

## 6. Consecuencias físicas de los postulados. Ejemplos

- 1) Evolución temporal. Ejemplo
- 2) Corriente de probabilidad
- 3) Valor “esperado”. Desviación cuadrática media. Relación de incertidumbre.
- 4) Evolución de los valores medios. Teorema de Ehrenfest. Mecánica Clásica.
- 5) Relación de incertidumbre energía-tiempo
- 6) Oscilador armónico. Operadores  $a$ ,  $a^+$  y  $N$ . Propiedades.
- 7) Partículas con spin  $\frac{1}{2}$
- 8) Dos spines  $\frac{1}{2}$ . Producto tensorial de espacios.

# 1. Evolución temporal. $H$ indepte del tiempo

El 6° postulado daba la ecuación diferencial que regula la evolución temporal

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H(t)|\psi(t)\rangle \quad (1)$$

EL caso más interesante y simple ocurre si  $H$  no depende explícitamente del tiempo.

Supongamos que tenemos una base ortonormal  $\{|u_n\rangle\}$  de vectores propios del hamiltoniano (vectores constantes en el tiempo por tanto) con autovalores  $E_n$  (frecuentemente energías)

Escribimos (por simplificar supongamos base discreta pero es análogo para continua):

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |u_n\rangle$$

Sustituimos en (1):

$$i\hbar \sum_n \frac{dc_n}{dt} |u_n\rangle = H \sum_n c_n |u_n\rangle = \sum_n c_n(t) H |u_n\rangle = \sum_n c_n(t) E_n |u_n\rangle$$

Son dos combinaciones lineales iguales de vectores l.i., luego los coeficientes en ambos lados deben ser iguales término a término :

$$\forall n, \quad i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} = c_n(t) E_n \Rightarrow c_n(t) = c_n(t=0) e^{-i\frac{E_n t}{\hbar}} \quad (2)$$

Este importante resultado resuelve el problema de determinar la evolución temporal

La **función exponencial** de un operador  $A$  se define como el operador que en una base de autovectores de  $A$  está representado por la matriz:

$$A = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \Rightarrow e^A = \begin{pmatrix} e^{\lambda_1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & e^{\lambda_2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & e^{\lambda_3} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

También cumple (es una definición alternativa):  $e^A = \mathbb{1} + \frac{1}{1!} A + \frac{1}{2!} A^2 + \frac{1}{3!} A^3 + \dots$

Con esta definición se puede escribir, en el caso de  $H$  indepte del tiempo:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}tH} |\psi(0)\rangle$$

Se llama **operador evolución temporal**  $U(t, t_0)$  es el que obtiene  $|\psi(t)\rangle$  a partir de  $|\psi(t_0)\rangle$

Obviamente, en el caso de  $H$  indepte del tiempo:  $U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H}$

Una propiedad es que  $U$  es **unitario**, es decir que  $U(t, t_0)U(t, t_0)^+ = \mathbb{1}$

## Ejemplo

Sea  $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, |v_3\rangle\}$  una base ortonormal cualquiera del espacio de estados (3D), el estado:

$$|\psi(0)\rangle = \frac{1}{3}(|v_1\rangle + 2|v_2\rangle + 2|v_3\rangle)$$

y el hamiltoniano :

$$H = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & -i & 0 \end{pmatrix} \quad \text{determinar } |\psi(t)\rangle$$

**Solución (receta general):**

1) Obtenemos los autovalores y autovectores de  $H$ , por ejemplo (no son únicos):

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 0 & 0 \\ 0 & -\lambda & i \\ 0 & -i & -\lambda \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow \lambda_1 = 1, \lambda_2 = 1, \lambda_3 = -1; |u_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, |u_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 1 \end{pmatrix}, |u_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ i \end{pmatrix}$$

2) Escribimos  $|\psi(0)\rangle$  como combinación lineal de los  $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$

$$|\psi(0)\rangle = c_1(0)|u_1\rangle + c_2(0)|u_2\rangle + c_3(0)|u_3\rangle$$

$$c_1(0) = \langle u_1 | \psi(0) \rangle = \frac{1}{3} (1, 0, 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{3}$$

$$c_2(0) = \langle u_2 | \psi(0) \rangle = \frac{1}{3\sqrt{2}} (0, -i, 1) \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{3\sqrt{2}} (2 - 2i)$$

$$c_3(0) = \langle u_3 | \psi(0) \rangle = \frac{1}{3\sqrt{2}} (0, 1, -i) \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{3\sqrt{2}} (2 - 2i)$$

3) Escribimos  $|\psi(t)\rangle$  como combinación lineal de los  $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$

$$|\psi(t)\rangle = c_1(t)|u_1\rangle + c_2(t)|u_2\rangle + c_3(t)|u_3\rangle = c_1(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t}|u_1\rangle + c_2(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t}|u_2\rangle + c_3(0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_3 t}|u_3\rangle$$

En este caso ( por ahorrar escritura) hemos usado  $\lambda_n = E_n/\hbar\omega$ .

$$E_1 = \lambda_1\hbar\omega = \hbar\omega; E_2 = \lambda_2\hbar\omega = \hbar\omega; E_3 = \lambda_3\hbar\omega = -\hbar\omega$$

$$|\psi(t)\rangle = c_1(0)e^{-i\omega t}|u_1\rangle + c_2(0)e^{-i\omega t}|u_2\rangle + c_3(0)e^{i\omega t}|u_3\rangle$$

Sustituyendo los coeficientes:

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{3}e^{-i\omega t}|u_1\rangle + \frac{\sqrt{2}}{3}(1-i)e^{-i\omega t}|u_2\rangle + \frac{\sqrt{2}}{3}(1-i)e^{i\omega t}|u_3\rangle$$

4) Si queremos dar las componentes en la base original todavía hay que sustituir los autovectores de  $H$

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{3}e^{-i\omega t} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{3}(1-i)e^{-i\omega t} \begin{pmatrix} 0 \\ i \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{1}{3}(1-i)e^{i\omega t} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} e^{-i\omega t} \\ (1+i)e^{-i\omega t} + (1-i)e^{i\omega t} \\ (1-i)e^{-i\omega t} + (1+i)e^{i\omega t} \end{pmatrix}$$

## 2. Corriente de probabilidad

Consideremos solamente el caso concreto de una partícula sin spin ( $S = 0$ ) y la representación  $|\mathbf{r}\rangle$ . Cabe entender el “estado” de la partícula como si fuera una distribución continua o un fluido.

La **densidad de probabilidad** (= número esperado de partículas por  $\text{m}^3$  de volumen) en un instante dado  $t$  es entonces:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$$

El hecho de que la materia se conserva se puede enunciar matemáticamente mediante una ecuación de continuidad

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = 0$$

Siendo  $\mathbf{J}$  la densidad de corriente de número de partículas (aunque sólo hay una en total) llamada **densidad de corriente de probabilidad**.

Esta ecuación matemática indica que el número de partículas que hay en un volumen infinitesimal  $d^3r$  es constante a no ser que salgan o entren por la superficie.  $\nabla \cdot \mathbf{J}$  es el número de las que salen por unidad de tiempo y volumen.

Consideremos primero el caso de una partícula en un potencial  $V(\mathbf{r})$ .

La ec. de Schrödinger a): 
$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t)$$

La compleja conjugada b): 
$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r}, t)$$

Multiplicamos a) por  $\psi^*$ , b) por  $-\psi$  y sumamos las dos ecuaciones:

El lado izquierdo queda: 
$$i\hbar \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = i\hbar \frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t}$$

El lado derecho: 
$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*)$$

Combinando los dos: 
$$\frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \psi^*) = 0$$

Si definimos: 
$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*) = \frac{1}{m} \text{Re} \left[ \psi^* \left( \frac{\hbar}{i} \nabla \psi \right) \right]$$

Se cumple la ec. de  
continuidad (demostrarlo,  
CT D-16,D-18)

(ojo que aquí es gradiente  
no laplaciana)

En el caso de una partícula con carga  $q$  en un campo electromagnético, a partir del hamiltoniano se obtiene:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{m} \operatorname{Re} \left[ \psi^* \left( \frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right) \psi \right]$$

Dicho así, parece que se le puede añadir un vector cualquiera de divergencia nula y seguiría cumpliendo la ec de continuidad pero...

con la definición anterior, para una onda plana o un paquete de ondas se cumple

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}_g \quad (\text{probarlo para una onda plana})$$

Que tiene sentido físico: la densidad de corriente de algo es la densidad de lo mismo por la velocidad con que se mueve

Quizá deberíamos haber comenzado definiendo así  $\mathbf{J}$  y recorrer toda esta sección en sentido inverso, pero se entiende mejor así (al menos lo entiende mejor Cohen-Tanoudji).



### 3. Valor esperado. Desviaciones cuadráticas medias. Relación de incertidumbre

“Valor esperado” de un observable  $\langle A \rangle$  (= número real) es la media de los valores que se obtendrían si midiésemos muchísimas veces  $A$  en sistemas iguales que se encuentren exactamente en el mismo estado cuántico  $|\psi\rangle$ , aunque cada vez sólo se obtiene un valor propio. (como el valor medio obtenido al tirar muchas veces un dado: es 3.5, que no se puede obtener en ninguna tirada)

Según los postulados si  $|\psi\rangle = \sum_j c_j |u_j\rangle$   $\{|u_j\rangle\}$  = base ortonormal de autovectores de  $A$

La probabilidad de obtener un autovalor  $a_j$  es:  
(por simplificar caso de espectro continuo no degenerado)

$$\mathcal{P}(a_j) = |c_j|^2 = |\langle u_j | \psi \rangle|^2$$

Por tanto:  $\langle A \rangle = \sum_j a_j \mathcal{P}(a_j) = \sum_j a_j |c_j|^2 = \sum_j a_j |\langle u_j | \psi \rangle|^2 = \sum_j \langle \psi | u_j \rangle a_j \langle u_j | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$

Se define  $(\Delta A)^2 \equiv \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \dots = \langle A^2 - \langle A \rangle^2 \rangle \geq 0$

$\Delta A$  da una idea de cuán diferentes pueden salir varias medidas de  $A$ .

