

# Notas de Clase

Juan Montoya

16 de julio de 2025

## Resumen

El objetivo de estas notas es ilustrar los postulados fundamentales de la mecánica cuántica mediante el caso de un sistema de espín  $1/2$  (por ejemplo, átomos de plata) y el uso del aparato de Stern–Gerlach. Se aborda la preparación de estados, la naturaleza probabilística de las mediciones y la evolución temporal bajo un Hamiltoniano simple.

## 1. Operador $S_z$ espacio de espín

Al observable  $S_z$  corresponde el operador  $S_z$ , cuyos autovalores son  $\pm\hbar/2$ . Denotamos por  $|+\rangle$  y  $|-\rangle$  los autovectores ortonormales:

$$\begin{cases} S_z |+\rangle = +\frac{\hbar}{2} |+\rangle, \\ S_z |-\rangle = -\frac{\hbar}{2} |-\rangle, \end{cases} \quad (\text{A-10})$$

con

$$\begin{cases} \langle +|+\rangle = \langle -|-\rangle = 1, \\ \langle +|-\rangle = 0, \end{cases} \quad (\text{A-11})$$

y la relación de cierre

$$|+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -| = \mathbb{I}. \quad (\text{A-12})$$

### A-2-b. Los operadores $S_x$ , $S_y$ y $S_u$

Los operadores  $S_x$ ,  $S_y$  y  $S_u$  tienen los mismos autovalores,  $+\hbar/2$  y  $-\hbar/2$ , que  $S_z$ . Este resultado era de esperar, ya que siempre es posible girar todo el conjunto del aparato de Stern–Gerlach de modo que el eje definido por el campo magnético quede paralelo a  $Ox$ ,  $Oy$  o  $\vec{u}$ . Dado que todas las direcciones del espacio son físicamente equivalentes, los fenómenos observados en la placa no cambian bajo tales rotaciones; así, la medición de  $S_x$ ,  $S_y$  o  $S_u$  sólo puede dar como resultado  $+\hbar/2$  o  $-\hbar/2$ .

En cuanto a los autovectores de  $S_x$ ,  $S_y$  y  $S_u$ , los denotaremos respectivamente por  $|\pm\rangle_x$ ,  $|\pm\rangle_y$  y  $|\pm\rangle_u$  (el signo en el ket coincide con el del autovalor correspondiente). Sus desarrollos en la base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  de  $S_z$  se escriben:

$$|\pm\rangle_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \pm |-\rangle) \quad (\text{A-20})$$

$$|\pm\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \pm i |-\rangle) \quad (\text{A-21})$$

$$\begin{cases} |+\rangle_u = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |-\rangle, \\ |-\rangle_u = -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |+\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |-\rangle. \end{cases} \quad (\text{A-22a,b})$$

## 2. Estado general y parámetros esféricos

El estado más general en el espacio de espín es

$$|\psi\rangle = \alpha |+\rangle + \beta |-\rangle, \quad (\text{A-13})$$

sujeto a

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (\text{A-14})$$

Con la parametrización

$$\alpha = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2}, \quad \beta = \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2},$$

podemos asociar cada par  $(\alpha, \beta)$  a un vector unitario en la esfera de Bloch.

## 3. Mediciones de espín

Para ilustrar la naturaleza probabilística de las mediciones:

- **Experimento 1:** Con ambos aparatos alineados, si se prepara  $|+\rangle$  siempre se obtiene  $+\hbar/2$ .
- **Experimento 2:** Si se prepara  $|+\rangle_u$  (dirección  $\vec{u}$ ) y se mide  $S_z$ , las probabilidades son

$$P(+\hbar/2) = \cos^2 \frac{\theta}{2}, \quad P(-\hbar/2) = \sin^2 \frac{\theta}{2}.$$

- **Experimento 3:** Al rotar el analizador, las probabilidades cambian con el ángulo relativo.

El valor medio se corresponde con el resultado clásico:

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos \theta.$$

## 4. Evolución temporal

En un campo magnético uniforme  $\vec{B}_0$ , el Hamiltoniano es

$$\hat{H} = \omega_0 \hat{S}_z, \quad \omega_0 = -\gamma B_0.$$

Sus autoestados  $|\pm\rangle$  tienen energías separadas por  $\hbar\omega_0$ . Si

$$|\psi(0)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |-\rangle,$$

entonces la evolución de Schrödinger produce una precesión de Larmor:

$$|\psi(t)\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{-i(\varphi+\omega_0 t)/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i(\varphi+\omega_0 t)/2} |-\rangle.$$

### Demostración de la existencia de un vector unitario $\mathbf{u}$

Vamos a mostrar que existe, para todo  $|\psi\rangle$ , un vector unitario  $\mathbf{u}$  tal que  $|\psi\rangle$  es colineal con el ket  $|+\rangle_u$ . Elegimos por tanto dos números complejos  $\alpha$  y  $\beta$  que satisfacen la relación

$$|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \quad (\text{B-2})$$

pero que son arbitrarios en lo demás. Teniendo en cuenta (B-2), existe necesariamente un ángulo  $\theta$  tal que

$$\begin{cases} \cos \frac{\theta}{2} = |\alpha|, \\ \sin \frac{\theta}{2} = |\beta|. \end{cases} \quad (\text{B-3})$$

Si, además, imponemos

$$0 \leq \theta \leq \pi, \quad (\text{B-4})$$

la ecuación

$$\tan \frac{\theta}{2} = \left| \frac{\beta}{\alpha} \right|$$

determina  $\theta$  de forma única. Sabemos que sólo la diferencia de fases de  $\alpha$  y  $\beta$  influye en las predicciones físicas. Definimos entonces

$$\varphi = \text{Arg}(\beta) - \text{Arg}(\alpha), \quad (\text{B-5})$$

$$\chi = \text{Arg}(\beta) + \text{Arg}(\alpha). \quad (\text{B-6})$$

De aquí se sigue

$$\text{Arg}(\beta) = \frac{1}{2} \chi + \frac{1}{2} \varphi, \quad \text{Arg}(\alpha) = \frac{1}{2} \chi - \frac{1}{2} \varphi. \quad (\text{B-7})$$

Con esta notación, el ket  $|\psi\rangle$  puede escribirse:

$$|\psi\rangle = e^{i\chi/2} \left[ \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi/2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi/2} |-\rangle \right]. \quad (\text{B-8})$$

## Resumen de la Figura 9: Trayectorias clásicas vs. superposición cuántica

Cuando un átomo de plata entra con espín en el estado  $|+\rangle$  (Fig. 9-a) o  $|-\rangle$  (Fig. 9-b), su función de onda externa está concentrada en un único paquete estrecho cuyo centro recorre una trayectoria que puede describirse clásicamente.

Sin embargo, si el estado de espín es la superposición

$$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle \quad (\text{B-9})$$

el paquete de onda inicial se divide en dos subpaquetes (Fig. 9-c), cada uno localizado cerca de los puntos 1 y 2 al llegar a la pantalla. Aunque cada subpaquete sigue siendo muy estrecho, el átomo ya no tiene una sola trayectoria clásica: la probabilidad de detección se reparte entre ambos lugares.

Estos dos subpaquetes corresponden a la misma partícula con distinta fase relativa; de hecho, si no se realiza la medición (quitando la pantalla) y se aplica un gradiente de campo magnético inverso, podrían recombinarse en un único paquete.

### Comentario:

(i) Si el campo  $\mathbf{B}_0$  es paralelo al vector unitario  $\mathbf{u}$  de ángulos polares  $\theta, \varphi$ , la ecuación (B-17) debe reemplazarse por

$$H = \omega_0 S_u \quad (\text{B-20})$$

donde  $S_u = \mathbf{S} \cdot \mathbf{u}$ .

(ii) Para el átomo de plata  $\gamma < 0$ , luego  $\omega_0 > 0$  según (B-16), lo cual explica la disposición de los niveles en la figura.

