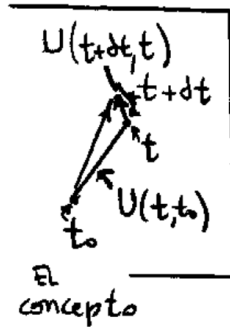


Figura 0.1

- Sea  $H = H(t)$  con  $[H(t_1), H(t_2)] \neq 0$  entonces

$$U(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{-i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 \dots \times \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) H(t_2) \dots H(t_n)$$

y esta es la serie de Dyson (del físico Freeman Dyson.)

El problema que suscita es debido a que si  $H$  a diferentes tiempos no conmuta no podemos poner la exponencial en serie de potencias. En realidad  $\exp(\square)$  tiene sentido sólo si la serie

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \square^n$$

tiene sentido; es decir, si no surgen ambigüedades al tomar la potencia  $n$ -ésima del operador  $\square$ .

El operador  $\square$  no se deja poner sombreros, quiere andar con la cabeza descubierta

Para el caso 1 es simplemente

$$a$$

pero para el caso 3 es

$$a$$

puesto que al operar es

$$a$$

pues  $[H(t'), H(t'')] \neq 0$ . En el caso 2  $(\int_{t_0}^t H(t') dt')^n$  no tiene problemas puesto que está provista la conmutatividad.

### 1.1.2 Soluciones útiles

Primeramente conseguimos un  $\hat{A}$  tal que  $[\hat{A}, H] = 0$  y entonces (estoy considerando  $H \neq H(t)$ )

$$a,$$

luego

$$a$$

con  $\hat{H}$  y  $\hat{A}$  conmutan se tiene

$$a$$

Entonces operamos con el  $H$  para

$$a$$

y así

$$a$$

de manera que comparando con

$$a$$

El coeficiente es el mismo pero le hemos sumado una fase  $\exp(-iE_{a'}(t-t_0)/\hbar)$  que no es global.

### 1.1.3 Evolución de valores de expectación

Recordemos primeramente que los autoestados no evolucionan. Luego

$$a$$

La fase es global es considerar una autoestado. La podemos descartar (setear igual a uno)

$$a$$

El valor de expectacion de un operador respecto a un autoestado no varía.

$$a$$

$$a$$

$$a$$

El valor de expectación de un operador respecto a un estado general tiene una fase no global que produce términos de interferencia.

### 1.1.4 Relaciones de conmutación

$$[A + B, C] = [A, C] + [B, C]$$

$$[A, B] = -[B, A]$$

$$[A, B \cdot C] = B[A, C] + [A, B]C$$

Acá no es baca + caballo puesto que no conmutan.

$$i\hbar[A, B]_{\text{classic}} = [A, B]$$

donde  $[\cdot, \cdot]_{\text{classic}}$  es el corchete de Poisson. Las relaciones de conmutación fundamentales son

$$[x_i, x_j] = 0 \quad [p_i, p_j] = 0 \quad [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

a las que podemos sumar

$$[x, f(p)] = i\hbar \frac{\partial f}{\partial p} \quad [p, G(x)] = i\hbar \frac{\partial G}{\partial x}$$

$$[S_i, S_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}S_k$$

### 1.1.5 La ecuación de Schrödinger

$$\text{acon} \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

Puedo meter un bra  $\langle x' |$  que no depende del tiempo y entonces

$$a$$

$$a$$

de manera que resulta la ecuación de Schrödinger

$$a.$$

### 1.1.6 Representación de Heisenberg

Los kets y los operadores no tienen sentido físico, pero sí los valores de expectación : toda física podrá modificar los primeros pero debe conservar los valores de expectación. Así tenemos dos representaciones posibles:

Schrödinger	Heisenberg
$ \alpha\rangle \rightarrow U  \alpha\rangle$	$ \alpha\rangle \rightarrow  \alpha\rangle$
$A \rightarrow A$	$A \rightarrow U^\dagger A U$
$ a'\rangle \rightarrow  a'\rangle$	$ a'\rangle \rightarrow U^\dagger  a'\rangle$

Así vemos que en Schrödinger los kets evolucionan y los operadores permanecen fijos; al igual que los autoestados. En cambio en Heisenberg los kets no evolucionan pero sí lo hacen los operadores y los autoestados.