$\Delta A = 0$ , si y sólo si  $|\psi\rangle$  es un vector propio de  $A$ . (valor de  $A$  determinado)

## Relación de incertidumbre

Consideremos dos observables cualesquiera  $P$  y  $Q$  tales que  $[P, Q] = i\hbar$

Entonces se cumple:  $\Delta P \Delta Q \geq \frac{\hbar}{2}$

**Demostración:**

sea  $\lambda$  un número real cualquiera y consideremos el ket  $|\varphi\rangle = (P + i\lambda Q)|\psi\rangle$

$\langle\varphi|\varphi\rangle = \langle\psi|(P - i\lambda Q)(P + i\lambda Q)|\psi\rangle \geq 0$  por las propiedades esenciales del producto escalar.  
recordar que  $P = P^+$  y  $Q = Q^+$

**Desarrollando:**

$$\begin{aligned}\langle\varphi|\varphi\rangle &= \langle\psi|(P - i\lambda Q)(P + i\lambda Q)|\psi\rangle = \langle\psi|P^2|\psi\rangle + \lambda^2\langle\psi|Q^2|\psi\rangle + i\lambda\langle\psi|(PQ - QP)|\psi\rangle = \\ &= \langle\psi|P^2|\psi\rangle + \lambda^2\langle\psi|Q^2|\psi\rangle - \lambda\hbar\langle\psi|\psi\rangle = \langle Q^2\rangle\lambda^2 - \hbar\lambda + \langle P^2\rangle \geq 0\end{aligned}$$

La expresión no puede ser negativa para ningún valor de  $\lambda$

Eso implica que  $\langle Q^2\rangle > 0$  (no igual). El polinomio de 2º tomará T valores negativos si tiene dos raíces reales, en el intervalo entre ellas.

La no existencia de dos raíces reales equivale a que el discriminante sea negativo o cero

$$\hbar^2 - 4\langle Q^2\rangle\langle P^2\rangle \leq 0 \Rightarrow \langle Q^2\rangle\langle P^2\rangle \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Consideremos ahora los observables  $P' = P - \langle P \rangle 1$  ;  $Q' = Q - \langle Q \rangle 1$

Calculamos:

$$P'Q' = PQ - P\langle Q \rangle - \langle P \rangle Q + \langle P \rangle \langle Q \rangle$$
$$Q'P' = QP - \langle Q \rangle P - Q\langle P \rangle + \langle Q \rangle \langle P \rangle$$

Recordemos que  $\langle P \rangle$  y  $\langle Q \rangle$  son números y tanto ellos como  $1$  conmutan con cualquier operador, por lo tanto:

$$[P', Q'] = [P, Q] = i\hbar$$

Además:  $\langle P'^2 \rangle = \langle (P - \langle P \rangle)^2 \rangle = (\Delta P)^2$  ;  $\langle Q'^2 \rangle = \langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle = (\Delta Q)^2$

Por tanto:  $(\Delta P)^2 (\Delta Q)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \Rightarrow \Delta P \Delta Q \geq \frac{\hbar}{2}$  *q.e.d.*

Notar que es la misma demostración de H. Weyl dada antes pero:

\* La demostración se generaliza fácilmente a observables cualesquiera  $A$  y  $B$ :

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

\* No se calculan explícitamente los productos escalares (el resultado no depende de cómo está definido el producto escalar)

\* No se aplica únicamente a  $\Delta x \Delta p$ , sino operadores cualesquiera.

## 4. Evolución de los valores medios: la Mecánica Clásica. Teorema de Ehrenfest

Sea  $A$  un observable cualquiera y  $\langle A \rangle(t)$  su valor esperado en un instante cualquiera  $t$ .

Si el estado del sistema está descrito por el ket  $|\psi(t)\rangle$  se tiene:

$$\langle A \rangle(t) = \langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle$$

Derivando respecto del tiempo (pueden depender del tiempo tanto  $|\psi(t)\rangle$  como  $A$ ):

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \left[ \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right] A | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial A}{\partial t} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | A \left[ \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right]$$

Usando la ec. de Schrödinger y su conjugada tenemos:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | AH - HA | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \frac{\partial A}{\partial t} | \psi(t) \rangle$$

Es decir:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H(t)] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

Y en particular, si ni  $H$ , ni  $A$  depende explícitamente del tiempo el valor medio de  $A$  se conserva si y sólo si conmuta con  $H$ .

# Caso particular de los observables $\mathbf{R}$ y $\mathbf{P}$ .

## Teorema de Ehrenfest

Consideremos por simplicidad el caso de una partícula sin spin en un potencial independiente del tiempo

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^2 + V(\mathbf{R})$$

Tenemos: 
$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{R} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\mathbf{R}, H] \rangle = \frac{1}{2mi\hbar} \langle [\mathbf{R}, \mathbf{P}^2] \rangle$$

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{P} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [\mathbf{P}, H] \rangle = \frac{1}{2mi\hbar} \langle [\mathbf{P}, V(\mathbf{R})] \rangle$$

Es muy fácil calcular los conmutadores que quedan  
(ejercicio: hacerlo en representación  $|\mathbf{r}\rangle$ )

$$[\mathbf{R}, \mathbf{P}^2] = 2i\hbar\mathbf{P}$$

$$[\mathbf{P}, V(\mathbf{R})] = -i\hbar\nabla V(\mathbf{R})$$

Sustituyendo:

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{R} \rangle = \frac{1}{m} \langle \mathbf{P} \rangle$$
$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{P} \rangle = -\langle \nabla V(\mathbf{R}) \rangle$$

Ecs. De Ehrenfest:

Cuando la indeterminación es despreciable son las leyes de Newton.

### Cuestión:

$\langle \mathbf{R} \rangle$  es el centro del paquete de ondas que representa la partícula. ¿Obedece su movimiento a la Mecánica Clásica si la indeterminación es grande?

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{P}^2 + V(\mathbf{R})$$

Respuesta: NO

Para que fuera Sí la fuerza clásica en el punto  $\langle \mathbf{R} \rangle$ , debería ser

$$-\nabla V(\langle \mathbf{R} \rangle) = -\langle \nabla V(\mathbf{R}) \rangle$$

Contraejemplo: Sea, en 1D  $V(x) = \lambda x^n$

$$-\langle \nabla V(X) \rangle = -\lambda n \langle X^{n-1} \rangle$$

$$\text{Por el otro lado} \quad -\nabla V(x) = -\lambda n x^{n-1} \Rightarrow -\nabla V(\langle X \rangle) = -\lambda n \langle X \rangle^{n-1}$$

Que no es lo mismo, por ejemplo si  $n = 3$

$$\Delta X^2 = \langle (X - \langle X \rangle)^2 \rangle = \langle X^2 - 2X\langle X \rangle + \langle X \rangle^2 \rangle = \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 \neq 0$$

## 5. Relación de incertidumbre energía-tiempo

De manera formalmente análoga aunque conceptualmente distinta se cumple la llamada relación de incertidumbre energía–tiempo:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Aquí  $\Delta t$  no es una incertidumbre, sino el intervalo de tiempo necesario para que el sistema cambie apreciablemente de estado cuántico

Si el resultado anterior es un teorema riguroso, válido en cualquier caso, y su interpretación física es un cuestión debatida hasta hace muy poco tiempo.

Ver, por ejemplo, P. Busch *Foundations of Physics*, Vol. 20, No. 1, 1990

[http://download.springer.com/static/pdf/772/art%253A10.1007%252FBF00732932.pdf?auth66=1416388889\\_32e5425e9cb871128be437c665d09705&ext=.pdf](http://download.springer.com/static/pdf/772/art%253A10.1007%252FBF00732932.pdf?auth66=1416388889_32e5425e9cb871128be437c665d09705&ext=.pdf)

La deducción que hace Cohen-Tanoudji en Cap III, D 2e es una falacia y debería conducir a  $\Delta E \Delta t \geq 0$ , correcto, pero no prueba la relación.