## B-3. Evolución de un espín 1/2 en un campo magnético uniforme

### B-3-a. Hamiltoniano de interacción y ecuación de Schrödinger

Consideremos un átomo de plata en un campo magnético uniforme  $\mathbf{B}_0$ , y tomemos el eje  $Oz$  paralelo a  $\mathbf{B}_0$ . La energía potencial clásica del momento magnético  $\mathcal{M} = \gamma \mathbf{S}$  es:

$$W = -\mathcal{M} \cdot \mathbf{B}_0 = -\mathcal{M}_z B_0 = -\gamma B_0 S_z \quad (\text{B-15})$$

donde  $B_0 = |\mathbf{B}_0|$ . Definimos:

$$\omega_0 = -\gamma B_0 \quad (\text{B-16})$$

que tiene dimensión de velocidad angular.

Al cuantizar sólo los grados internos,  $S_z$  se reemplaza por el operador  $\hat{S}_z$  y la energía (B-15) pasa a ser el Hamiltoniano

$$H = \omega_0 \hat{S}_z \quad (\text{B-17})$$

Este operador es independiente del tiempo, por lo que resolver la ecuación de Schrödinger equivale a encontrar los autovalores de  $H$ . Sus autovectores son los mismos de  $\hat{S}_z$ :

$$\begin{cases} H|+\rangle = +\frac{\hbar\omega_0}{2}|+\rangle, \\ H|-\rangle = -\frac{\hbar\omega_0}{2}|-\rangle. \end{cases} \quad (\text{B-18})$$

Por tanto, existen dos niveles de energía,

$$E_+ = +\frac{\hbar\omega_0}{2}, \quad E_- = -\frac{\hbar\omega_0}{2},$$

y su separación  $\hbar\omega_0$  define la frecuencia de Bohr

$$\nu_{+-} = \frac{1}{h}(E_+ - E_-) = \frac{\omega_0}{2\pi}. \quad (\text{B-19})$$

## C-2. Aspecto estático: efecto del acoplamiento en los estados estacionarios del sistema

### C-2-a. Expresiones para los autoestados y autoenergías de $H$

En la base  $\{|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle\}$ , la matriz que representa  $H$  es:

$$H = \begin{pmatrix} E_1 + W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & E_2 + W_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{C-7})$$

Su diagonalización conduce a los autoenergías:

$$\begin{aligned} E_+ &= \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) + \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}, \\ E_- &= \frac{1}{2}(E_1 + W_{11} + E_2 + W_{22}) - \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22})^2 + 4|W_{12}|^2}. \end{aligned} \quad (\text{C-8})$$

(si  $W_{ij} = 0$ , entonces  $E_+ = E_1$  y  $E_- = E_2$ ).

Los autoestados asociados son:

$$|\psi_+\rangle = \cos\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}|\varphi_1\rangle + \sin\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}|\varphi_2\rangle, \quad (\text{C-9a})$$

$$|\psi_-\rangle = -\sin\frac{\theta}{2}e^{-i\varphi/2}|\varphi_1\rangle + \cos\frac{\theta}{2}e^{i\varphi/2}|\varphi_2\rangle. \quad (\text{C-9b})$$

donde los ángulos  $\theta$  y  $\varphi$  se definen por:

$$\tan\theta = \frac{2|W_{12}|}{E_1 + W_{11} - E_2 - W_{22}}, \quad 0 \leq \theta < \pi, \quad (\text{C-10})$$

$$W_{21} = |W_{12}|e^{i\varphi}. \quad (\text{C-11})$$

## C-3. Aspecto dinámico: oscilación del sistema entre los dos estados no perturbados

### C-3-a. Evolución del vector de estado

Sea el vector de estado en el instante  $t$ :

$$|\psi(t)\rangle = a_1(t)|\varphi_1\rangle + a_2(t)|\varphi_2\rangle \quad (\text{C-22})$$

La ecuación de Schrödinger es:

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = (H_0 + W) |\psi(t)\rangle . \quad (\text{C-23})$$

Proyectando en  $|\varphi_1\rangle$  y  $|\varphi_2\rangle$ , con  $W_{11} = W_{22} = 0$ , obtenemos el sistema acoplado:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{da_1}{dt} &= E_1 a_1 + W_{12} a_2 , \\ i\hbar \frac{da_2}{dt} &= W_{21} a_1 + E_2 a_2 . \end{aligned} \quad (\text{C-24})$$

La solución se construye descomponiendo  $|\psi(0)\rangle$  en los autoestados  $|\psi_+\rangle, |\psi_-\rangle$  de  $H = H_0 + W$ :

$$|\psi(0)\rangle = \lambda |\psi_+\rangle + \mu |\psi_-\rangle , \quad (\text{C-25})$$

y asumiendo la condición inicial

$$|\psi(0)\rangle = |\varphi_1\rangle . \quad (\text{C-27})$$

### C-3-b. Cálculo de $\mathcal{P}_{12}(t)$ : fórmula de Rabi

Expandiendo  $|\psi(0)\rangle$  en la base  $\{|\psi_+\rangle, |\psi_-\rangle\}$  (invertir (C-9)), se tiene:

$$|\psi(0)\rangle = |\varphi_1\rangle = e^{i\varphi/2} \left[ \cos \frac{\theta}{2} |\psi_+\rangle - \sin \frac{\theta}{2} |\psi_-\rangle \right]. \quad (\text{C-28})$$

Entonces la evolución temporal es

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\varphi/2} \left[ \cos \frac{\theta}{2} e^{-iE_+t/\hbar} |\psi_+\rangle - \sin \frac{\theta}{2} e^{-iE_-t/\hbar} |\psi_-\rangle \right]. \quad (\text{C-29})$$

La amplitud de probabilidad de hallar el sistema en  $|\varphi_2\rangle$  es

$$\langle \varphi_2 | \psi(t) \rangle = e^{i\varphi/2} \left[ \cos \frac{\theta}{2} e^{-iE_+t/\hbar} \langle \varphi_2 | \psi_+ \rangle - \sin \frac{\theta}{2} e^{-iE_-t/\hbar} \langle \varphi_2 | \psi_- \rangle \right], \quad (\text{C-30})$$

y la probabilidad

$$\mathcal{P}_{12}(t) = |\langle \varphi_2 | \psi(t) \rangle|^2 = \frac{1}{2} \sin^2 \theta [1 - \cos((E_+ - E_-)t/\hbar)] = \sin^2 \theta \sin^2((E_+ - E_-)t/2\hbar). \quad (\text{C-31})$$

Usando además las expresiones de los ángulos  $\theta$  y  $\varphi$  [(C-12),(C-13)], se reescribe como

$$\mathcal{P}_{12}(t) = \frac{4|W_{12}|^2}{4|W_{12}|^2 + (E_1 - E_2)^2} \sin^2 \left[ t/(2\hbar) \sqrt{4|W_{12}|^2 + (E_1 - E_2)^2} \right]. \quad (\text{C-32})$$

Esta última es la conocida como *fórmula de Rabi*.

## Complemento JIV: Ejercicios

### Ejercicio 1

Considera una partícula de espín 1/2 de momento magnético  $\mathbf{M} = \gamma \mathbf{S}$ . El espacio de estados de espín está generado por los vectores  $|+\rangle$  y  $|-\rangle$ , autovectores de  $S_z$  con autovalores  $+\hbar/2$  y  $-\hbar/2$ . En  $t = 0$ , el estado del sistema es

$$|\psi(0)\rangle = |+\rangle .$$

1. Si en  $t = 0$  medimos el observable  $S_z$ , ¿qué resultados se pueden obtener y con qué probabilidades?
2. En lugar de realizar esa medición, dejamos que el sistema evolucione bajo la acción de un campo magnético uniforme paralelo a  $Oy$ , de módulo  $B_0$ . Calcula, en la base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ , el estado del sistema en tiempo  $t$ .
3. En ese instante medimos los observables  $S_x$ ,  $S_y$  y  $S_z$ . ¿Qué valores pueden obtenerse y con qué probabilidades? ¿Qué relación debe existir entre  $B_0$  y  $t$  para que alguno de los resultados sea absolutamente cierto? Da su interpretación física.

## Ejercicio 2

Considera de nuevo una partícula de espín 1/2 (misma notación).