Deben notar que:

1. Los productos internos no cambian con el tiempo

$$a$$

2. Los valores de expectacion son los mismos en ambos esquemas

$$a$$

$$\langle A \rangle^{(S)} = \langle A \rangle^{(H)} \qquad A(t)^H = U(t)^\dagger A^S U(t)$$

El operador  $\hat{A}$  en Schrödinger no depende explícitamente del tiempo. La idea es que le “pegamos” a los operadores la evolución temporal de los kets.

$$a$$

pero a  $t = t_0$  las representaciones coinciden,

$$a$$

La ecuación de Heisenberg

$$a$$

$$\Rightarrow$$

$$a$$

$$a$$

$$a$$

y llegamos a la ecuación de Heisenberg

$$\frac{\partial A^{(H)}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [A^{(H)}, H^{(H)}]$$

si  $A^{(H)}$  conmuta con el  $H^{(H)}$ , entonces  $A^{(H)}$  es una cantidad conservada (una constante de movimiento). En ese caso el operador no depende del tiempo y entonces  $A^{(H)} = A^{(S)}$ .

## Evolución de autoestados

$a$ ,

aplico un  $U^\dagger$  a ambos lados y entonces

$a$

los  $a'$  no dependen de la representación porque tienen significado físico. Entonces los  $|a'\rangle$  evolucionan

$a$

$a$

$a$

puesto que recordemos, nota importante,

$a$

entonces  $H$  es el mismo en ambas puesto que  $\hat{U} = \hat{U}(\hat{H})$  y  $[U, H] = 0$ .

De esta forma los autoestados evolucionan al revés

$a$

Podemos ver de otro modo la equivalencia

$a$

pero

$a$

$a$

## Coeficientes

Los coeficientes en Schrödinger y en Heisenberg son

$$a$$

Entonces en Schrödinger es

$$a$$

mientras que en Heisenberg es

$$a$$

Los coeficientes en las expresiones son iguales como corresponde a toda magnitud que tiene sentido físico, pues  $|c_a(t)|^2$  es la probabilidad.

### 1.1.7 Teorema de Ehrenfest

Para una partícula libre, donde  $p(t) = p(0)$  es constante de movimiento,

$$x^{(H)} = x(0) + \frac{p(0)}{m}t$$

y se tiene

$$[x(t), x(0)] = -\frac{i\hbar}{m}t$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

$$\frac{dP}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[p, H] = \frac{1}{i\hbar}[p, V(x)] = \frac{1}{i\hbar}\left(-i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}\right),$$

de modo que

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x} \quad \longrightarrow \quad m\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

$$p = m\frac{dx}{dt} \quad \frac{dp}{dt} = m\frac{d^2x}{dt^2}$$

donde estamos usando

$$\frac{\partial A^H}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[A^H, H]$$

Es necesario remarcar que relaciones como  $[x, p] = i\hbar$  son para operadores en la picture de Schrödinger, donde los operadores no cambian en el tiempo. Estamos en efecto haciendo  $[x(0), p(0)] = i\hbar$

$$\left\langle \alpha, t_0 \left| m\frac{d^2x}{dt^2} \right| \alpha, t_0 \right\rangle = -\left\langle \alpha, t_0 \left| \frac{\partial V}{\partial x} \right| \alpha, t_0 \right\rangle$$



$$m \frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle \alpha, t_0 | x^H | \alpha, t_0 \rangle = - \left\langle \alpha, t_0 \left| \frac{\partial V}{\partial x} \right| \alpha, t_0 \right\rangle$$

y entonces el teorema de Ehrenfest es

$$m \frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle x^{(s)} \rangle = - \left\langle \frac{\partial V^{(s)}}{\partial x} \right\rangle$$

los valores de expectación son iguales en ambas representaciones.