Podemos verlo en el **caso particular de un paquete de ondas gaussiano en 1D**, representando una partícula libre

Consideremos (CT Cap I, compl. G<sub>1</sub>, 3) una partícula libre en 1D descrita por la función de onda:

$$\psi(x,t) = \frac{\sqrt{a}}{(2\pi)^{3/4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{a^2}{4}(k-k_0)^2} e^{i[kx - \omega(k)t]} dk \quad \text{Donde} \quad \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{E(k)}{\hbar}$$

Es muy fácil ver que :

$$\Delta x = \frac{a}{2} \quad \Delta k = \frac{1}{a}; \Delta p = \frac{\hbar}{a}; \Delta E = \Delta \left( \frac{p^2}{2m} \right) = \frac{\langle p \rangle}{m} \Delta p = v_g \frac{\hbar}{a}$$

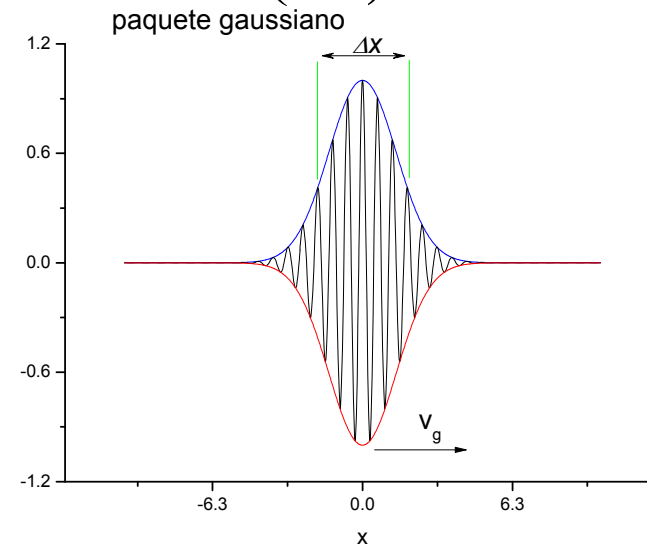
Para ese paquete particular se cumple:

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

El intervalo de tiempo que tarda en pasar el paquete por un punto es:

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{v_g} = \frac{m \Delta x}{\langle p \rangle} \Rightarrow \Delta E \Delta t = v_g \Delta p \frac{\Delta x}{v_g} = \frac{\hbar}{2}$$

Con otros tipos de paquete  $\Delta x \Delta p > \hbar/2$  y también  $\Delta E \Delta t > \hbar/2$





## 6. Oscilador armónico: nuevas propiedades

Usando las nuevas notaciones el hamiltoniano se puede escribir:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2$$

Se trata encontrar los valores (que son las energías posibles) y vectores propios de  $H$ :

$$H|\varphi\rangle = E|\varphi\rangle$$

Algunas propiedades que vamos a ver:

- i) Todas las energías son positivas
- ii) Las funciones propias tienen paridad definida.
- iii) El espectro es discreto y no degenerado.
- iv) Definiremos los operadores importantes  $a$ ,  $a^+$  y  $N$

i) . Se demostró usando la formulación de Schrödinger para cualquier partícula confinada, en 1D. Se puede ver también en CT complemento M<sub>III</sub>

iii) es una propiedad general de una partícula confinada en 1D. Ya se vio con la formulación de Schrödinger. Ver también CT complemento M<sub>III</sub>

ii) Es por simetría. (diapositiva siguiente)

## Paridad definida

Si  $V(x)$  es una **función par**, es decir  $V(-x) = V(x)$  entonces  $H$  conmuta con el operador paridad  $\Pi$ .

En efecto:

$$H\Pi\varphi_n(x) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right) \varphi_n(-x) = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial (-x)^2} + V(-x) \right) \varphi_n(-x) = E_n \varphi_n(-x)$$

$$\Pi H\varphi_n(x) = \Pi E_n \varphi_n(x) = E_n \varphi_n(-x)$$

Por tanto todos los vectores propios de  $H$  (no degenerados) lo son de  $\Pi$ .

$$\Pi\varphi_n(x) = \alpha\varphi_n(x) \quad \text{Siendo } \alpha \text{ un número real.}$$

Si se aplica dos veces  $\Pi$ ,  $\Pi^2 = 1$  y resulta que

$$\varphi_n(x) = 1\varphi_n(x) = \Pi^2\varphi_n(x) = \alpha^2\varphi_n(x) \Rightarrow \alpha^2 = 1 \Rightarrow \alpha = \pm 1$$

Es decir  $\Pi\varphi_n = \varphi_n$  (función par) o bien  $\Pi\varphi_n = -\varphi_n$  (función impar)

## Coordenadas normales. Operadores “escalera” $a$ y $a^+$

Por comodidad vamos a definir la constante:  $\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ ;  $[\beta] = L^{-1}$

Y los operadores:

$$X' = \beta X$$
$$P' = \frac{1}{\sqrt{m\hbar\omega}} P = \frac{\beta}{m\omega} P$$
$$H' = \frac{1}{\hbar\omega} H = \frac{1}{2} (X'^2 + P'^2)$$

Los tres carecen de dimensiones físicas, y  $H'$  es el hamiltoniano en unidades de  $\hbar\omega$ .

Usando estas variables se describe cualquier osc. armónico.

Definimos los  
operadores  
escalera:

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}} (X' + iP')$$
$$a^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} (X' - iP')$$

Definimos el  
operadore “número”:

$$N \equiv a^+ a$$

No son hermíticos pero tienen propiedades muy interesantes, y permiten obtener las energías y funciones propias de  $H$  muy fácilmente.

Obviamente (desarrollar):  $[a, a^+] = 1$   $H' = a^+ a + \frac{1}{2} = a a^+ - \frac{1}{2} = N + \frac{1}{2}$

## El espectro de $N$

**Lema I:** Sean  $n$  los autovalores de  $N$  :  $n \geq 0$

**Dem:** Sea  $|\varphi_n\rangle$  un autovector (en realidad el único como ya sabemos por Schrödinger) de  $N$  con valor propio  $n$

La norma de  $a|\varphi_n\rangle$  es positiva o nula:

$$\|a|\varphi_n\rangle\|^2 = \langle\varphi_n|a^+a|\varphi_n\rangle = \langle\varphi_n|N|\varphi_n\rangle = n\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = n\|\varphi_n\|^2 \geq 0 \Rightarrow n \geq 0$$

**Lema II:** Sea  $|\varphi_n\rangle$  un autovector de  $N$  con valor propio  $n$

**Entonces:**

$$\text{si } n = 0 \Rightarrow a|\varphi_n\rangle = 0$$

$$\text{si } n > 0 \Rightarrow a|\varphi_n\rangle = cte \cdot |\varphi_{n-1}\rangle$$

**Dem: hemos visto que:**  $\|a|\varphi_n\rangle\|^2 = n\|\varphi_n\|^2 \Rightarrow \text{si } n = 0, \|a|\varphi_0\rangle\|^2 = 0 \Leftrightarrow a|\varphi_0\rangle = 0$

**Si  $n > 0$ :**  $\|a|\varphi_n\rangle\|^2 = n\|\varphi_n\|^2 > 0 \Leftrightarrow a|\varphi_n\rangle \neq 0$

**Calculamos el conmutador :**  $[N, a] = Na - aN = Na - aa^+a = Na - (N+1)a = -a$

**Por tanto :**  $-a|\varphi_n\rangle = [N, a]|\varphi_n\rangle \equiv Na|\varphi_n\rangle - aN|\varphi_n\rangle = Na|\varphi_n\rangle - a(n|\varphi_n\rangle) = Na|\varphi_n\rangle - na|\varphi_n\rangle$

**Despejamos :**  $Na|\varphi_n\rangle = (n-1)a|\varphi_n\rangle$

Esto quiere decir que  $a|\varphi_n\rangle$  es autovector de  $N$  con valor propio  $n-1$ , que simbolizamos como  $|\varphi_{n-1}\rangle$

q.e.d.

**Lema III:** Sea  $|\varphi_n\rangle$  un autovector de  $N$  con valor propio  $n$

Entonces: 
$$\forall n \left\{ \begin{array}{l} a^+|\varphi_n\rangle \neq 0 \\ a^+|\varphi_n\rangle = cte \cdot |\varphi_{n+1}\rangle \end{array} \right\}$$

Dem: análoga al Lema II (ejercicio)

**Teorema:** El espectro de  $N$  es el conjunto  $\{n\}$  de los enteros no negativos

Dem: Supongamos que  $|\varphi_n\rangle$  es autovector de  $N$  y que  $n > 0$ , no es entero,

Existe un entero  $m$  tal que  $m < n < m+1$

Entonces aplicando  $m+1$  veces (o más) el operador  $a$ , se obtiene un autovector de  $N$  con autovalor  $n-m-1 < 0$ , imposible por el Lema I

En cambio si  $n$  es entero no hay contradicción:  $a^n|\varphi_n\rangle = 0$

Y cualquier aplicación posterior de  $a$  al vector nulo es el mismo vector nulo

Comentario: distinguir entre el **vector nulo** (representa físicamente que no hay partícula, pues la norma es cero y con ella la probabilidad de encontrarla en algún sitio) y  $|\varphi_0\rangle$ , que es el estado de menor  $n$  posible y por tanto menor energía.

