Guía I : Herramientas matemáticas

Mecánica Cuántica I (FIS 321)

Licenciatura en Física mención Astronomía - 2014

IPGG

Contenido : $\widehat{\mathbf{O}}$peradores y $\overrightarrow{\mathbf{V}}$ectores *: kets, bras, ketbras, brackets y matrices*

Matrices de Pauli

Las matrices de Pauli están dadas por las siguientes identidades:

$$\boldsymbol{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

- Muestre que las cuatro matrices $\left\{\widehat{\mathbf{1}}, \boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2, \boldsymbol{\sigma}_3\right\}$, constituyen una base para las matrices de 2×2. Muestre que la siguiente matriz:

$$\widehat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$$

puede ser escrita como $\widehat{\mathbf{A}} = z_0 \widehat{\mathbf{1}} + z_1 \boldsymbol{\sigma}_1 + z_2 \boldsymbol{\sigma}_2 + z_3 \boldsymbol{\sigma}_3$. Halle las fórmulas para los coeficientes z_i en términos de las cantidades a_{ij}.

- Demostrar que:

  a).- $\boldsymbol{\sigma}_1^2 = \boldsymbol{\sigma}_2^2 = \boldsymbol{\sigma}_3^2 = \widehat{\mathbf{1}}^2 = \widehat{\mathbf{1}}$.

  b).- $\boldsymbol{\sigma}_i \boldsymbol{\sigma}_j = -\boldsymbol{\sigma}_j \boldsymbol{\sigma}_i$, para $i \neq j$.

  c).- $\boldsymbol{\sigma}_1 \boldsymbol{\sigma}_2 = i\boldsymbol{\sigma}_3$, $\boldsymbol{\sigma}_2 \boldsymbol{\sigma}_3 = i\boldsymbol{\sigma}_1$, $\boldsymbol{\sigma}_3 \boldsymbol{\sigma}_1 = i\boldsymbol{\sigma}_2$.

- Mostrar que para el conjunto de números complejos c_1, c_2, c_3 se cumple que:

$$\left(c_1 \boldsymbol{\sigma}_1 + c_2 \boldsymbol{\sigma}_2 + c_3 \boldsymbol{\sigma}_3\right)^2 = \left(c_1^2 + c_2^2 + c_3^2\right) \widehat{\mathbf{1}}.$$

Más de las matrices de Pauli

- Hallar los autovalores y los correspondientes autovectores (normalizados) para las las tres matrices de Pauli.
- Definamos la exponenciación de matrices via:

$$\exp\left(\widehat{\mathbf{M}}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\widehat{\mathbf{M}}^n}{n!}.$$

Muestre que:

$$\exp\left(\boldsymbol{\sigma}_i\right) = \cosh(1)\, \widehat{\mathbf{1}} + \sinh(1)\, \boldsymbol{\sigma}_i, \quad \text{para } i = 1, 2, 3.$$

y que:

$$\exp\left(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_3\right) = \cosh\left(\sqrt{2}\right) \widehat{\mathbf{1}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \sinh\left(\sqrt{2}\right) \left(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_3\right).$$

(**Hint** : Revise las expansiones en serie de las funciones sinh y cosh).

- Probar que $\exp(\boldsymbol{\sigma}_1 + \boldsymbol{\sigma}_3) \neq \exp(\boldsymbol{\sigma}_1)\exp(\boldsymbol{\sigma}_3)$.

Operadores Hermitianos

- Mostrar que si $\widehat{\mathbf{A}}$ es un operador lineal y $\left\langle a \middle| \widehat{\mathbf{A}} \middle| a \right\rangle$ es real para todo vector $|a\rangle$, entonces $\widehat{\mathbf{A}}$ es *Hermitiano*.
- Muestre que para un operador de la forma:

$$\widehat{\mathbf{A}} = c_a\,|a\rangle\langle a| + c_b\,|b\rangle\langle b| + \cdots + c_z\,|z\rangle\langle z|$$

  donde los coeficientes c_n son constantes reales, es *Hermitiano*.
- Ud. sabe que si un operador es *Hermitiano*, entonces todos sus autovalores son reales. Muestre que lo opuesto es falso a través de un contraejemplo. (**Hint** : Intente con una matriz 2×2 triangular superior).