## 1.2 El oscilador armónico

Para el oscilador armónico 1D el hamiltoniano y energía eran

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \quad E = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

pero este problema puede resolverse usando un nuevo operador  $\hat{a}$

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x + i \frac{p}{m\omega} \right) \quad \text{con} \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left( x - i \frac{p}{m\omega} \right)$$

que es suma de  $\hat{x}, \hat{p}$  pero que no es hermitico. Cumple que

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad aa^\dagger = \frac{H}{\hbar\omega} - 1 \quad H = \hbar\omega \left( aa^\dagger + \frac{1}{2} \right),$$

donde se define el operador número  $\hat{N} \equiv a^\dagger a$  que al verificar  $[\hat{N}, \hat{H}] = 0$  tienen base de autoestados en común  $\{|n\rangle\}$ . En efecto

$$\hat{N} |n\rangle = n |n\rangle \quad \hat{H} |n\rangle = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle$$

siendo  $n$  el número de cuantos de energía. Se cumplen además

$$[N, a] = [a^\dagger a, a] = -[a, a^\dagger a] = -(a^\dagger [a, a] + [a, a^\dagger] a) = -a$$

$$[N, a^\dagger] = [a^\dagger a, a^\dagger] = -[a^\dagger, a^\dagger a] = -(a^\dagger [a^\dagger, a] + [a^\dagger, a] a^\dagger) = a^\dagger$$

Queremos ver que le hace  $a^\dagger$  a un autoestado  $|n\rangle$  y luego  $a$  sobre el mismo.

$$Na^\dagger |n\rangle = ([N, a^\dagger] + a^\dagger N) |n\rangle = a^\dagger |n\rangle + a^\dagger n |n\rangle$$

$$\hat{N}(a^\dagger |n\rangle) = (n+1)(a^\dagger |n\rangle)$$

Entonces, como no hay degeneración y tenemos  $N|n'\rangle = n'|n'\rangle$  entonces

$$a^\dagger |n\rangle = c_1 |n+1\rangle,$$

y procediendo de modo idem para  $a|n\rangle$  será

$$a|n\rangle = c_2 |n-1\rangle$$

Luego,

$$a^\dagger |n\rangle = c_1 |n+1\rangle \xrightarrow{DC} \langle n+1|c_1^* = \langle n|a$$

$$a|n\rangle = c_2 |n-1\rangle \xrightarrow{DC} \langle n-1|c_2^* = \langle n|a^\dagger$$

y entonces

$$\langle n|N|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n = \langle n|a^\dagger a|n\rangle = \langle n-1|c_2^* c_2|n-1\rangle = |c_2|^2 \langle n-1|n-1\rangle$$

$$n = \langle n|aa^\dagger - 1|n\rangle = -1 + \langle n|aa^\dagger|n\rangle = -1 + \langle n+1|c_1^* c_1|n+1\rangle = -1 + |c_1|^2 \langle n+1|n+1\rangle$$

siendo

$$|c_2| = \sqrt{n} \quad |c_1| = \sqrt{n+1}$$

$$\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

y entonces de esta forma  $\hat{a}^\dagger$  es el operador de creación de cuantos y  $\hat{a}$  el de aniquilación.

### 1.2.1 El estado fundamental $\langle 0 \rangle$

$$a|n\rangle \xrightarrow{DC} \langle n|a^\dagger$$

y desde el postulado para productos internos,

$$(\langle n|a^\dagger)(a|n\rangle) \geq 0 \quad n\langle n|n\rangle \geq 0 \Rightarrow n \geq 0$$

entonces  $n$  cabalga por los naturales. Si hacemos

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad a^2|n\rangle = \sqrt{n}\sqrt{n-1}|n-2\rangle \dots$$