## El espectro de $N$ es no degenerado

Lo demostramos por inducción:

### 1) El nivel fundamental no es degenerado

En efecto, supongamos que  $|\varphi_0\rangle$  es un estado (de varios posibles) que corresponde a la mínima energía (o mínimo  $N$ ) hemos visto que

$$a|\varphi_0\rangle = 0$$

Es decir: 
$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} X + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} P \right) |\varphi_0\rangle = 0$$

En representación  $|x\rangle$  tenemos que: 
$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x + \frac{i}{\sqrt{m\hbar\omega}} \left( -i\hbar \frac{d}{dx} \right) \right) \varphi_0(x) = 0$$

Simplificando: 
$$\left[ \frac{m\omega}{\hbar} x + \frac{d}{dx} \right] \varphi_0(x) = 0$$

Esta ecuación diferencial de primer orden se resuelve muy fácilmente por separación de variables:

$$\varphi_0(x) = ce^{-\frac{1}{2} \frac{m\omega}{\hbar} x^2}$$

El hecho de que la cte de integración  $c$  sea multiplicativa indica que dos posibles soluciones son proporcionales y representan el mismo estado cuántico

2) Si el nivel  $n$  no es degenerado el  $n+1$  tampoco lo es

En efecto, supongamos que sólo existe un estado  $|\varphi_n\rangle$  tal que  $N|\varphi_n\rangle = n|\varphi_n\rangle$

Supongamos por otra parte que existen varios autovectores de  $N$ ,  $|\varphi_{n+1}^i\rangle$  que corresponden al mismo autovalor  $n+1$ :

$$N|\varphi_{n+1}^i\rangle = (n+1)|\varphi_{n+1}^i\rangle$$

Aplicamos el operador  $a$  a todos ellos. Dado que  $|\varphi_n\rangle$  no es degenerado, el resultado debe ser en todos casos una constante por  $|\varphi_n\rangle$

$$a|\varphi_{n+1}^i\rangle = c^i|\varphi_n\rangle$$

Ahora aplicamos el operador  $a^+$  a todos ellos  $a^+a|\varphi_{n+1}^i\rangle = c^i a^+|\varphi_n\rangle$

El lado de la derecha es  $c^i$  por un vector único. En el lado de la izquierda  $a^+a = N$

$$(n+1)|\varphi_{n+1}^i\rangle = c^i a^+|\varphi_n\rangle \Rightarrow |\varphi_{n+1}^i\rangle = \frac{c^i}{n+1} a^+|\varphi_n\rangle$$

Es decir, que todos los  $|\varphi_{n+1}^i\rangle$  son proporcionales a un vector único y representan el mismo estado

## Valores y vectores propios del hamiltoniano

Dado que  $H = \hbar\omega(N+1/2)$  los vectores propios de  $H$  son los mismos de  $N$   $|\varphi_n\rangle$  y los valores propios :

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

Ya sabemos que los autovectores son únicos salvo un factor de fase, y se pueden obtener del primero actuando con  $a^+$ .

Sólo queda elegir el factor de fase, lo más simple posible:

$$|\varphi_n\rangle = c_n a^+ |\varphi_{n-1}\rangle$$

Queremos que  $|\varphi_n\rangle$  esté normalizado:

$$\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = |c_n|^2 \langle\varphi_{n-1}|aa^+|\varphi_{n-1}\rangle = |c_n|^2(n-1+1) = 1 \Rightarrow |c_n|^2 = \frac{1}{n}$$

Lo más simple es elegir los factores numéricos  $c_n$  reales y positivos:  $c_n = \frac{1}{\sqrt{n}}$

Con esa definición queda:

$$\begin{aligned} a^+|\varphi_n\rangle &= \sqrt{n+1}|\varphi_{n+1}\rangle \\ a|\varphi_n\rangle &= \sqrt{n}|\varphi_{n-1}\rangle \end{aligned}$$



Los autovectores de  $N$  y de  $H$  se obtienen simplemente aplicando repetidamente  $a^+$  al primero:

$$|\varphi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n |\varphi_0\rangle$$

Las funciones de onda se obtienen a partir de la primera aplicando el operador  $a^+$  en representación  $|x\rangle$

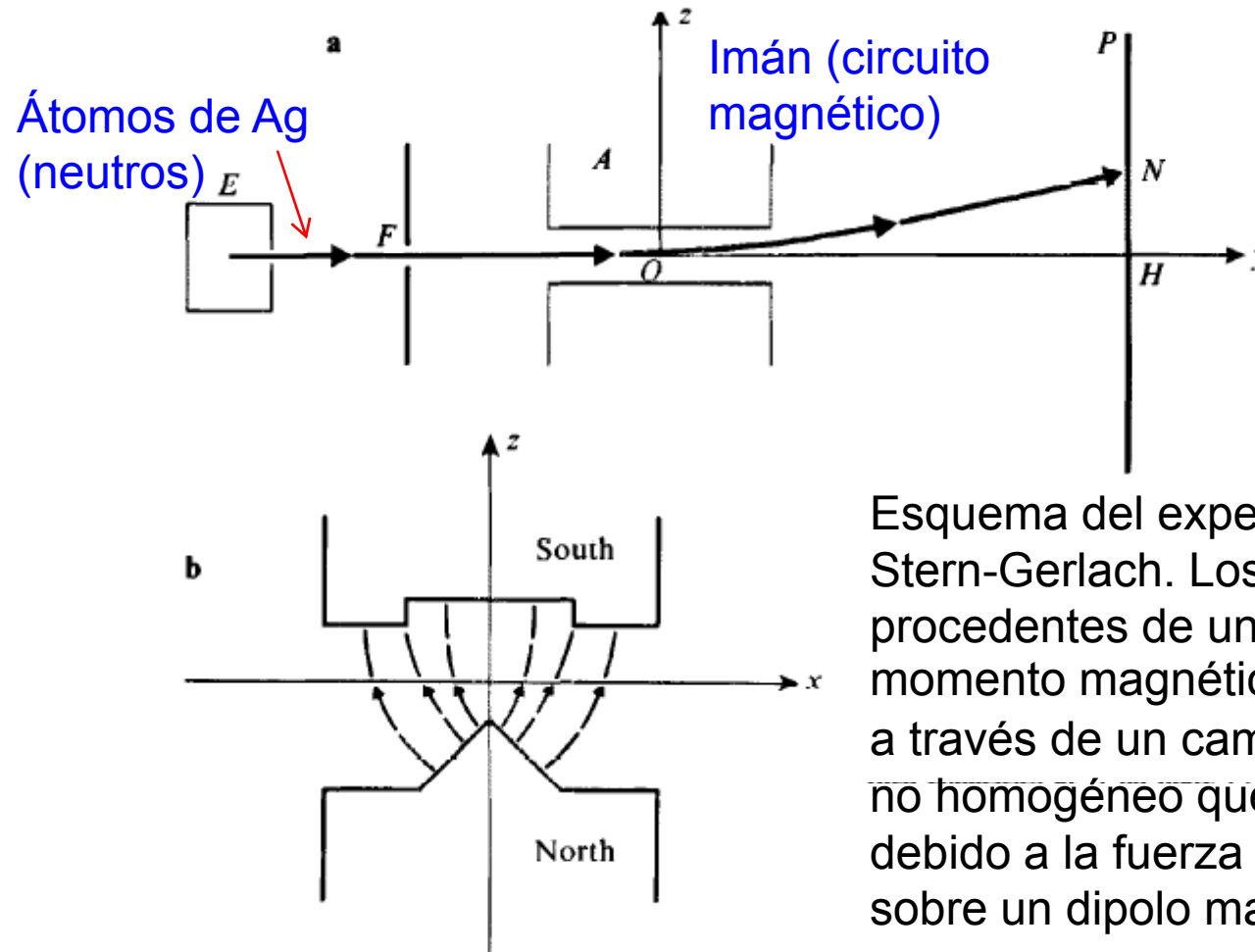
$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^+)^n \varphi_0(x)$$

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{\sqrt{2^n}} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{d}{dx} \right)^n \varphi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \frac{1}{\beta^n} \left( \frac{\beta^2}{\pi} \right)^{1/4} \left( \beta^2 x - \frac{d}{dx} \right)^n e^{-\frac{1}{2}(\beta x)^2}$$

Siendo  $\beta = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$  (Cohen-Tanoudji cap. V, C-27)

Como se ve fácilmente, es un factor multiplicado por  $H_n(x') \exp(-x'^2/2)$ , siendo  $x' = \beta x$

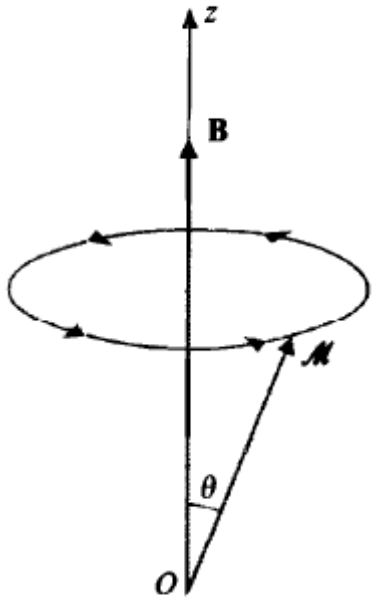
## 7. Partículas con spin $\frac{1}{2}$ . El experimento de Stern-Gerlach (1922)



Esquema del experimento de Stern-Gerlach. Los átomos de Ag procedentes de un horno tienen momento magnético  $\mathcal{M}$  y pasan a través de un campo magnético no homogéneo que los desvía debido a la fuerza magnética sobre un dipolo magnético:

$$\mathbf{F} = (\mathbf{M} \cdot \nabla) \mathbf{B} = \nabla(\mathbf{M} \cdot \mathbf{B})$$

## Movimiento según la MCL



El momento magnético clásico puede provenir de la rotación de un cuerpo cargado. Entonces el vector momento angular clásico  $S$  es proporcional al momento magnético. Pronto veremos que este caso no tiene analogía clásica, pero admitiremos que también se cumple:

$$\mathcal{M} = \gamma S$$

$\gamma$  se llama razón giromagnética y no es el valor clásico

Por otra parte, el torque producido por el campo externo es  $\Gamma = \mathcal{M} \times \mathbf{B}$