1. En  $t = 0$  medimos  $S_y$  y hallamos  $+\hbar/2$ . ¿Cuál es el vector de estado  $|\psi(0)\rangle$  inmediatamente tras la medición?
2. Inmediatamente después aplicamos un campo magnético uniforme dependiente del tiempo, paralelo a  $Oz$ , de modo que

$$H(t) = \omega_0(t) S_z.$$

Supón que  $\omega_0(t) = 0$  para  $t < 0$  y  $t > T$ , y que crece linealmente de 0 a  $\omega_0$  en el intervalo  $0 < t < T$  (siendo  $T$  un parámetro de tiempo dado). Demuestra que, en cualquier instante  $t$ , el estado puede escribirse

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ e^{i\theta(t)} |+\rangle + i e^{-i\theta(t)} |-\rangle \right],$$

donde  $\theta(t)$  es una función real de  $t$  (a calcular).

3. En  $t = T$  medimos  $S_y$ . ¿Qué resultados pueden hallarse y con qué probabilidades? Determina la relación entre  $\omega_0$  y  $T$  para garantizar un resultado único. Da su interpretación física.

### Solución:

1. Tras medir  $S_y = +\hbar/2$  el sistema queda en el autovector correspondiente,

$$|\psi(0)\rangle = |+\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + i |-\rangle).$$

2. Como  $[H(t), H(t')] = 0$ , la evolución es

$$U(t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t H(t') dt'\right).$$

Dado que  $H(t) |\pm\rangle = \pm \frac{\hbar}{2} \omega_0(t) |\pm\rangle$ , definimos

$$\theta(t) = \frac{1}{2} \int_0^t \omega_0(t') dt',$$

y se obtiene

$$U(t) |+\rangle = e^{-i\theta(t)} |+\rangle, \quad U(t) |-\rangle = e^{i\theta(t)} |-\rangle.$$

Aplicando a  $|\psi(0)\rangle$ :

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( e^{-i\theta(t)} |+\rangle + i e^{i\theta(t)} |-\rangle \right).$$

Redefiniendo  $\theta \rightarrow -\theta$  recuperamos la forma deseada.

3. Escribimos las proyecciones sobre  $|\pm\rangle_y$ :

$$|+\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle + i |-\rangle), \quad |-\rangle_y = \frac{1}{\sqrt{2}} (|+\rangle - i |-\rangle).$$

Entonces

$$P\left(+\frac{\hbar}{2}\right) = |\langle +_y | \psi(T) \rangle|^2 = \cos^2 \theta(T), \quad P\left(-\frac{\hbar}{2}\right) = \sin^2 \theta(T).$$

Para que el resultado sea siempre  $+\hbar/2$  se pide

$$\cos^2 \theta(T) = 1 \implies \theta(T) = n\pi \implies \int_0^T \omega_0(t) dt = 2n\pi.$$

Si  $\omega_0(t) = \frac{\omega_0}{T} t$  en  $[0, T]$ , entonces  $\int_0^T \omega_0(t) dt = \frac{1}{2} \omega_0 T$ , y la condición es  $\frac{1}{2} \omega_0 T = 2n\pi$ , esto es  $\omega_0 T = 4n\pi$ . Físicamente, equivale a girar el espín alrededor de  $Oz$  un número entero de vueltas completas, de modo que el autovector de  $S_y$  regresa a sí mismo.

### Ejercicio 3

Considera una partícula de espín 1/2 en un campo magnético  $\mathbf{B}_0$  con componentes

$$B_x = \frac{1}{\sqrt{2}} B_0, \quad B_y = 0, \quad B_z = \frac{1}{\sqrt{2}} B_0.$$

1. Calcula la matriz que representa el Hamiltoniano  $H = \gamma \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}_0$  en la base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  de  $S_z$ .
2. Halla los autovalores y autovectores de  $H$ .
3. Si en  $t = 0$  el sistema está en el estado  $|-\rangle$ , ¿qué valores de energía se obtienen y con qué probabilidades?
4. Determina el vector de estado  $|\psi(t)\rangle$  en tiempo  $t$ . En ese instante medimos  $S_x$ : calcula el valor medio de la medición y explica su interpretación geométrica.

$$H = \frac{\omega_0}{\sqrt{2}} (S_x + S_z) = \frac{\hbar \omega_0}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Mientras que las energías y estados pedidos en b son, respectivamente:

$$E_+ = +\frac{\hbar \omega_0}{2}, \quad E_- = -\frac{\hbar \omega_0}{2}$$

$$|\psi_+\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} |-\rangle = \cos \frac{\pi}{8} |+\rangle + \sin \frac{\pi}{8} |-\rangle$$

$$|\psi_-\rangle = -\sin \frac{\theta}{2} |+\rangle + \cos \frac{\theta}{2} |-\rangle = -\sin \frac{\pi}{8} |+\rangle + \cos \frac{\pi}{8} |-\rangle$$

En d, tras propagar, llegamos a

$$|\psi(t)\rangle = \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\omega_0 t/2} |\psi_+\rangle + \cos \frac{\theta}{2} e^{i\omega_0 t/2} |\psi_-\rangle$$

Y el valor esperado requerido es

$$\langle S_x \rangle = -\frac{\hbar}{4} (1 - \cos \omega_0 t) = -\frac{\hbar}{4} + \frac{\hbar}{4} \cos \omega_0 t$$

### Ejercicio 4

Considera el dispositivo experimental descrito en § B-2-b del Capítulo IV: un haz de átomos de espín 1/2 atraviesa un “polarizador” que selecciona la dirección que forma un ángulo  $\theta$  con el eje  $Oz$  en el plano  $xOz$ , y luego un “analyzer” que mide la componente  $S_z$ . Entre polarizador y analyzer, sobre una longitud  $L$  del haz, se aplica un campo magnético uniforme  $\mathbf{B}_0 \parallel Oz$ . Sea  $v$  la velocidad de los átomos y  $T = L/v$  el tiempo de interacción. Definimos

$$\omega_0 = -\gamma B_0.$$

1. ¿Cuál es el vector de estado  $|\psi_i\rangle$  de un espín al entrar en el analyzer?
2. Demuestra que, al medir en el analyzer, la probabilidad de encontrar  $+\hbar/2$  es

$$\frac{1}{2} (1 + \cos \theta \cos \omega_0 T),$$

y la de encontrar  $-\hbar/2$  es

$$\frac{1}{2} (1 - \cos \theta \cos \omega_0 T).$$

Da una interpretación física.

3. (Esta parte y la siguiente implican el concepto de operador densidad, definido en el Complemento EIV.) Demuestra que la matriz de densidad  $\rho_1$  de una partícula al entrar en el analizador, en la base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ , es

$$\rho_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos \theta \cos(\omega_0 T) & \sin \theta + i \cos \theta \sin(\omega_0 T) \\ \sin \theta - i \cos \theta \sin(\omega_0 T) & 1 - \cos \theta \cos(\omega_0 T) \end{pmatrix}.$$

Calcula  $Tr(\rho_1 S_x)$ ,  $Tr(\rho_1 S_y)$  y  $Tr(\rho_1 S_z)$ . ¿Describe  $\rho_1$  un estado puro?

4. Ahora supongamos que la velocidad de un átomo es una variable aleatoria, y por tanto el tiempo de vuelo  $T$  sólo se conoce con una incertidumbre  $\Delta T$ . Además, el campo  $\mathbf{B}_0$  es tan intenso que

$$\omega_0 \Delta T \gg 1.$$

Los posibles valores del producto  $\omega_0 T$  (módulo  $2\pi$ ) son entonces todos los comprendidos entre 0 y  $2\pi$ , equiprobables.

- ¿Cuál es el operador densidad  $\rho_2$  de un átomo en el instante en que entra en el analizador? ¿Corresponde  $\rho_2$  a un estado puro?
- Calcula  $Tr(\rho_2 S_x)$ ,  $Tr(\rho_2 S_y)$  y  $Tr(\rho_2 S_z)$ . ¿Cuál es tu interpretación? ¿En qué caso el operador densidad describe un espín completamente polarizado? ¿Uno completamente no polarizado?
- Describe cualitativamente los fenómenos observados a la salida del analizador al variar  $\omega_0$  desde 0 hasta el régimen  $\omega_0 \Delta T \gg 1$ .