en algún momento se llega a  $|n=0\rangle$ , entonces  $E_0 = \hbar\omega/2$  y

$$|0\rangle \equiv \text{El fundamental}$$

y no se puede bajar más,

$$\hat{a}|0\rangle = 0.$$

Por otra parte, con el  $\hat{a}^\dagger$  se puede llegar a cualquier estado

$$a^\dagger |0\rangle = \sqrt{1} |1\rangle, \quad a^{\dagger 2} |0\rangle = \sqrt{1}\sqrt{2} |2\rangle = \sqrt{1}\sqrt{2}\sqrt{3} |3\rangle$$

$$\frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle = |n\rangle$$

Las matrices de  $\hat{a}, \hat{a}^\dagger$  sólo tienen una diagonal corrida de elementoss

$$\langle n' | a | n \rangle = \sqrt{n} \langle n' | n-1 \rangle = \sqrt{n} \delta_{n', n-1}$$

$$\langle n' | a^\dagger | n \rangle = \sqrt{n+1} \langle n' | n+1 \rangle = \sqrt{n+1} \delta_{n', n+1}$$

También puede verse que

$$\langle n | x | n \rangle = 0 \quad \langle n | p | n \rangle = 0$$

y por ello

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle_{|0\rangle} \langle (\Delta p)^2 \rangle_{|0\rangle} = \frac{\hbar^2}{4}$$

el estado fundamental es el de incerteza mínima.

### 1.2.2 Función de onda

Siendo  $\Psi_n(x') = \langle x' | n \rangle$  quiero evaluar  $\Psi_0(x') = \langle x' | 0 \rangle$  y ver que como

$$\langle x' | a | 0 \rangle = 0$$

tengo

$$0 = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left\langle x' \left| x + \frac{ip}{m\omega} \right| 0 \right\rangle = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left[ x' \langle x' | 0 \rangle + \frac{i}{m\omega} \langle x' | p | 0 \rangle \right]$$

$$x' \langle x' | 0 \rangle + \frac{i}{m\omega} (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \langle x' | 0 \rangle = 0$$

entonces

$$x' \langle x' | 0 \rangle = -\frac{\hbar}{m\omega} \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | 0 \rangle$$

$$-\int \frac{m\omega}{\hbar} x' dx' = \int \frac{d \langle x' | 0 \rangle}{\langle x' | 0 \rangle} \Rightarrow \langle x' | 0 \rangle = \kappa e^{-m\omega x'^2/(2\hbar)}$$

y entonces

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \langle 0 | x' \rangle \langle x' | 0 \rangle dx' = \int_{-\infty}^{\infty} |\kappa|^2 e^{-m\omega x'^2/\hbar} dx' = |\kappa|^2 \sqrt{\frac{\pi\hbar}{m\omega}}$$

$$|\kappa| = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/2} = \frac{1}{(\pi x_0^2)^{1/4}}$$

donde usamos el conocido resultado  $\int_{-\infty}^{\infty} \exp(-ax^2) dx = \sqrt{\pi/a}$ , llegamos al llamado pack gaussiano.

$$\langle x' | 0 \rangle = \frac{1}{(\pi x_0^2)^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}(x'/x_0)^2}$$

El estado fundamental tiene incerteza mínima y debe corresponder a un paquete gaussiano.

Notemos que  $\hat{a}^\dagger$  crea sobre ket y aniquila sobre bra, mientras que  $\hat{a}$  aniquila sobre ket y crea sobre bra,

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle \Rightarrow \langle n| a = \langle n+1| \sqrt{n+1}$$

$$a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle \Rightarrow \langle n| a^\dagger = \langle n-1| \sqrt{n}$$

### 1.2.3 Interferencia en experimento de Young

Consideremos la situación depicted en la figura bajo estas líneas

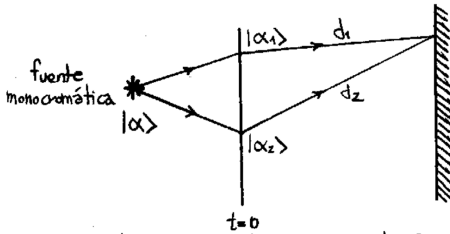


Figura 2.2

Uso  $\hat{H}$  de partículas libres.