De modo que el movimiento de rotación responde a la ecuación:

$$\frac{dS}{dt} = \gamma S \times \mathbf{B}$$

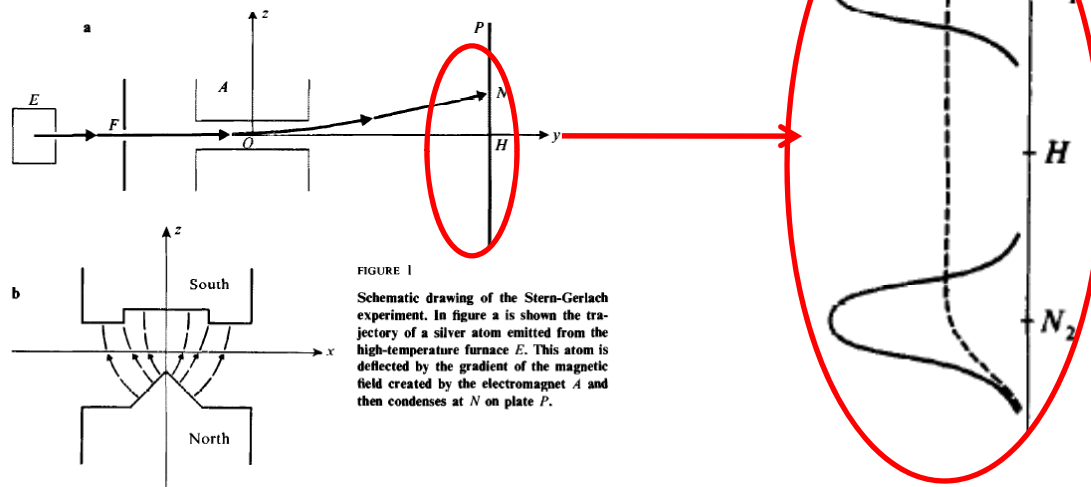
Es decir  $\frac{dS}{dt} \perp S, \mathbf{B}$  y  $S$  o  $\mathcal{M}$  precesa, como una peonza, alrededor de la dirección de  $\mathbf{B}$ , manteniendo constante la componente paralela a  $\mathbf{B}$

El movimiento de traslación viene dado por la fuerza perpendicular

$$F_z = \frac{\partial}{\partial z} (\mathcal{M} \cdot \mathbf{B}) \cong \mathcal{M}_z \frac{\partial B}{\partial z} \cong cte$$

Así pues, mientras el átomo está dentro del imán describe una parábola (ver figura abajo) y sale formando un ángulo con la dirección incidente proporcional a  $\mathcal{M}_z$ .

La dirección inicial de los momentos es al azar, por lo que si registramos los impactos en una pantalla saldrá una mancha continua entre los extremos correspondientes a las desviaciones de los átomos que vayan con  $\mathcal{M}_z = +|\mathcal{M}|$  y los que vayan con  $\mathcal{M}_z = -|\mathcal{M}|$ , *incluyendo todos los valores intermedios.* (Línea de trazos en la figura)



EL RESULTADO  
EXPERIMENTAL  
CONTRADICE  
ABIERTAMENTE ESTAS  
CONSIDERACIONES:

SÓLO SALEN DOS  
MANCHAS  
SIMÉTRICAMENTE  
RESPECTO DEL EJE z

En el experimento original la distancia entre las dos manchas era de sólo 0.01 mm

## Tratamiento cuántico

Como se verá al estudiar la Física Atómica, el átomo libre de Ag ( $Z=47$ ) tiene una configuración electrónica con capas llenas más un electrón 5s, cuyo momento angular orbital es cero.

El momento angular neto del átomo es debido al spin del único electrón desapareado. (el experimento SG es difícil con átomos de hidrógeno)

**Aceptamos:**

1) Que el electrón tiene un momento angular intrínseco llamado Spin descrito por un observable vectorial  $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$

2)  $\mathbf{S}^2$  tiene un único valor propio que es  $3\hbar^2/4$ . Es decir el módulo está fijado y sólo puede cambiar la orientación en el espacio.

(1) y 2) resultan naturalmente de la formulación relativista de la MQ, PAM. Dirac, 1928)

3) Elegimos arbitrariamente un sistema de coordenadas: Entonces  $S_z$  tiene DOS únicos valores propios:  $+\hbar/2$  y  $-\hbar/2$ .

4) Llamamos a los correspondientes autovectores  $|+\rangle$  y  $|-\rangle$ .

5) Las matrices representativas de los observables  $S_x$  y  $S_y$ , en la base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ :

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}; \quad \text{y obviamente} \quad S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

La justificación de 3), 4) y 5) se verá a partir de las propiedades generales de los momentos angulares

## Comentarios

En un primer momento se “visualizó” el spin como si el electrón fuera una carga eléctrica que gira sobre sí misma, **PERO...**

1) Vimos que el momento angular de un sólido rotante,  $L_z$  debe ser un número ENTERO de veces  $\hbar$ . El valor **semiimpar** de  $S_z$  no tiene contrapartida clásica

2) En todos los experimentos el electrón se comporta como puntual. Si girase su momento angular clásico sería nulo.

3) El momento magnético es ciertamente proporcional a  $\mathbf{S}$ , pero  $\gamma$  no es el que le debería corresponder para una distribución rotante de carga:

$$\mathbf{M}_{cl} = \frac{1}{2} \int_{\text{volumen}} d^3r [\mathbf{r} \times q\mathbf{J}(\mathbf{r})] = \frac{1}{2} \int_{\text{volumen}} d^3r [\mathbf{r} \times q\rho(\mathbf{r})\mathbf{v}_g] = \frac{1}{2} \frac{q}{m} \mathbf{L} \Rightarrow \gamma = \frac{1}{2} \frac{q}{m} \quad (\gamma < 0 \text{ para el electrón porque } q < 0)$$

PERO...para el momento angular de spin  $\gamma$  es aproximadamente el doble de ese valor

Conclusión:  $\mathbf{S}$  se comporta como un momento angular (y se suma con otros), **PERO...NO HAY NINGUNA SITUACIÓN EN QUE SU COMPORTAMIENTO SE PAREZCA A LAS LEYES DE LA MECÁNICA CLÁSICA**

## Relaciones de conmutación entre $S_x$ , $S_y$ y $S_z$

Tomando las matrices se ve por ejemplo:

$$\begin{aligned} [S_x, S_y] &= \frac{\hbar^2}{4} \left\{ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right\} = \frac{\hbar^2}{4} \left\{ \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} \right\} = \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 2i & 0 \\ 0 & -2i \end{pmatrix} = i\hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = i\hbar S_z \end{aligned}$$

Y análogamente:  $[S_y, S_z] = i\hbar S_x$        $[S_z, S_x] = i\hbar S_y$

- \* Los dos autovalores de  $S_z$  distintos  $\rightarrow$  los estados  $|+\rangle$  y  $|-\rangle$  forman un CSCO
- \*  $S_x$ ,  $S_y$  no conmutan con  $S_z \rightarrow$  Si  $S_z$  está definido, ni  $S_x$  ni  $S_y$  lo están.

Por otra parte:  $S_x^2 = S_y^2 = S_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2 = \frac{3\hbar^2}{4} \mathbb{1}$

Es decir  $S^2$  conmuta con las tres componentes por separado pero vale siempre  $3\hbar^2/4$  y aporta poca información

Valores esperados  $\langle S_x \rangle$ ,  $\langle S_y \rangle$ , y  $\Delta S_x$ ,  $\Delta S_y$  en un estado de  $S_z$  definido

Supongamos que:  $|\psi\rangle = |+\rangle$

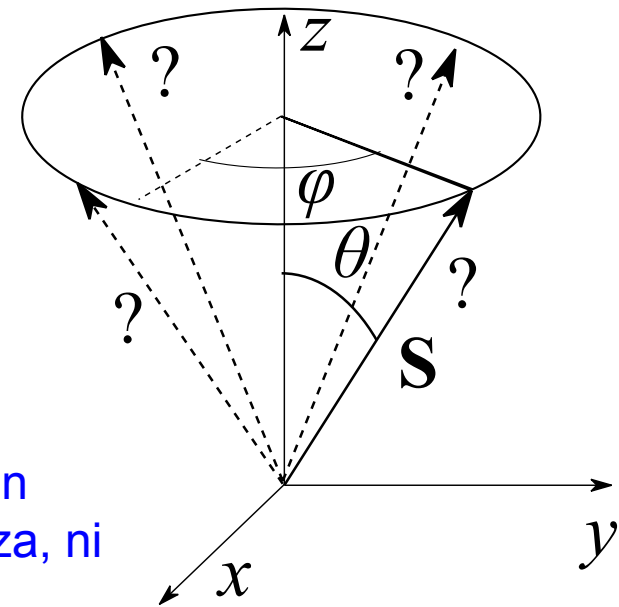
$$\langle S_x \rangle = \langle \psi | S_x | \psi \rangle = \frac{\hbar}{2} (1,0) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (1,0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = 0 = \dots \langle S_y \rangle$$

$$(\Delta S_x)^2 = \langle S_x^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \langle + | 1 | + \rangle = \frac{\hbar^2}{4} \Rightarrow \Delta S_x = \Delta S_y = \frac{\hbar}{2}$$

Gráficamente este estado corresponde a un vector  $\mathbf{S}$  de módulo  $\sqrt{3} \hbar/2$ , con  $S_z = \hbar/2$  ( $\cos \theta = 1/\sqrt{3}$ ,  $\theta = 54,74^\circ$ )

Pero con  $\varphi$  completamente indeterminado

Frecuentemente se dice que este estado significa “spin up”, pero nunca puede apuntar hacia arriba con certeza, ni existe un estado con  $\langle S_z \rangle > \hbar/2$



Obviamente todo es similar para el estado  $|\psi\rangle = |-\rangle$  pero con  $S_z = -\hbar/2$



## Partícula de spin $\frac{1}{2}$ en un campo magnético externo constante $\mathbf{B}$

El movimiento clásico de un momento dipolar magnético en un campo externo se puede describir mediante el hamiltoniano:

$$H = -\mathcal{M} \cdot \mathbf{B} \quad (\text{Ver nota a pie de página})$$

Aceptando que el momento magnético es proporcional al spin (lo que muestra el experimento y más tarde a la Mecánica Cuántica Relativista de Dirac) y eligiendo el eje  $z$  como la dirección del campo:

$$H = -\gamma B S_z$$

En la base  $\{|+\rangle, |-\rangle\}$  la matriz que lo representa es: 
$$H = -\frac{\gamma \hbar B}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$[H, S_z] = 0$  luego los autovectores de  $H$  son los mismos de la base con autovalores  $+\gamma \hbar B/2$  y  $-\gamma \hbar B/2$

Este hamiltoniano describe correctamente el movimiento clásico del dipolo en el campo externo (es decir las ecuaciones de Hamilton se reducen a las leyes de Newton), pero **no es la energía** ya que las fuentes del campo externo realizan trabajo cuando el dipolo se mueve en el campo magnético. Ver Feynman o Callen. Cohen Tanoudji lo dice “erróneamente” en este punto porque hasta ahora no ha querido entrar en largas discusiones e identifica “hamiltoniano” con “energía”. En realidad es la **entalpía magnética**, que es mínima en un campo externo fijado para el equilibrio estable.