Álgebra de conmutadores
Pruebe las siguientes relaciones:

- $\left[\widehat{\mathbf{A}}, b\widehat{\mathbf{B}} + c\widehat{\mathbf{C}}\right] = b\left[\widehat{\mathbf{A}}, \widehat{B}\right] + c\left[\widehat{\mathbf{A}}, \widehat{\mathbf{C}}\right]$
- $\left[a\widehat{\mathbf{A}} + b\widehat{\mathbf{B}}, \widehat{\mathbf{C}}\right] = a\left[\widehat{\mathbf{A}}, \widehat{\mathbf{C}}\right] + b\left[\widehat{\mathbf{B}}, \widehat{\mathbf{C}}\right]$
- $\left[\widehat{\mathbf{A}}, \widehat{\mathbf{B}}\widehat{\mathbf{C}}\right] = \widehat{\mathbf{B}}\left[\widehat{\mathbf{A}}, \widehat{\mathbf{C}}\right] + \left[\widehat{\mathbf{A}}, \widehat{\mathbf{B}}\right]\widehat{\mathbf{C}}$
- $\left[\widehat{\mathbf{A}}\widehat{\mathbf{B}}, \widehat{\mathbf{C}}\right] = \widehat{\mathbf{A}}\left[\widehat{\mathbf{B}}, \widehat{\mathbf{C}}\right] + \left[\widehat{\mathbf{A}}, \widehat{\mathbf{C}}\right]\widehat{\mathbf{B}}$
- Identidad de *Jacobi* : $\left[\widehat{\mathbf{A}}, \left[\widehat{\mathbf{B}}, \widehat{\mathbf{C}}\right]\right] + \left[\widehat{\mathbf{C}}, \left[\widehat{\mathbf{A}}, \widehat{\mathbf{B}}\right]\right] + \left[\widehat{\mathbf{B}}, \left[\widehat{\mathbf{C}}, \widehat{\mathbf{A}}\right]\right] = 0 \cdot \widehat{\mathbf{1}}$

Más operadores
La ecuación de valores propios $\widehat{\mathbf{A}}\,|m\rangle = a_m\,|m\rangle$ define cierta base $\{|m\rangle\}$, siendo a_m una cantidad real. Se define el operador $\widehat{\mathbf{U}}(m,n) = |m\rangle\langle n|$. A partir de esto:

- Demuestre que $\widehat{\mathbf{U}}^{\dagger}(m,n) = \widehat{\mathbf{U}}(n,m)$
- Evalúe el conmutador $\left[\widehat{\mathbf{A}}, \widehat{\mathbf{U}}(m,n)\right]$
- Pruebe la relación $\widehat{\mathbf{U}}(m,n)\,\widehat{\mathbf{U}}^{\dagger}(p,q) = \delta_{nq}\widehat{\mathbf{U}}(m,p)$
- Sea $\widehat{\mathbf{B}}$ un operador con elementos de matriz definidos por la expresión

$$B_{mn} = \left\langle m \middle| \widehat{\mathbf{B}} \middle| n \right\rangle$$

  Demuestre que:

$$\widehat{\mathbf{B}} = \sum_m \sum_n B_{mn}\widehat{\mathbf{U}}(m,n)$$

- Muestre que:

$$A_{pq} = \mathbf{tr}\left(\widehat{\mathbf{A}}\widehat{\mathbf{U}}^{\dagger}(p,q)\right)$$

Hermiticidad de operadores
Determine cual de los siguientes operadores son hermíticos considerando que $\widehat{\mathbf{x}}^\dagger = \widehat{\mathbf{x}}$ y $\widehat{\mathbf{p}}^\dagger = \widehat{\mathbf{p}}$:

- $\widehat{\mathbf{x}}\,\widehat{\mathbf{x}}\,\widehat{\mathbf{p}}$
- $\widehat{\mathbf{x}}\,\widehat{\mathbf{p}}\,\widehat{\mathbf{x}}$
- $\widehat{\mathbf{x}}\,\widehat{\mathbf{p}}\,\widehat{\mathbf{p}} + \widehat{\mathbf{p}}\,\widehat{\mathbf{p}}\,\widehat{\mathbf{x}}$
- $e^{\widehat{\mathbf{p}}}$