### Ejercicio 5. Operador de evolución de un espín 1/2 (Complemento FIII)

Considera un espín 1/2 de momento magnético  $\mathbf{M} = \gamma \mathbf{S}$  en un campo magnético  $\mathbf{B}_0$  de componentes

$$B_x = -\frac{\omega_x}{\gamma}, \quad B_y = -\frac{\omega_y}{\gamma}, \quad B_z = -\frac{\omega_z}{\gamma}.$$

Definimos

$$\omega_0 = \sqrt{\omega_x^2 + \omega_y^2 + \omega_z^2}.$$

1. Demuestra que el operador de evolución es

$$U(t, 0) = \exp(iMt),$$

donde

$$M = \frac{1}{\hbar} (\omega_x S_x + \omega_y S_y + \omega_z S_z) = \frac{1}{2} (\omega_x \sigma_x + \omega_y \sigma_y + \omega_z \sigma_z).$$

Calcula la matriz de  $M$  en la base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  de autovectores de  $S_z$ , y muestra que

$$M^2 = \frac{1}{4} (\omega_x^2 + \omega_y^2 + \omega_z^2) = \left(\frac{\omega_0}{2}\right)^2.$$

2. Escribe  $U(t, 0)$  en la forma

$$U(t, 0) = \cos \frac{\omega_0 t}{2} - \frac{2i}{\omega_0} M \sin \frac{\omega_0 t}{2}.$$

3. Supón que en  $t = 0$  el espín está en  $|\psi(0)\rangle = |+\rangle$ . La probabilidad de hallarlo en  $|+\rangle$  a tiempo  $t$  es

$$\mathcal{P}_{++}(t) = |\langle + | U(t, 0) | + \rangle|^2.$$

Usando la forma de  $U(t, 0)$ , demuestra que

$$\mathcal{P}_{++}(t) = 1 - \frac{\omega_x^2 + \omega_y^2}{\omega_0^2} \sin^2 \frac{\omega_0 t}{2}.$$

Proporciona una interpretación geométrica de este resultado.



## Ejercicio 6

Considera el sistema de dos espines  $1/2$ ,  $\mathbf{S}_1$  y  $\mathbf{S}_2$ , en la base de cuatro vectores  $\{|+, +\rangle, |+, -\rangle, |-, +\rangle, |-, -\rangle\}$  definida en el Complemento DIV. En  $t = 0$ , el estado del sistema es

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{2} |+, +\rangle + \frac{1}{2} |+, -\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |-, -\rangle.$$

1. En  $t = 0$  se mide  $S_{1z}$ : ¿cuál es la probabilidad de obtener  $-\hbar/2$ ? ¿Cuál es el vector de estado tras la medición? Si a continuación medimos  $S_{1x}$ , ¿qué resultados pueden obtenerse y con qué probabilidades? Responde de igual forma si la medición de  $S_{1z}$  hubiera dado  $+\hbar/2$ .
2. Cuando el sistema está en el estado  $|\psi(0)\rangle$ , se miden simultáneamente  $S_{1x}$  y  $S_{2z}$ . ¿Cuál es la probabilidad de encontrar resultados opuestos? ¿Y resultados idénticos?
3. En lugar de las mediciones anteriores, dejamos que el sistema evolucione bajo el Hamiltoniano

$$H = \omega_1 S_{1z} + \omega_2 S_{2z}.$$

Determina el estado  $|\psi(t)\rangle$  a tiempo  $t$ . Calcula en ese instante los valores medios  $\langle S_1 \rangle$  y  $\langle S_2 \rangle$ . Da una interpretación física.

4. Demuestra que las longitudes de los vectores  $\langle S_1 \rangle$  y  $\langle S_2 \rangle$  son menores que  $\hbar/2$ . ¿Qué forma debe tener  $|\psi(0)\rangle$  para que cada una de esas longitudes sea exactamente  $+\hbar/2$ ?

## Ejercicio 7

Considera el mismo sistema de dos espines  $1/2$  del ejercicio anterior; el espacio de estados está generado por la base  $\{|\pm, \pm\rangle\}$ .

1. Escribe la matriz  $4 \times 4$  que representa, en esta base, el operador  $S_{1y}$ . ¿Cuáles son sus autovalores y autovectores?
2. El estado normalizado del sistema es

$$|\psi\rangle = \alpha |+, +\rangle + \beta |+, -\rangle + \gamma |-, +\rangle + \delta |-, -\rangle,$$

con  $\alpha, \beta, \gamma, \delta \in \mathbb{C}$ . Se miden simultáneamente  $S_{1x}$  y  $S_{2y}$ . ¿Qué resultados pueden hallarse y con qué probabilidades? ¿Cómo cambian estas probabilidades si  $|\psi\rangle$  es un producto tensorial de un estado del primer espín y un estado del segundo espín?

3. Repite las preguntas del apartado anterior para una medición de  $S_{1y}$  y  $S_{2y}$ .
4. En lugar de realizar las mediciones anteriores, medimos sólo  $S_{2y}$ . Calcula, primero a partir de los resultados del apartado b) y luego de los del c), la probabilidad de encontrar  $-\hbar/2$ .

## Ejercicio 8

Considera un electrón en una molécula lineal triatómica formada por tres átomos equidistantes:

$$A - B - C.$$

Usamos  $|\varphi_A\rangle, |\varphi_B\rangle, |\varphi_C\rangle$  para denotar tres estados ortonormales localizados en los núcleos de los átomos  $A, B$  y  $C$ . Nos restringimos al subespacio generado por  $\{|\varphi_A\rangle, |\varphi_B\rangle, |\varphi_C\rangle\}$ . Si despreciamos el salto del electrón entre núcleos, su energía viene dada por

$$H_0 |\varphi_A\rangle = E_0 |\varphi_A\rangle, \quad H_0 |\varphi_B\rangle = E_0 |\varphi_B\rangle, \quad H_0 |\varphi_C\rangle = E_0 |\varphi_C\rangle.$$

El acoplamiento entre estos estados lo describe un Hamiltoniano adicional  $W$ :

$$W |\varphi_A\rangle = -a |\varphi_B\rangle, \quad W |\varphi_B\rangle = -a(|\varphi_A\rangle + |\varphi_C\rangle), \quad W |\varphi_C\rangle = -a |\varphi_B\rangle,$$

donde  $a > 0$  es una constante real. El Hamiltoniano total es

$$H = H_0 + W.$$

1. Calcula las energías y los estados estacionarios (autovectores) de  $H$ .
2. Si en  $t = 0$  el electrón está en el estado  $|\varphi_A\rangle$ , discute cualitativamente su localización en tiempos posteriores. ¿Hay instantes  $t$  en que esté perfectamente localizado en  $A$ ,  $B$  o  $C$ ?
3. Sea el observable  $D$  cuyos autovectores son  $|\varphi_A\rangle, |\varphi_B\rangle, |\varphi_C\rangle$  con autovalores  $-d, 0, +d$ , respectivamente. Si se mide  $D$  en tiempo  $t$ , ¿qué valores pueden obtenerse y con qué probabilidades?
4. Si el estado inicial es arbitrario, ¿cuáles son las frecuencias de Bohr que aparecen en la evolución de  $\langle D \rangle$ ? Da una interpretación física de estas frecuencias como las de las radiaciones electromagnéticas que la molécula puede absorber o emitir.

### Ejercicio 9.a Definición y espectro de $R$

Sea  $\{|\varphi_n\rangle\}_{n=1}^6$  una base ortonormal. Definimos el operador  $R$  por:

$$R|\varphi_1\rangle = |\varphi_2\rangle, \quad R|\varphi_2\rangle = |\varphi_3\rangle, \quad \dots, \quad R|\varphi_6\rangle = |\varphi_1\rangle.$$

Buscamos  $\lambda \in \mathbb{C}$  y  $|\psi\rangle \neq 0$  tales que

$$R|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle.$$

Si escribimos  $|\psi\rangle = \sum_{n=1}^6 c_n |\varphi_n\rangle$ , la ecuación anterior da el sistema

$$c_1 = \lambda c_6, \quad c_2 = \lambda c_1, \quad \dots, \quad c_6 = \lambda c_5.$$

De ello se deduce  $\lambda^6 = 1$ , es decir

$$\lambda_k = e^{2\pi i k/6}, \quad k = 0, 1, \dots, 5.$$

Los autovectores normalizados son

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} \sum_{n=1}^6 e^{-2\pi i k(n-1)/6} |\varphi_n\rangle,$$

que forman un sistema ortonormal y completo en el espacio de estados.