## Evolución temporal de un estado: precesión de Larmor

Definimos la constante :  $\omega_0 \equiv -\gamma B; [\omega_0] = \frac{[M][B]}{[S]} = \frac{\text{julios}}{\text{kg} \cdot \text{m}^2 / \text{s}^2} = \frac{\text{kg} \cdot \text{m}^2 / \text{s}^2}{\text{kg} \cdot \text{m}^2 / \text{s}} = \text{s}^{-1}$

El estado más general posible se escribe como :  $|\psi\rangle = \alpha|+\rangle + \beta|-\rangle$

pero si lo queremos normalizado:  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$

Lo que se consigue automáticamente poniendo:  $|\alpha| = \cos \frac{\theta}{2}; |\beta| = \sin \frac{\theta}{2}$

$\frac{\theta}{2} = \arctan \frac{|\beta|}{|\alpha|}$  es un ángulo real cualquiera entre 0 y  $\pi$ , escrito así por conveniencia posterior

Todavía podemos elegir los argumentos de  $\alpha$  y  $\beta$  a voluntad pero lo único que tiene relevancia física es su diferencia.

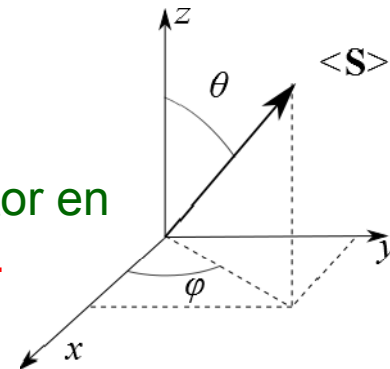
Pongamos:

$$\begin{aligned} \varphi = \text{Arg}\alpha - \text{Arg}\beta &\Rightarrow \text{Arg}\alpha = \frac{\chi}{2} + \frac{\varphi}{2} \\ \chi = \text{Arg}\alpha + \text{Arg}\beta &\Rightarrow \text{Arg}\beta = \frac{\chi}{2} - \frac{\varphi}{2} \end{aligned} \quad |\psi\rangle = e^{i\frac{\chi}{2}} \left( \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} |-\rangle \right)$$

Y finalmente podemos elegir  $\chi = 0$

$|\psi\rangle = \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} |+\rangle + \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} |-\rangle$

Su valor medio es un vector en la dirección  $\theta, \varphi$  (probarlo).

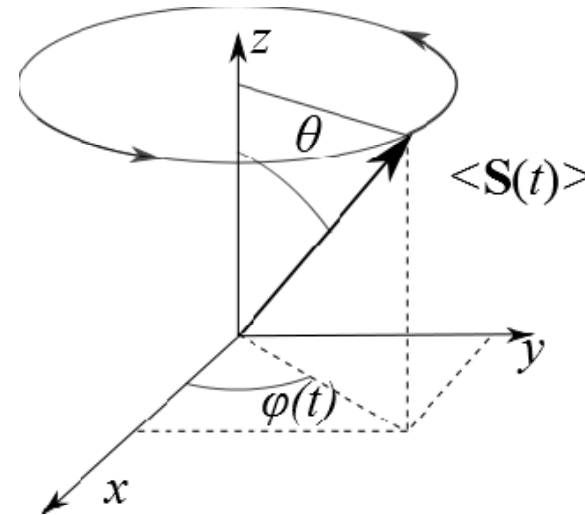


Las “energías” (autovalores de  $H$ ) son :  $H|+\rangle = -\frac{\hbar\omega_0}{2}|+\rangle; H|-\rangle = \frac{\hbar\omega_0}{2}|-\rangle$

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

La evolución temporal la da el postulado 6°:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi}{2}} e^{-i\frac{\omega_0 t}{2}} |+\rangle + \sin\frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi}{2}} e^{i\frac{\omega_0 t}{2}} |-\rangle \\ &= \cos\frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi+\omega_0 t}{2}} |+\rangle + \sin\frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi+\omega_0 t}{2}} |-\rangle \end{aligned}$$



Es un ejercicio simple (hacerlo) comprobar que tal estado tiene bien definida la componente del spin según una dirección dada por los ángulos polares, en coord. esféricas:

$$\theta(t) = \theta = cte; \quad \varphi(t) = \varphi + \omega_0 t$$

Son interesantes los valores medios de  $S_x, S_y, S_z$  en ese estado (obtenerlos):

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

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \cos(\varphi + \omega_0 t)$$

$$\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \theta \sin(\varphi + \omega_0 t)$$

Es decir los valores medios precesan con la frecuencia clásica “de Larmor”  $\omega_0 = -\gamma B$ , como “manda Ehrenfest”

## 8. Dos spines $\frac{1}{2}$ . Producto tensorial de espacios

\*Consideremos dos partículas **distintas** (1) y (2) con spin  $\frac{1}{2}$  y un hamiltoniano de interacción “de Heisenberg”

(el origen físico de esta interacción es realmente electrostático y se estudiará en física atómica o del estado sólido)

\*No consideramos aquí el movimiento de traslación de las partículas

(por ejemplo suponer que están cada una en el estado fundamental de un pozo de potencial armónico simple).

### Espacio de estados

El estado más general de la partícula (1) lo escribimos:  $|\varphi(1)\rangle = \alpha_1|1:+\rangle + \beta_1|1:-\rangle$

Donde los kets de base pertenecen a un espacio de estados de spin de la partícula (1):  $\mathcal{E}_S(1)$

Análogamente para la partícula (2),  $\mathcal{E}_S(2)$ :  $|\chi(2)\rangle = \alpha_2|2:+\rangle + \beta_2|2:-\rangle$

La probabilidad de que  $S_{z1} = +\hbar/2$  es  $\mathcal{P}_1(+)= |\alpha_1|^2$ , la  $\mathcal{P}_2(+)$  de que  $S_{z2} = +\hbar/2$  es  $\mathcal{P}_2(+)= |\alpha_2|^2$ ,

y la probabilidad de que ocurran las dos cosas a la vez es (estadística elemental) es  $\mathcal{P}(1+,2+) = \mathcal{P}_1(+)\mathcal{P}_2(+)= |\alpha_1|^2|\alpha_2|^2$

Así muchas otras propiedades, de modo que el espacio total es lo que se llama “producto tensorial”, que pasamos a definir (CT, cap II F)

$$\mathcal{E}_S = \mathcal{E}_S(1) \otimes \mathcal{E}_S(2)$$

## Producto tensorial de espacios

Consideremos dos espacios vectoriales  $\mathcal{E}_1$  y  $\mathcal{E}_2$  sobre el mismo cuerpo (para nosotros casi siempre  $\mathbb{C}$ ), El espacio producto tensorial es  $\mathcal{E}_{12} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$  es el que cumple las siguientes propiedades

a) Contiene todos los pares de elementos de  $\mathcal{E}_1$  y  $\mathcal{E}_2$ , (lo que se llama “producto cartesiano”  $\mathcal{E}_1 \times \mathcal{E}_2$ ). Es decir  $\mathcal{E}_1 \times \mathcal{E}_2 \subset \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$

Por simplificar la notación ponemos  $(|\varphi(1)\rangle, |\chi(2)\rangle) \equiv |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle$

b) La suma de vectores y el producto por un escalar en  $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$  están definidas de modo que para todos escalares  $\lambda$  y  $\mu$  y vectores se cumple:

$$\begin{aligned} [\lambda|\varphi(1)\rangle] \otimes |\chi(2)\rangle &= \lambda[|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] \\ |\varphi(1)\rangle \otimes [\mu|\chi(2)\rangle] &= \mu[|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] \\ |\varphi(1)\rangle \otimes [|\chi_1(2)\rangle + |\chi_2(2)\rangle] &= |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi_1(2)\rangle + |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi_2(2)\rangle \\ [|\varphi_1(2)\rangle + |\varphi_2(2)\rangle] \otimes |\chi(1)\rangle &= |\varphi_1(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle + |\varphi_2(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle \end{aligned}$$

c) Sean  $\{|u_i(1)\rangle\}$  y  $\{|v_i(2)\rangle\}$  bases de  $\mathcal{E}_1$  y  $\mathcal{E}_2$  resp.