$$\frac{1}{2} |\alpha\rangle = |\alpha_1\rangle = |\alpha_2\rangle$$

para  $t > 0$  se tiene

$$|\tilde{\alpha}_1\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\alpha_1\rangle = e^{-iE_\alpha t/\hbar} |\alpha_1\rangle$$

$$|\tilde{\alpha}_2\rangle = e^{-iE_\alpha t/\hbar} |\alpha_2\rangle$$

En la pantalla debe verse la interferencia de los dos estados solapados.

$$|\tilde{\alpha}\rangle = |\tilde{\alpha}_1\rangle + |\tilde{\alpha}_2\rangle = e^{-iE_\alpha \frac{d_1}{v}/\hbar} |\alpha_1\rangle + e^{-iE_\alpha \frac{d_2}{v}/\hbar} |\alpha_2\rangle$$

$$|\tilde{\alpha}\rangle = \frac{1}{2} e^{-iE_\alpha \frac{d_1}{v}/\hbar} |1 + e^{-iE_\alpha \frac{d_2-d_1}{v}/\hbar}| |\alpha_1\rangle$$

y si definimos

$$\beta = E_\alpha \frac{d_2 - d_1}{v} / \hbar,$$

resulta entonces

$$\langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha} \rangle = \frac{1}{4} |1 + e^{-iE_\alpha \frac{d_2-d_1}{v}/\hbar}|^2 = \frac{1}{4} ((1 + \cos \beta)^2 + \sin^2 \beta) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos(\beta).$$

Al partir el estado  $|\alpha_1\rangle$  y volver a unirlos en  $|\alpha_1\rangle + |\alpha_2\rangle$  vemos una intensidad que depende de la diferencia de camino.

### 1.2.4 Cambio de cero del potencial

En mecánica clásica la física de un problema no se ve afectada por un cambio de gauge. Si movemos el cero de potencial, la situación física es la misma. Veamos qué sucede en mecánica cuántica.

$$|\alpha, t, t_0\rangle = e^{-i(p^2/2m + V(x))(t-t_0)/\hbar} |\alpha, t_0\rangle$$

$$|\tilde{\alpha}, t, t_0\rangle = e^{-i(p^2/2m + V(x) + V_0)(t-t_0)/\hbar} |\alpha, t_0\rangle$$

$$|\tilde{\alpha}, t, t_0\rangle = e^{-iV_0(t-t_0)/2} |\alpha, t, t_0\rangle$$

y entonces vemos que  $|\tilde{\alpha}, t\rangle$  y  $|\alpha, t\rangle$  difieren en una fase, de manera que los valores de expectación no cambian (con  $V_0$  constante).

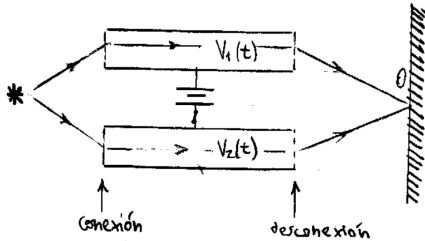


Figura 2.3

Este es un experimento ideal (pensado). Dentro de los cilindros hay campo nulo. Se varia el  $V$  abriendo y cerrando la llave a la entrada y a la salida. Se cambia la fase de las partículas inferiores respecto de las superiores, entonces habrá interferencia en  $O$ .

Clásicamente no hay variación,

$$\Delta \text{fase} = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} V_1(t) - V_2(t) dt = -\frac{i}{\hbar} e \Delta V$$

Lo que realmente cuenta es la diferencia de potencial  $\Delta V$ , la cual sí tiene sentido físico porque es independiente de la medida y porque pueden escribirse los campos en función de aquella.

$$E = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

$$H = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{e\mathbf{A}}{c} \right)^2 + e\phi$$

$$\frac{dH}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [x_i, H] = \frac{p_i e A_i}{m}$$