### Ejercicio 9.b Hamiltoniano de «benceno» y conmutación con $R$

Despreciando el salto del electrón entre átomos, el Hamiltoniano no perturbado es

$$H_0 |\varphi_n\rangle = E_0 |\varphi_n\rangle, \quad n = 1, \dots, 6.$$

La perturbación que permite el salto sólo entre vecinos se escribe

$$W|\varphi_1\rangle = -a(|\varphi_6\rangle + |\varphi_2\rangle), \quad W|\varphi_2\rangle = -a(|\varphi_1\rangle + |\varphi_3\rangle), \quad \dots, \quad W|\varphi_6\rangle = -a(|\varphi_5\rangle + |\varphi_1\rangle).$$

El Hamiltoniano total es  $H = H_0 + W$ . Como  $R$  permuta cíclicamente los  $|\varphi_n\rangle$  y  $H_0$  es trivial en esa base, se comprueba fácilmente que

$$[R, H] = 0.$$

Por tanto, los autovectores comunes de  $R$  y  $H$  son precisamente los  $|\psi_k\rangle$  hallados en el apartado anterior. Sus energías son

$$E_k = E_0 + \langle \psi_k | W | \psi_k \rangle = E_0 - 2a \cos \frac{2\pi k}{6}, \quad k = 0, 1, \dots, 5.$$

En ninguno de estos estados el electrón queda localizado en un solo átomo; su función de onda se extiende a todo el anillo. Estos resultados son esenciales para explicar el comportamiento electrónico del benceno.

### A-3. Propiedades generales del Hamiltoniano cuántico

En mecánica cuántica, las coordenadas clásicas  $x$  y  $p$  se reemplazan por los operadores  $\hat{X}$  y  $\hat{P}$ , que cumplen la relación de conmutación:

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar \quad (\text{A-14})$$

Partiendo de la forma clásica

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2,$$

se obtiene el operador Hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{X}^2. \quad (\text{A-15})$$

Al ser  $\hat{H}$  independiente del tiempo, resolvemos la ecuación de autovalores

$$\hat{H} |\varphi\rangle = E |\varphi\rangle \quad (\text{A-16})$$

que en representación  $x$  toma la forma

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right] \varphi(x) = E \varphi(x). \quad (\text{A-17})$$

De aquí se deducen las siguientes propiedades:

1. Los valores propios de  $\hat{H}$  son positivos, pues si  $V(x) \geq V_m$  entonces

$$E > V_m. \quad (\text{A-18})$$

2. Las autofunciones tienen paridad definida, dado que el potencial es par:

$$V(-x) = V(x). \quad (\text{A-19})$$

3. El espectro es discreto, ya que el movimiento queda confinado en una región limitada del eje  $x$ .

### B-1. Notación y operadores adimensionales

Para simplificar la resolución, definimos los operadores adimensionales

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x}, \quad \hat{P} = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} \hat{p}, \quad (\text{B-1})$$

que satisfacen el conmutador canónico

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i. \quad (\text{B-2})$$

El Hamiltoniano se factoriza como

$$H = \hbar\omega \hat{H}, \quad (\text{B-3})$$

donde el operador adimensional es

$$\hat{H} = \frac{1}{2} (\hat{X}^2 + \hat{P}^2). \quad (\text{B-4})$$

Buscamos las soluciones de la ecuación de autovalores

$$\hat{H} |\varphi_n\rangle = \varepsilon_n |\varphi_n\rangle. \quad (\text{B-5})$$

### B-1-a. Operador $a^\dagger a$ y Hamiltoniano adimensional

Partiendo de las definiciones

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}),$$

calculamos primero

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= \frac{1}{2}(\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P}) \\ &= \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 + i[\hat{X}, \hat{P}]) \\ &= \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 - 1) \end{aligned} \tag{B-10}$$

Comparando con la forma adimensional del Hamiltoniano  $\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2)$  (Ecuación (B-4)), obtenemos

$$\hat{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}(\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P}) + \frac{1}{2} \tag{B-11}$$

y, de manera análoga,

$$\hat{H} = a a^\dagger - \frac{1}{2}. \tag{B-12}$$

Introducimos entonces el operador número

$$N = a^\dagger a, \tag{B-13}$$

que es hermítico, pues

$$N^\dagger = (a^\dagger a)^\dagger = a^\dagger a = N. \tag{B-14}$$

Por tanto, de (B-11) se sigue

$$\hat{H} = N + \frac{1}{2}. \tag{B-15}$$

### B-1-b. Operadores $a$ , $a^\dagger$ y $N$

Si intentáramos factorizar  $\hat{X}^2 + \hat{P}^2$  como si  $\hat{X}$ ,  $\hat{P}$  fuesen números, fallaríamos por la no conmutatividad. En su lugar, definimos

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}), \tag{B-6a}$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}). \tag{B-6b}$$

Invertir estas relaciones da

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a), \tag{B-7a}$$

$$\hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a). \tag{B-7b}$$

Su conmutador se calcula con (B-6) y la relación canónica  $[\hat{X}, \hat{P}] = i$ :

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] &= \frac{1}{2}[\hat{X} + i\hat{P}, \hat{X} - i\hat{P}] \\ &= \frac{i}{2}[\hat{P}, \hat{X}] - \frac{i}{2}[\hat{X}, \hat{P}] = 1. \end{aligned} \tag{B-8}$$

Es decir,

$$[a, a^\dagger] = 1, \tag{B-9}$$

que es equivalente a la conmutación canónica  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$ .“

### B-1-a. Operador $a^\dagger a$ y Hamiltoniano adimensional

Partiendo de las definiciones

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}),$$

calculamos primero

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= \frac{1}{2}(\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P}) \\ &= \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 + i[\hat{X}, \hat{P}]) \\ &= \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 - 1) \end{aligned} \quad (\text{B-10})$$

Comparando con la forma adimensional del Hamiltoniano  $\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{X}^2 + \hat{P}^2)$  (Ecuación (B-4)), obtenemos

$$\hat{H} = a^\dagger a + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}(\hat{X} - i\hat{P})(\hat{X} + i\hat{P}) + \frac{1}{2} \quad (\text{B-11})$$

y, de manera análoga,

$$\hat{H} = a a^\dagger - \frac{1}{2}. \quad (\text{B-12})$$

Introducimos entonces el operador número

$$N = a^\dagger a, \quad (\text{B-13})$$

que es hermítico, pues

$$N^\dagger = (a^\dagger a)^\dagger = a^\dagger a = N. \quad (\text{B-14})$$

Por tanto, de (B-11) se sigue

$$\hat{H} = N + \frac{1}{2}. \quad (\text{B-15})$$

### B-1-b. Operadores $a$ , $a^\dagger$ y $N$

Si intentáramos factorizar  $\hat{X}^2 + \hat{P}^2$  como si  $\hat{X}$ ,  $\hat{P}$  fuesen números, fallaríamos por la conmutatividad. En su lugar, definimos

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} + i\hat{P}), \quad (\text{B-6a})$$

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{X} - i\hat{P}). \quad (\text{B-6b})$$

Invertir estas relaciones da

$$\hat{X} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a), \quad (\text{B-7a})$$

$$\hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a). \quad (\text{B-7b})$$

Su conmutador se calcula con (B-6) y la relación canónica  $[\hat{X}, \hat{P}] = i$ :

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] &= \frac{1}{2}[\hat{X} + i\hat{P}, \hat{X} - i\hat{P}] \\ &= \frac{i}{2}[\hat{P}, \hat{X}] - \frac{i}{2}[\hat{X}, \hat{P}] = 1. \end{aligned} \quad (\text{B-8})$$

Es decir,

$$[a, a^\dagger] = 1, \quad (\text{B-9})$$

que es equivalente a la conmutación canónica  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$ .