Entonces  $\{|u_i(1)\rangle \otimes |v_j(2)\rangle\}$  es una base de  $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$

Notar que

$$i) \text{ Si } |\psi\rangle = |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle \quad |\varphi(1)\rangle = \sum_i a_i |u_i(1)\rangle \quad |\chi(2)\rangle = \sum_i b_i |v_i(2)\rangle$$

$$\text{Entonces: } |\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle = \sum_{il} a_i b_l |u_i(1)\rangle \otimes |v_l(1)\rangle$$

ii) Hay vectores en  $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$  que no son producto tensorial de dos:

Ejemplo: Supongamos que  $\mathcal{E}_1$  es de dimensión  $N_1$  y  $\mathcal{E}_2$  de dim  $N_2$ .

Como  $\{|u_i(1)\rangle \otimes |v_l(1)\rangle\}$  es base de  $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$  el siguiente vector debe pertenecer al espacio producto tensorial:

$$|\psi\rangle = \sum_{il} c_{il} |u_i(1)\rangle \otimes |v_l(1)\rangle$$

Pero  $\{c_{il}\}$  es un conjunto de  $N_1 \times N_2$  números complejos cualesquiera, que no se pueden escribir como productos de  $N_1$  números  $\{a_i\}$  por  $N_2$   $\{b_l\}$ , (intentarlo supone resolver un sistema de  $N_1 \times N_2$  ecuaciones con sólo  $N_1 + N_2$  incógnitas)

## Producto tensorial de operadores

Dado un operador  $A(1)$  que actúa sobre el espacio  $\mathcal{E}_1$ , se define la **prolongación** de  $A$  al espacio  $\mathcal{E}$  por la acción sobre los vectores de la base:

$$\tilde{A}(1)|\psi\rangle = \tilde{A}(1)\sum_{il} c_{il}|u_i(1)\rangle \otimes |v_l(1)\rangle = \sum_{il} c_{il} [A(1)|u_i(1)\rangle] \otimes |v_l(1)\rangle$$

Dados dos operadores  $A(1)$  y  $A(2)$  que actúa sobre los dos espacios  $\mathcal{E}_1$  y  $\mathcal{E}_2$ , se define la **el producto tensorial** de  $A(1) \otimes B(2)$  en el espacio  $\mathcal{E}$  por la acción sobre un vector que es producto tensorial .

$$[\tilde{A}(1) \otimes \tilde{B}(2)] [|\varphi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle] = A(1)|\varphi(1)\rangle \otimes B(2)|\chi(2)\rangle$$

En resumen, cada operador actúa sobre su espacio y deja el otro “sin tocar”

**Notación simplificada:** normalmente casi siempre se omite el símbolo  $\otimes$

No vamos a revisar más propiedades del producto tensorial, la mayoría evidentes. En caso necesario consultar CT cap II F

# Ejemplos producto tensorial



## Ej1. Dos partículas distintas en un pozo cuadrado de potencial 1D

Hemos visto que las funciones de onda de 1 partícula con energía definida son

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (1)$$

Para dos partículas la función de onda más general es:

$$\phi(x_1, x_2)$$

$$|\phi(x_1, x_2)|^2$$

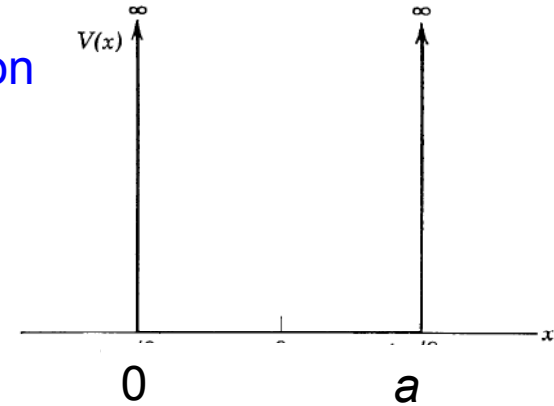
Indica la densidad de probabilidad de que la partícula 1 esté en el sitio  $x_1$  y la partícula 2 en  $x_2$

$$\phi(x_1, x_2)$$

Se puede escribir como combinación lineal de productos de funciones de  $x_1$  y de  $x_2$  de la forma (1):

$$\phi(x_1, x_2) = \sum_{n_1, n_2=1}^{\infty} C_{n_1 n_2} \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n_1 \pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi x_2}{a}\right)$$

Por lo tanto el espacio de funciones de onda del sistema es el **producto tensorial** de funciones de la partícula 1, por el de funciones de la partícula 2. La base está formada por cada una de las parejas



$$\left\{ \varphi_{n_1}(x_1) \varphi_{n_2}(x_2), n_1, n_2 \in \mathbb{N} \right\}$$

El valor de la función en un punto es un número y la función de onda producto tensorial de dos es la función producto ordinario, porque si la partícula 1 está en el estado  $\varphi_{n_1}(x_1)$  y la 2 en el estado  $\varphi_{n_2}(x_2)$  la probabilidad encontrar la partícula 1 en  $x_1$  y la 2 en  $x_2$  es el producto de módulos al cuadrado.

Si las partículas son distintas y no tienen ninguna interacción se ignoran una a la otra y los estados de energía definida son los productos de los de cada partícula por separado

$$\phi(x_1, x_2)_{n_1 n_2} = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{n_1 \pi x_1}{a}\right) \sin\left(\frac{n_2 \pi x_2}{a}\right); \quad E_{n_1 n_2} = E_{n_1} + E_{n_2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_1 a^2} n_1^2 + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_2 a^2} n_2^2; n_1, n_2 = 1, 2, \dots$$

Sin embargo la función de onda posible del sistema (de energía no bien definida) es cualquier combinación lineal de las anteriores, es decir cualquier  $\phi(x_1, x_2)$  normalizada, que no necesariamente es un producto de una función de  $x_1$  por una de  $x_2$

**Si hay interacción** (un hamiltoniano dependiente de  $x_1$  y de  $x_2$ , como por ejemplo

$$H = \frac{p_1^2}{2m_1} + \frac{p_2^2}{2m_2} + \frac{1}{2} \alpha (x_1 - x_2 + l_0)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{1}{2} \alpha (x_1 - x_2 + l_0)^2.$$

que correspondería a un muelle que une las dos partículas) los estados de energía definida seguramente **no serán funciones producto sino otras combinaciones** (hay que determinar los elementos de matriz del hamiltoniano en la base dada y diagonalizarlo)

## Ej. 2. El producto tensorial de dos espacios de dimensiones 3 y 2

Sea  $\mathcal{E}_1$  y los vectores de una base:  $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$

Sea  $\mathcal{E}_2$  y los vectores de una base:  $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle\}$

Formamos las 6 parejas posibles con vectores de las dos bases:

$$|u_1\rangle|v_1\rangle \equiv |w_1\rangle \quad |u_1\rangle|v_2\rangle \equiv |w_2\rangle \quad |u_2\rangle|v_1\rangle \equiv |w_3\rangle \quad |u_2\rangle|v_2\rangle \equiv |w_4\rangle \quad |u_3\rangle|v_1\rangle \equiv |w_5\rangle \quad |u_3\rangle|v_2\rangle \equiv |w_6\rangle$$

El espacio producto tensorial  $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$  es un espacio cuya base consistene los 6 vectores  $\{|w_1\rangle, |w_2\rangle, \dots, |w_6\rangle\}$

Todas las parejas de vectores de  $\mathcal{E}_1$  y  $\mathcal{E}_2$  pertenecen a  $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$   
(es decir que el producto cartesiano es un subconjunto del producto tensorial)

También se llaman vectores producto tensorial

En efecto si  $|\varphi\rangle \in \mathcal{E}_1 \Leftrightarrow |\varphi\rangle = \alpha_1|u_1\rangle + \alpha_2|u_2\rangle + \alpha_3|u_3\rangle$

Y si  $|\psi\rangle \in \mathcal{E}_2 \Leftrightarrow |\psi\rangle = \beta_1|v_1\rangle + \beta_2|v_2\rangle$

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle|\psi\rangle &= [\alpha_1|u_1\rangle + \alpha_2|u_2\rangle + \alpha_3|u_3\rangle][\beta_1|v_1\rangle + \beta_2|v_2\rangle] = \\ &= \alpha_1\beta_1|w_1\rangle + \alpha_1\beta_2|w_2\rangle + \alpha_2\beta_1|w_3\rangle + \alpha_2\beta_2|w_4\rangle + \alpha_3\beta_1|w_5\rangle + \alpha_3\beta_2|w_6\rangle \end{aligned}$$

(Propiedad distributiva del prod. tensorial)

Sin embargo no todo vector de  $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$  es una pareja de vectores de  $\mathcal{E}_1$  y  $\mathcal{E}_2$ .  
En otras palabras el producto cartesiano (conjunto de todas parejas de vectores)  
 $\mathcal{E}_1 \times \mathcal{E}_2$  no es espacio vectorial

**Demostración:**

Sea el vector más general de  $\mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$  :

$$|\chi\rangle = c_1|w_1\rangle + c_2|w_2\rangle + c_3|w_3\rangle + c_4|w_4\rangle + c_5|w_5\rangle + c_6|w_5\rangle$$

$c_1, c_2, \dots, c_6$  son 6 números cualesquiera con la única condición de que la suma de los cuadrados sea 1.

Intentemos escribirlo como una pareja de vectores de  $\mathcal{E}_1$  y  $\mathcal{E}_2$ , o sea como antes.