Operadores lineales
Determine cuales de los siguientes operadores son lineales:

- $\sqrt{(\cdot)}$
- $\sin(\cdot)$
- $x\dfrac{d}{dx}(\cdot)$
- $\dfrac{d}{dx}x(\cdot)$

Más respecto a operadores
Muestre que:

$$\left(\frac{d}{dx} + x\right)\left(\frac{d}{dx} - x\right) = \frac{d^2}{dx^2} - x^2 - 1$$

Pruebe en general que:

- Si $\widehat{\mathbf{A}}\widehat{\mathbf{A}}^\dagger = \widehat{\mathbf{1}}$, entonces $\det\left(\widehat{\mathbf{A}}\right)\det\left(\widehat{\mathbf{A}}\right)^* = 1$
- Si $\widehat{\mathbf{U}}^\dagger\widehat{\mathbf{O}}\widehat{\mathbf{U}} = \widehat{\mathbf{\Omega}}$ y $\widehat{\mathbf{U}}^\dagger\widehat{\mathbf{U}} = \widehat{\mathbf{1}}$, entonces $\det\left(\widehat{\mathbf{O}}\right) = \det\left(\widehat{\mathbf{\Omega}}\right)$
- Muestre que la traza de una matriz es invariante bajo una transformación unitaria, esto es, si $\widehat{\mathbf{\Omega}} = \widehat{\mathbf{U}}^\dagger\widehat{\mathbf{O}}\widehat{\mathbf{U}}$ para $\widehat{\mathbf{U}}^\dagger\widehat{\mathbf{U}} = \widehat{\mathbf{1}}$, entonces muestre que $\mathbf{tr}\left(\widehat{\mathbf{\Omega}}\right) = \mathbf{tr}\left(\widehat{\mathbf{O}}\right)$

Si $\widehat{\mathbf{A}}$ es una matriz $N \times M$ y $\widehat{\mathbf{B}}$ es una matriz $M \times K$, muestre que $\left(\widehat{\mathbf{A}}\widehat{\mathbf{B}}\right)^\dagger = \widehat{\mathbf{B}}^\dagger\widehat{\mathbf{A}}^\dagger$.

Si el producto $\widehat{\mathbf{C}} = \widehat{\mathbf{A}}\widehat{\mathbf{B}}$ de dos matrices hermitianas es también hermitiana, demuestre que $\widehat{\mathbf{A}}$ y $\widehat{\mathbf{B}}$ conmutan.

Contenido : *Problemas de valores propios y* $\overrightarrow{\mathbf{V}}$*ectores propios*

Muestre que xe^{-x^2} es una eigenfunción del operador lineal $\dfrac{d^2}{dx^2} - 4x^2$. ¿Cuál es el valor propio asociado?

Demuestre que los operadores $\left(x\frac{d}{dx}\right)$ y $\left(\frac{d}{dx}x\right)$ son lineales.

Se tiene dos funciones reales normalizadas $f(x)$ y $g(x)$ las cuales no son ortogonales. Muestre que su suma $f(x)+g(x)$ y su diferencia $f(x)-g(x)$ son ortogonales.

Verifique los siguientes commutadores, para ello suponga una función arbitraria sobre la cual operar:

- $\left[x, \frac{d}{dx}\right] = -1$
- $\left[x^2, \frac{d}{dx}\right] = -2x$

Halle los casos generales $\left[x^n, \frac{d}{dx}\right]$, $\left[\mathcal{L}(x), \frac{d}{dx}\right]$, siendo $\mathcal{L}(x)$ una función arbitraria de x.

Muestre que $\alpha\left[\widehat{\mathbf{A}}, \widehat{\mathbf{B}}\right] = \left[\alpha\widehat{\mathbf{A}}, \widehat{\mathbf{B}}\right] = \left[\widehat{\mathbf{A}}, \alpha\widehat{\mathbf{B}}\right]$, siendo α un escalar arbitrario.

Los autovectores del operador $\widehat{\mathbf{A}}$ son $|1\rangle$ y $|2\rangle$, los cuales son linealmente independientes (pero no son ortogonales) y están normalizados, ambos están asociados al mismo autovalor α (hay degenerancia!!!).