### B-2. Determinación del espectro

Cuando se resuelve la ecuación de autovalores de  $N$ ,

$$N |\varphi_\nu\rangle = \nu |\varphi_\nu\rangle, \quad (\text{B-18})$$

se demuestra que  $|\varphi_\nu\rangle$  es también autovector de  $\hat{H}$  con autovalor

$$E_\nu = (\nu + \frac{1}{2})\hbar, \quad (\text{B-19})$$

pues  $\hat{H} = N + \frac{1}{2}$  [Ecuaciones (B-3) y (B-15)].

### B-2-a. Lemas

**Lema I (propiedad de los autovalores de  $N$ ).** Los autovalores  $\nu$  de  $N = a^\dagger a$  son no negativos. De hecho, para cualquier autovector  $|\varphi_\nu\rangle$  de  $N$ :

$$\|a|\varphi_\nu\rangle\|^2 = \langle\varphi_\nu|a^\dagger a|\varphi_\nu\rangle = \langle\varphi_\nu|N|\varphi_\nu\rangle = \nu\langle\varphi_\nu|\varphi_\nu\rangle \geq 0. \quad (\text{B-20,B-21})$$

Como  $\langle\varphi_\nu|\varphi_\nu\rangle > 0$ , se obtiene  $\nu \geq 0$ .

**Lema II (propiedades de  $a|\varphi_\nu\rangle$ ).** Sea  $|\varphi_\nu\rangle \neq 0$  autovector de  $N$  con autovalor  $\nu$ ; definamos  $|\chi\rangle = a|\varphi_\nu\rangle$ . Entonces: (i) Si  $\nu = 0$ ,  $\|\chi\rangle\|^2 = \nu\|\varphi_\nu\|^2 = 0$  y  $|\chi\rangle = 0$ . (ii) Si  $\nu > 0$ ,  $\|\chi\rangle\|^2 > 0$  y, usando  $[N, a] = -a$  [(B-17a)],

$$N|\chi\rangle = (aN + [N, a])|\varphi_\nu\rangle = (\nu - 1)|\chi\rangle, \quad (\text{B-27})$$

de modo que  $|\chi\rangle$  es un autovector de  $N$  con autovalor  $\nu - 1$ .

**Lema III (propiedades de  $a^\dagger|\varphi_\nu\rangle$ ).** Sea  $|\varphi_\nu\rangle \neq 0$  autovector de  $N$  con  $\nu \geq 0$ ; definamos  $|\chi'\rangle = a^\dagger|\varphi_\nu\rangle$ . Entonces: (i)  $\|\chi'\rangle\|^2 = \langle\varphi_\nu|aa^\dagger|\varphi_\nu\rangle = (\nu + 1)\|\varphi_\nu\|^2 > 0$ , luego  $|\chi'\rangle \neq 0$ . (ii) Con  $[N, a^\dagger] = a^\dagger$  [(B-17b)] se halla

$$N|\chi'\rangle = (a^\dagger N + [N, a^\dagger])|\varphi_\nu\rangle = (\nu + 1)|\chi'\rangle. \quad (\text{B-29})$$

### B-2-b. El espectro de $N$ son enteros no negativos

Sea  $\nu$  un autovalor de  $N$  y  $|\varphi_\nu\rangle$  su autovector.

– Si  $\nu \notin \mathbb{Z}$ , existe  $k \in \mathbb{Z}$  tal que  $\nu - k < 0$  (). Aplicando sucesivamente  $a$  a  $|\varphi_\nu\rangle$ , por el lema II se obtienen autovectores de autovalores  $\nu - 1, \nu - 2, \dots, \nu - k < 0$ , lo cual contradice el lema I.

– Si  $\nu = n \in \{0, 1, 2, \dots\}$ , la cadena

$$|\varphi_n\rangle, a|\varphi_n\rangle, \dots, a^n|\varphi_n\rangle, a^{n+1}|\varphi_n\rangle = 0 \quad (\text{B-31,B-33})$$

termina en cero y no produce autovalores negativos.

Por tanto, los únicos autovalores posibles son los enteros  $\nu = 0, 1, 2, \dots$

### B-2-c. Interpretación de los operadores $a$ y $a^\dagger$

Partiendo de un autovector  $|\varphi_n\rangle$  de  $N$  (y por tanto de  $\hat{H}$ ) con

$$\hat{H}|\varphi_n\rangle = (n + \frac{1}{2})\hbar|\varphi_n\rangle,$$

la acción de  $a$  y  $a^\dagger$  satisface:

$$a|\varphi_n\rangle \propto |\varphi_{n-1}\rangle, \quad a^\dagger|\varphi_n\rangle \propto |\varphi_{n+1}\rangle.$$

Así,  $a$  “aniquila” un quantum  $\hbar$  de energía y  $a^\dagger$  lo “crea”, de ahí su nombre de operadores de destrucción y creación.

### B-2-d. Niveles de energía

De lo anterior y la relación (B-19) se concluye que los niveles de energía del oscilador armónico 1-D son

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{B-34})$$

con separación  $\Delta E = \hbar\omega$  y nivel de cero punto  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ . ““

## B-2. Determinación del espectro

Cuando se resuelve la ecuación de autovalores de  $N$ ,

$$N |\varphi_\nu\rangle = \nu |\varphi_\nu\rangle, \quad (\text{B-18})$$

se demuestra que  $|\varphi_\nu\rangle$  es también autovector de  $\hat{H}$  con autovalor

$$E_\nu = (\nu + \frac{1}{2})\hbar, \quad (\text{B-19})$$

pues  $\hat{H} = N + \frac{1}{2}$  [Ecuaciones (B-3) y (B-15)].

### B-2-a. Lemas

**Lema I (propiedad de los autovalores de  $N$ ).** Los autovalores  $\nu$  de  $N = a^\dagger a$  son no negativos. De hecho, para cualquier autovector  $|\varphi_\nu\rangle$  de  $N$ :

$$\|a |\varphi_\nu\rangle\|^2 = \langle \varphi_\nu | a^\dagger a |\varphi_\nu\rangle = \langle \varphi_\nu | N |\varphi_\nu\rangle = \nu \langle \varphi_\nu | \varphi_\nu\rangle \geq 0. \quad (\text{B-20,B-21})$$

Como  $\langle \varphi_\nu | \varphi_\nu\rangle > 0$ , se obtiene  $\nu \geq 0$ .

**Lema II (propiedades de  $a |\varphi_\nu\rangle$ ).** Sea  $|\varphi_\nu\rangle \neq 0$  autovector de  $N$  con autovalor  $\nu$ ; definamos  $|\chi\rangle = a |\varphi_\nu\rangle$ . Entonces: (i) Si  $\nu = 0$ ,  $\| |\chi\rangle \|^2 = \nu \|\varphi_\nu\|^2 = 0$  y  $|\chi\rangle = 0$ . (ii) Si  $\nu > 0$ ,  $\| |\chi\rangle \|^2 > 0$  y, usando  $[N, a] = -a$  [(B-17a)],

$$N |\chi\rangle = (aN + [N, a]) |\varphi_\nu\rangle = (\nu - 1) |\chi\rangle, \quad (\text{B-27})$$

de modo que  $|\chi\rangle$  es un autovector de  $N$  con autovalor  $\nu - 1$ .

**Lema III (propiedades de  $a^\dagger |\varphi_\nu\rangle$ ).** Sea  $|\varphi_\nu\rangle \neq 0$  autovector de  $N$  con  $\nu \geq 0$ ; definamos  $|\chi'\rangle = a^\dagger |\varphi_\nu\rangle$ . Entonces: (i)  $\| |\chi'\rangle \|^2 = \langle \varphi_\nu | a a^\dagger |\varphi_\nu\rangle = (\nu + 1) \|\varphi_\nu\|^2 > 0$ , luego  $|\chi'\rangle \neq 0$ . (ii) Con  $[N, a^\dagger] = a^\dagger$  [(B-17b)] se halla

$$N |\chi'\rangle = (a^\dagger N + [N, a^\dagger]) |\varphi_\nu\rangle = (\nu + 1) |\chi'\rangle. \quad (\text{B-29})$$

### B-2-b. El espectro de $N$ son enteros no negativos

Sea  $\nu$  un autovalor de  $N$  y  $|\varphi_\nu\rangle$  su autovector.