Necesitamos 3  $\alpha$ 's y 2  $\beta$ 's tales que :

$$\alpha_1\beta_1 = c_1; \quad \alpha_1\beta_2 = c_2; \quad \alpha_2\beta_1 = c_3; \quad \alpha_2\beta_2 = c_4; \quad \alpha_3\beta_1 = c_5; \quad \alpha_3\beta_2 = c_6$$

Tenemos 5 incógnitas que determinar y hay 6 ecuaciones

Además si la norma de cada miembro de la pareja debe ser 1 se deben

cumplir dos ecuaciones más:  $|\alpha_1|^2 + |\alpha_2|^2 + |\alpha_3|^2 = 1; \quad |\beta_1|^2 + |\beta_2|^2 = 1$

En general el sistema de más ecuaciones que incógnitas es incompatible.

Por ejemplo pongamos las  $c_i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$  (divididos por  $\sqrt{91}$ )

De las dos primeras ecuaciones sale:  $\frac{\beta_2}{\beta_1} = \frac{c_2}{c_1} = 2$       Y de las dos últimas:  $\frac{\beta_2}{\beta_1} = \frac{c_6}{c_5} = \frac{6}{5}$

## Dos spines $\frac{1}{2}$ : CSCO

Notación simplificada:

$$\begin{aligned} |++\rangle &= |1:+\rangle \otimes |2:+\rangle \\ |+-\rangle &= |1:+\rangle \otimes |2:-\rangle \\ |-+\rangle &= |1:-\rangle \otimes |2:+\rangle \\ |--\rangle &= |1:-\rangle \otimes |2:-\rangle \end{aligned}$$

$S_{1z}$  y  $S_{2z}$  forman CSCO's de  $\mathcal{E}_S(1)$  y  $\mathcal{E}_S(2)$ , Siendo :  $\mathcal{E}_S = \mathcal{E}_S(1) \otimes \mathcal{E}_S(2)$

$$\begin{aligned} S_{1z} |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle &= \frac{\hbar}{2} \varepsilon_1 |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle \\ S_{2z} |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle &= \frac{\hbar}{2} \varepsilon_2 |\varepsilon_1 \varepsilon_2\rangle \end{aligned}$$

$S_{1x}, S_{1y}, S_{1z}$  no conmutan entre ellos, pero sí con  $S_{2x}, S_{2y}, S_{2z}$

$\{S_{1z}, S_{2z}\}$  forman un CSCO de  $\mathcal{E}_S(1) \otimes \mathcal{E}_S(2)$ ,

El estado más general posible, normalizado, es:  $|\psi\rangle = \alpha|++\rangle + \beta|+-\rangle + \lambda|-+\rangle + \delta|--\rangle$

$$\text{Con } |\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\lambda|^2 + |\delta|^2 = 1$$

## Hamiltoniano de Ising

Como ejemplo veamos el hamiltoniano de Ising ( $J = \text{cte}$ )  $H = JS_{1z}S_{2z}$

$$H|++\rangle = J \frac{\hbar^2}{4} |++\rangle; \quad H|+-\rangle = -J \frac{\hbar^2}{4} |+-\rangle; \quad H|-+\rangle = -J \frac{\hbar^2}{4} |-+\rangle; \quad H|--\rangle = J \frac{\hbar^2}{4} |--\rangle$$

$H$  es diagonal y sus autovalores y autovectores son dobles:

$$J \frac{\hbar^2}{4}, \{|++\rangle, |--\rangle\}; \quad -J \frac{\hbar^2}{4} \{|+-\rangle, |-+\rangle\}$$

Hay dos energías, los autovectores de la primera significan físicamente que los spines apuntan ambos hacia arriba o ambos hacia abajo.

En la segunda ambos spines apuntan en sentidos opuestos, uno hacia arriba y otro hacia abajo. Es la de menor energía si  $J > 0$ .

Este hamiltoniano fue propuesto por Ising para explicar el ferromagnetismo, o antiferromagnetismo de un sistema no de dos, sino de muchos spines (un sólido cristalino)

## Hamiltoniano de Heisenberg

Este hamiltoniano es  $H = J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 = J(S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z})$   
(Es muy fácil de resolver usando las propiedades de la suma de momentos angulares, pero no lo hemos visto aún)

La actuación de  $S_{1x}, S_{2x}, S_{1y}, S_{2y}$  en la base  $\{|++\rangle, |+-\rangle, |-+\rangle, |--\rangle\}$

Es (obtenerlo)  $S_{1x}|++\rangle = \frac{\hbar}{2}|+-\rangle; S_{1x}|+-\rangle = \frac{\hbar}{2}|--\rangle; S_{1x}|-+\rangle = \frac{\hbar}{2}|+-\rangle; S_{1x} |--\rangle = \frac{\hbar}{2}|+-\rangle$

Y análogamente  $S_{2x}$ , actuando sobre el segundo signo, es decir, multiplica por  $\hbar/2$  e invierte el signo del ket

La matriz del operador  $S_{1x}S_{2x}$  es

$$S_{1x}S_{2x} = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Y análogamente  $S_{1y}S_{2y}$

El hamiltoniano se obtiene sumando las tres matrices  $S_{1x}S_{2x} + S_{1y}S_{2y} + S_{1z}S_{2z}$

Diagonalizando finalmente quedan los autovalores y autovectores:

$$E_1 = -J \frac{\hbar^2}{4}, \text{ simple: } \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle - |-+\rangle)$$

$$E_2 = +J \frac{\hbar^2}{4}, \text{ triple: } \left\{ |++\rangle, \frac{1}{\sqrt{2}} (|+-\rangle + |-+\rangle), |--\rangle \right\}$$

Los estados que corresponden a  $E_2$  tienen los dos spines paralelos en cualquier dirección (el hamiltoniano se llama “isótropo”) y  $E_2$  es la menor energía si  $J < 0$

Se verá que este estado corresponde a spin total 1 (la suma)

El estado que corresponde a  $E_1$  tiene los dos spines “antiparalelos” en dirección indeterminada y  $E_1$  es la menor energía si  $J > 0$

Este único estado se verá que corresponde a un spin total cero.

*Este estado ejemplifica el entrelazamiento cuántico: Si medimos  $S_{1z}$  nos puede salir  $+\hbar/2$  o  $-\hbar/2$ . Lo mismo si medimos  $S_{2z}$ , pero si medimos  $S_{z1}$  y sale  $+\hbar/2$  y después medimos  $S_{2z}$  saldrá con toda seguridad  $-\hbar/2$ .*



ARTICLE

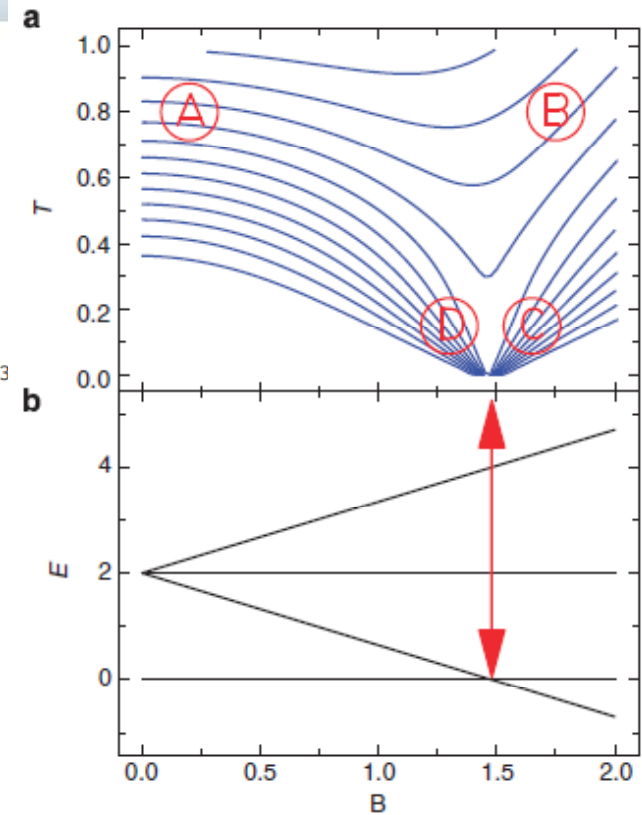
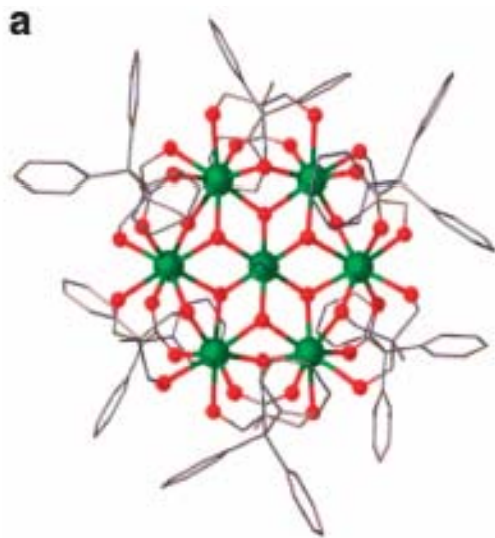
Received 18 Jun 2014 | Accepted 19 Sep 2014 | Published 22 Oct 2014

DOI: 10.1038/ncomms6321

OPEN

# Quantum signatures of a molecular nanomagnet in direct magnetocaloric measurements

Joseph W. Sharples<sup>1</sup>, David Collison<sup>1</sup>, Eric J.L. McInnes<sup>1</sup>, Jürgen Schnack<sup>2</sup>, Elias Palacios<sup>3</sup> & Marco Evangelisti<sup>3</sup>



Ejemplo simple: dos spines  $\frac{1}{2}$  en un campo magnético