- Mostrar que $c_1|1\rangle + c_2|2\rangle$, donde c_1 y c_2 son escalares arbitrarios, es también un autovector de $\widehat{\mathbf{A}}$ con autovalor α.
- Construya dos combinaciones lineales $\left|\widetilde{1}\right\rangle$ y $\left|\widetilde{2}\right\rangle$ en términos de $|1\rangle$ y $|2\rangle$ que sean ortonormales $\Longrightarrow \left\langle\widetilde{i}\middle|\widetilde{j}\right\rangle = \delta_{ij}$

Demuestre que si el operador $\widehat{\mathbf{A}}$ es Hermitiano, entonces el adjunto de:

$$\exp\left(i\widehat{\mathbf{A}}\right) = \sum_n \frac{i^n}{n!}\widehat{\mathbf{A}}^n$$

es $\exp\left(-i\widehat{\mathbf{A}}\right)$.

Un operador unitario $\widehat{\mathbf{U}}$ es definido como:

$$\widehat{\mathbf{U}}\widehat{\mathbf{U}}^\dagger = \widehat{\mathbf{U}}^\dagger\widehat{\mathbf{U}} = \widehat{\mathbf{1}}$$

Demuestre que para un vector $|k\rangle$ ya normalizado, el vector $\left|\widehat{\mathbf{U}}k\right\rangle = \widehat{\mathbf{U}}|k\rangle$ también está normalizado.

Un operador unitario arbitrario $\widehat{\mathbf{U}}$ siempre puede ser descompuesto de la siguiente forma:

$$\widehat{\mathbf{U}} = \frac{\widehat{\mathbf{U}} + \widehat{\mathbf{U}}^\dagger}{2} + i\frac{\widehat{\mathbf{U}} - \widehat{\mathbf{U}}^\dagger}{2i} = \widehat{\mathbf{V}}_1 + i\widehat{\mathbf{V}}_2$$

- Muestre que $\widehat{\mathbf{V}}_1$ y $\widehat{\mathbf{V}}_2$ son operadores hermitianos.
- Muestre que $\left[\widehat{\mathbf{V}}_1, \widehat{\mathbf{V}}_2\right] = \left[\widehat{\mathbf{U}}, \widehat{\mathbf{V}}_1\right] = \left[\widehat{\mathbf{U}}, \widehat{\mathbf{V}}_2\right] = 0$, esto significa que los tres operadores tienen los mismos autovectores.
- Utilizando lo anterior demuestre que el módulo de los valores propios de $\widehat{\mathbf{U}}$ son igual a la unidad.

Se conoce que dos operadores $\widehat{\mathbf{A}}_1$ y $\widehat{\mathbf{A}}_2$ no conmutan, esto es:

$$\left[\widehat{\mathbf{A}}_1, \widehat{\mathbf{A}}_2\right] \neq 0$$

sin embargo ambos conmutan con el operador $\widehat{\mathbf{H}}$:

$$\left[\widehat{\mathbf{A}}_1, \widehat{\mathbf{H}}\right] = 0, \qquad \left[\widehat{\mathbf{A}}_2, \widehat{\mathbf{H}}\right] = 0$$

Con esta información demuestre que los autovalores de $\widehat{\mathbf{H}}$ son en general degenerados.

Obtenga las funciones propias de los siguientes operadores:

- $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{d^2}{dx^2}$
- $\dfrac{d^2}{dx^2} + k^2$

Para cada una de las siguientes funciones: $\exp(x)$, $x^2\exp(-x)$, $x^2\exp\left(x^2\right)$, $\exp\left(-x^2\right)$, $x\exp\left(-x^2\right)$ indique si es o no función propia del operador

$$\widehat{\mathbf{D}} = 4x^2 - \frac{d^2}{dx^2}$$

en caso afirmativo, obtenga el valor propio.

Más de matrices de Pauli

- Muestre que una matriz Hermitiana que conmuta con todas las matrices de Pauli:

$$\boldsymbol{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \qquad \boldsymbol{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

  y descritas en la base de $\boldsymbol{\sigma}_3$ (por algo esta es diagonal) debe ser un múltiplo de la matriz Identidad $\widehat{\mathbf{1}}_{2\times 2}$
- Muestre que una matriz hermitiana que anticonmute con las tres matrices de Pauli no existe.