– Si  $\nu \notin \mathbb{Z}$ , existe  $k \in \mathbb{Z}$  tal que  $\nu - k < 0$ . Aplicando sucesivamente  $a$  a  $|\varphi_\nu\rangle$ , por el lema II se obtienen autovectores de autovalores  $\nu - 1, \nu - 2, \dots, \nu - k < 0$ , lo cual contradice el lema I.

– Si  $\nu = n \in \{0, 1, 2, \dots\}$ , la cadena

$$|\varphi_n\rangle, a |\varphi_n\rangle, \dots, a^n |\varphi_n\rangle, a^{n+1} |\varphi_n\rangle = 0 \quad (\text{B-31,B-33})$$

termina en cero y no produce autovalores negativos.

Por tanto, los únicos autovalores posibles son los enteros  $\nu = 0, 1, 2, \dots$

### B-2-c. Interpretación de los operadores $a$ y $a^\dagger$

Partiendo de un autovector  $|\varphi_n\rangle$  de  $N$  (y por tanto de  $\hat{H}$ ) con

$$\hat{H} |\varphi_n\rangle = (n + \frac{1}{2})\hbar |\varphi_n\rangle,$$

la acción de  $a$  y  $a^\dagger$  satisface:

$$a |\varphi_n\rangle \propto |\varphi_{n-1}\rangle, \quad a^\dagger |\varphi_n\rangle \propto |\varphi_{n+1}\rangle.$$

Así,  $a$  “aniquila” un quantum  $\hbar$  de energía y  $a^\dagger$  lo “crea”, de ahí su nombre de operadores de destrucción y creación.

### B-2-d. Niveles de energía

De lo anterior y la relación (B-19) se concluye que los niveles de energía del oscilador armónico 1-D son

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{B-34})$$

con separación  $\Delta E = \hbar\omega$  y nivel de cero punto  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ .

## Complemento MV: Ejercicios

Considere un oscilador armónico de masa  $m$  y frecuencia angular  $\omega$ . En  $t = 0$ , el estado del oscilador es

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n |\varphi_n\rangle,$$

donde  $\{|\varphi_n\rangle\}$  son estados estacionarios con energías  $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ .

1. ¿Cuál es la probabilidad  $\mathcal{P}$  de que una medición de la energía realizada en un tiempo arbitrario  $t > 0$  dé un resultado mayor que  $2\hbar\omega$ ? Cuando  $\mathcal{P} = 0$ , ¿qué coeficientes  $c_n$  son distintos de cero?
2. A partir de ahora, suponga que sólo  $c_0$  y  $c_1$  son distintos de cero. Escriba la condición de normalización para  $|\psi(0)\rangle$  y exprese el valor medio  $\langle H \rangle$  de la energía en función de  $c_0$  y  $c_1$ . Con el requisito adicional  $\langle H \rangle = \hbar\omega$ , calcule  $|c_0|^2$  y  $|c_1|^2$ .
3. Dado que el estado normalizado  $|\psi(0)\rangle$  está definido sólo hasta un factor de fase global, fijamos este factor eligiendo  $c_0$  real y positivo. Sea

$$c_1 = |c_1| e^{i\theta_1}.$$

Suponemos además que  $\langle H \rangle = \hbar\omega$  y que  $\langle X \rangle = \frac{1}{2}\sqrt{\hbar/(m\omega)}$ . Calcule el ángulo de fase  $\theta_1$ .

4. Con  $|\psi(0)\rangle$  así determinado, escriba  $|\psi(t)\rangle$  para  $t > 0$  y calcule el valor de  $\theta_1$  en el instante  $t$ . Deduzca a partir de ello la evolución del valor medio  $\langle X \rangle(t)$  de la posición.

### Ejercicio 2. Oscilador armónico anisótropo en tres dimensiones

En un problema tridimensional, considere una partícula de masa  $m$  y con energía potencial

$$V(X, Y, Z) = \frac{m\omega^2}{2} \left[ \left(1 + \frac{2\lambda}{3}\right) (X^2 + Y^2) + \left(1 - \frac{4\lambda}{3}\right) Z^2 \right],$$

donde  $\omega \geq 0$  y  $0 \leq \lambda < \frac{3}{4}$ .

1. ¿Cuáles son los estados propios del Hamiltoniano y las energías correspondientes?
2. Calcule y discuta, en función de  $\lambda$ , la variación de la energía, la paridad y el grado de degeneración del estado fundamental y de los dos primeros estados excitados.

### Ejercicio 3. Oscilador armónico: dos partículas

Dos partículas de la misma masa  $m$ , con posiciones  $X_1, X_2$  y momentos  $P_1, P_2$ , se encuentran sometidas al mismo potencial unidimensional

$$V(X) = \frac{1}{2} m\omega^2 X^2.$$

Las partículas no interactúan entre sí.



1. Escriba el operador Hamiltoniano  $H$  del sistema de dos partículas. Demuestre que

$$H = H_1 + H_2,$$

donde  $H_1$  actúa sólo en el espacio de estados de la partícula 1 y  $H_2$  sólo en el de la partícula 2. Calcule los niveles de energía del sistema, sus grados de degeneración y las funciones de onda correspondientes.

2. ¿Forma  $H$  un conjunto completo de operadores que se conmutan mutuamente (C.S.C.O.)? ¿Y el conjunto  $\{H_1, H_2\}$ ? Denotemos por  $|\Phi_{n_1, n_2}\rangle$  los autovectores comunes de  $H_1$  y  $H_2$ . Escriba las relaciones de ortonormalidad y de cierre para los estados  $\{|\Phi_{n_1, n_2}\rangle\}$ .
3. Consideremos un sistema que, en  $t = 0$ , está en el estado

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{2}(|\Phi_{0,0}\rangle + |\Phi_{1,0}\rangle + |\Phi_{0,1}\rangle + |\Phi_{1,1}\rangle).$$

¿Qué resultados pueden obtenerse, y con qué probabilidades, si en ese instante medimos:

- la energía total del sistema  $H$ ,
- la energía de la partícula 1 ( $H_1$ ),
- la posición o la velocidad de la partícula 1?

#### Ejercicio 4 (continuación)

El sistema de dos partículas, en  $t = 0$ , se encuentra en el mismo estado  $|\psi(0)\rangle$  definido en el ejercicio anterior.

1. En  $t = 0$  se mide la energía total  $H$  y el resultado hallado es  $2\hbar\omega$ .
  - a) Calcule los valores medios de la posición, del momento y de la energía de la partícula 1 para un tiempo arbitrario  $t > 0$ . Repita para la partícula 2.
  - b) Para  $t > 0$  se mide la energía de la partícula 1. ¿Qué valores pueden encontrarse y con qué probabilidades? Haga la misma pregunta para la medición de la posición de la partícula 1 y dibuje la densidad de probabilidad resultante.
2. En lugar de medir la energía total  $H$ , en  $t = 0$  se mide la energía  $H_2$  de la partícula 2 y el resultado es  $\frac{1}{2}\hbar\omega$ . ¿Cómo cambian las respuestas a los apartados  $\alpha$ ) y  $\beta$ ) del punto a)?

#### Ejercicio 5. Operador de intercambio de dos partículas

Denotemos por  $\{|\Phi_{n_1, n_2}\rangle\}$  los autovectores comunes de  $H_1$  y  $H_2$ , con autovalores  $(n_1 + \frac{1}{2})\hbar\omega$  y  $(n_2 + \frac{1}{2})\hbar\omega$ . Definimos el operador de “intercambio” de partículas  $P_e$  mediante

$$P_e |\Phi_{n_1, n_2}\rangle = |\Phi_{n_2, n_1}\rangle.$$

1. Demuestra que  $P_e^{-1} = P_e$  y que  $P_e$  es unitario. ¿Cuáles son los autovalores de  $P_e$ ? Sea  $B$  un observable cualquiera y definamos

$$B' = P_e B P_e^\dagger.$$

Muestra que la condición  $B' = B$  (invarianza de  $B$  bajo el intercambio) es equivalente a  $[B, P_e] = 0$ .

2. Prueba que

$$P_e H_1 P_e^\dagger = H_2, \quad P_e H_2 P_e^\dagger = H_1.$$

¿Conmuta el Hamiltoniano total  $H = H_1 + H_2$  con  $P_e$ ? Calcula la acción de  $P_e$  sobre los observables  $X_1, P_1, X_2, P_2$ .

3. Construye una base de autovectores comunes a  $H$  y  $P_e$ . ¿Forman estos operadores un C.S.C.O.? ¿Qué sucede con el espectro de  $H$  y la degeneración de sus autovalores si se conservan únicamente los autovectores  $|\Phi\rangle$  de  $H$  que satisfacen

$$P_e |\Phi\rangle = -|\Phi\rangle ?$$

## Ejercicio 6. Oscilador armónico cargado en un campo eléctrico variable

Consideremos un oscilador armónico unidimensional de masa  $m$ , carga  $q$  y potencial

$$V(X) = \frac{1}{2} m \omega^2 X^2.$$

Si se aplica un campo eléctrico  $\mathcal{E}(t) \parallel Oz$ , el término de interacción es

$$W(t) = -q \mathcal{E}(t) X.$$

1. Expresa el Hamiltoniano total  $H(t) = H_0 + W(t)$  en términos de los operadores de creación y aniquilación  $a, a^\dagger$ . Calcule los conmutadores  $[a, H(t)]$  y  $[a^\dagger, H(t)]$ .

2. Sea

$$\alpha(t) = \langle \psi(t) | a | \psi(t) \rangle,$$

donde  $|\psi(t)\rangle$  es el estado normalizado de la partícula. Muestre, usando a), que

$$\frac{d}{dt} \alpha(t) = -i \omega \alpha(t) + i \lambda(t), \quad \lambda(t) = \frac{q}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \mathcal{E}(t).$$

Integre esta ecuación diferencial. A partir de  $\alpha(t)$ , determine los valores medios de la posición  $\langle X \rangle(t)$  y del momento  $\langle P \rangle(t)$ .

3. Sea  $|\psi(t)\rangle$  el estado normalizado de un oscilador armónico en un campo eléctrico variable, y definamos

$$\alpha(t) = \langle \psi(t) | a | \psi(t) \rangle.$$

4. Definimos el «ket desplazado»

$$|\phi(t)\rangle = [a - \alpha(t)] |\psi(t)\rangle.$$

Donde  $\alpha(t)$  es el valor calculado en el apartado b). Usando los resultados de a) y b) demuestre que

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\phi(t)\rangle = [H(t) + \hbar\omega] |\phi(t)\rangle.$$

¿Cómo varía con el tiempo la norma de  $|\phi(t)\rangle$ ?

5. Suponga que  $|\psi(0)\rangle$  es autovector de  $a$  con autovalor  $\alpha(0)$ . Demuestre que  $|\psi(t)\rangle$  sigue siendo autovector de  $a$  y calcule su autovalor  $\alpha(t)$ . A continuación, en  $t$  calcule el valor medio del Hamiltoniano no perturbado

$$H_0 = H(t) - W(t)$$

en función de  $\alpha(0)$ . Dé además las desviaciones cuadráticas RMS  $\Delta X$ ,  $\Delta P$  y  $\Delta H_0$ . ¿Cómo dependen de  $t$ ?

6. Suponga que en  $t = 0$  el oscilador está en el estado fundamental  $|\varphi_0\rangle$ . El campo eléctrico actúa entre 0 y  $T$  y luego se anula.

a) Para  $t > T$ , ¿cómo evolucionan los valores medios  $\langle X \rangle(t)$  y  $\langle P \rangle(t)$ ?

b) Aplicación: suponga que durante  $0 < t < T$  el campo es

$$\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos(\omega' t).$$

Discuta el fenómeno de resonancia en función de  $\Delta\omega = \omega' - \omega$ . Si para  $t > T$  se mide la energía, ¿qué resultados pueden encontrarse y con qué probabilidades?

## Ejercicio 7

Sea un oscilador armónico unidimensional con hamiltoniano  $H$  y estados estacionarios  $\{|\varphi_n\rangle\}$ , tales que

$$H |\varphi_n\rangle = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega |\varphi_n\rangle.$$

Definimos el operador de traslación

$$U(k) = e^{ikX},$$

con  $k \in \mathbb{R}$ .

1. ¿Es  $U(k)$  unitario? Demuestre que, para todo  $n$ , sus elementos de matriz satisfacen

$$\sum_{n'} |\langle \varphi_n | U(k) | \varphi_{n'} \rangle|^2 = 1.$$

2. Expresa  $U(k)$  en términos de los operadores  $a$  y  $a^\dagger$ . Utilice la fórmula de Glauber (fórmula (63) del Complemento B II) para escribir  $U(k)$  como producto de exponentes:

$$U(k) = \exp(A a^\dagger) \exp(B a) \exp(C),$$

determinando las constantes  $A, B, C$ .

3. Pruebe las siguientes identidades, para un parámetro  $\lambda \in \mathbb{C}$ :

$$e^{\lambda a} |\varphi_0\rangle = |\varphi_0\rangle, \quad \langle \varphi_n | e^{\lambda a^\dagger} |\varphi_0\rangle = \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}.$$

4. Encuentre la expresión, en términos de

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad \text{y} \quad E_\omega = \hbar\omega,$$

para el elemento de matriz

$$\langle \varphi_0 | U(k) | \varphi_n \rangle.$$

¿Qué sucede cuando  $k \rightarrow 0$ ? ¿Se podía haber predicho este resultado de forma directa?

## Ejercicio 8. Operador de evolución del oscilador armónico

Definimos

$$U(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} H t}, \quad H = \hbar\omega \left( a^\dagger a + \frac{1}{2} \right).$$

1. Defina los operadores en Heisenberg

$$\tilde{a}(t) = U^\dagger(t, 0) a U(t, 0), \quad \tilde{a}^\dagger(t) = U^\dagger(t, 0) a^\dagger U(t, 0).$$

Calculando su acción sobre los autovectores  $|\varphi_n\rangle$  de  $H$ , obtenga las expresiones de  $\tilde{a}(t)$  y  $\tilde{a}^\dagger(t)$  en función de  $a$  y  $a^\dagger$ .

2. Calcule los operadores

$$\tilde{X}(t) = U^\dagger(t, 0) X U(t, 0), \quad \tilde{P}(t) = U^\dagger(t, 0) P U(t, 0).$$

¿Cómo pueden interpretarse físicamente las relaciones obtenidas?

3. Demuestre que

$$U^\dagger\left(\frac{\pi}{2\omega}, 0\right) |x\rangle$$

es un autovector del momento  $P$  y especifique su autovalor. De igual modo, pruebe que

$$U^\dagger\left(\frac{\pi}{2\omega}, 0\right) |p\rangle$$

es un autovector de la posición  $X$ .

4. En  $t = 0$ , la función de onda del oscilador es  $\psi(x, 0)$ . ¿Cómo puede obtenerse a partir de  $\psi(x, 0)$  la función de onda  $\psi(x, t_q)$  en los tiempos

$$t_q = \frac{q\pi}{2\omega}, \quad q \in \mathbb{N}^+?$$

5. Elija para  $\psi(x, 0)$  la función de onda  $\varphi_n(x)$  correspondiente a un estado estacionario. A partir de la pregunta anterior, derive la relación que debe existir entre  $\varphi_n(x)$  y su transformada de Fourier  $\tilde{\varphi}_n(p)$ .
6. Describa cualitativamente la evolución de la función de onda en los siguientes casos: (i)  $\psi(x, 0) = e^{ikx}$  con  $k \in \mathbb{R}$ . (ii)  $\psi(x, 0) = e^{-\rho x}$  con  $\rho > 0$ .

(iii)

$$\psi(x, 0) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{a}}, & -\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}, \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

(iv)  $\psi(x, 0) = e^{-\rho^2 x^2}$  con  $\rho \in \mathbb{R}$ .

## Conclusión

El estudio del espín 1/2 ejemplifica claramente los postulados de la mecánica cuántica: preparación de estados, probabilidades de medición y evolución temporal gobernada por el Hamiltoniano.