Demostrar las siguientes identidades

- $\{\boldsymbol{\sigma}_i, \boldsymbol{\sigma}_j\} = 2\delta_{ij}\widehat{\mathbf{1}}$
- $[\boldsymbol{\sigma}_i, \boldsymbol{\sigma}_j] = 2i\epsilon_{ijk}\boldsymbol{\sigma}_k$
- $\boldsymbol{\sigma}_j^2 = \widehat{\mathbf{1}}$

Si $\overrightarrow{A}$ y $\overrightarrow{B}$ son dos vectores que conmutan con las tres matrices de Pauli, pero no necesariamente entre ellos, demuestre que:

$$\left(\overrightarrow{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \overrightarrow{A}\right)\left(\overrightarrow{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \overrightarrow{B}\right) = \overrightarrow{A} \cdot \overrightarrow{B} + i\overrightarrow{\boldsymbol{\sigma}}\left(\overrightarrow{A} \times \overrightarrow{B}\right)$$

siendo $\overrightarrow{\boldsymbol{\sigma}} = (\boldsymbol{\sigma}_1, \boldsymbol{\sigma}_2, \boldsymbol{\sigma}_3)$.

Asuma que $\overrightarrow{A}$, $\overrightarrow{B}$ y $\overrightarrow{C}$ son dos vectores que conmutan con las tres matrices de Pauli, entonces:

- Muestre que $tr\left(\overrightarrow{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \overrightarrow{A}\right) = 0$
- Evalúe $tr\left[\left(\overrightarrow{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \overrightarrow{A}\right)\left(\overrightarrow{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \overrightarrow{B}\right)\left(\overrightarrow{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \overrightarrow{C}\right)\right]$

Asuma como base aquella donde $\boldsymbol{\sigma}_3$ es diagonal (ver problema **Más de matrices de Pauli**).

Contenido : *Ecuación de Schrödinger*

$\widehat{\mathbf{H}}\left|\Psi_E(t)\right\rangle = i\hbar\frac{d}{dt}\left|\Psi_E(t)\right\rangle \implies \widehat{\mathbf{H}}\left|\phi_E\right\rangle = E\left|\phi_E\right\rangle \implies \left|\Psi_E(0)\right\rangle = \left|\phi_E\right\rangle$

En un sistema de dos niveles energéticos, el Hamiltoniano puede ser escrito como:

$$\widehat{\mathbf{H}} = E_1\left|1\right\rangle\left\langle 1\right| + E_2\left|2\right\rangle\left\langle 2\right| + V\left|1\right\rangle\left\langle 2\right| + \widetilde{V}\left|2\right\rangle\left\langle 1\right|$$

donde los estados $|1\rangle$ y $|2\rangle$ son estados ortonormales con autoenergías E_1 y E_2 respectivamente. Además V y $\widetilde{V}$ representan interacciones.

- Demostrar que $\widehat{\mathbf{H}}$ es hermitiano si $V = \widetilde{V}$.
- Investigar el efecto de la actuación de Hamiltoniano sobre los estados $|1\rangle$ y $|2\rangle$. ¿Son éstos autoestados de $\widehat{\mathbf{H}}$?.
- Especificar para el caso en que V es una constante. Encontrar los valores propios y estados propios del Hamiltoniano. Especialmente considere el límite de $V \ll E_i$ $(i = 1, 2)$.

Si $\widehat{\mathbf{H}} = \dfrac{\widehat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \widehat{\mathbf{V}}\left(\widehat{\mathbf{x}}\right)$, evalúe $\left[\widehat{\mathbf{H}}, \widehat{\mathbf{x}}\right]$. Utilice el resultado anterior para demostrar que:

$$-i\frac{\hbar}{m}\left\langle k\left|\widehat{\mathbf{p}}\right|l\right\rangle = \left(E_k - E_l\right)\left\langle k\left|\widehat{\mathbf{x}}\right|l\right\rangle$$

donde el conjunto $\{|k\rangle\}$ son autoestados del Hamiltoniano.
