

Guía I : Herramientas matemáticas
Mecánica Cuántica I
Licenciatura en Física mención Astronomía - 2022
IPGG

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

Matrices de Pauli

Las matrices de Pauli están dadas por las siguientes identidades:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

- Muestre que las cuatro matrices $\{\hat{\mathbf{1}}, \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}$, constituyen una base para las matrices de 2×2 . Muestre que la siguiente matriz:

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

puede ser escrita como $\hat{\mathbf{A}} = z_0 \hat{\mathbf{1}} + z_1 \sigma_1 + z_2 \sigma_2 + z_3 \sigma_3$. Halle las fórmulas para los coeficientes z_i en términos de las cantidades a_{ij} .

- Demostrar que:
 - a).- $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = \hat{\mathbf{1}}^2 = \hat{\mathbf{1}}$.
 - b).- $\sigma_i \sigma_j = -\sigma_j \sigma_i$, para $i \neq j$.
 - c).- $\sigma_1 \sigma_2 = i \sigma_3$, $\sigma_2 \sigma_3 = i \sigma_1$, $\sigma_3 \sigma_1 = i \sigma_2$.
- Mostrar que para el conjunto de números complejos c_1, c_2, c_3 se cumple que:

$$(c_1 \sigma_1 + c_2 \sigma_2 + c_3 \sigma_3)^2 = (c_1^2 + c_2^2 + c_3^2) \hat{\mathbf{1}}.$$

Más de las matrices de Pauli

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

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

Muestre que:

$$\exp(\sigma_i) = \cosh(1) \hat{\mathbf{1}} + \sinh(1) \sigma_i, \quad \text{para } i = 1, 2, 3.$$

y que:

$$\exp(\sigma_1 + \sigma_3) = \cosh(\sqrt{2}) \hat{\mathbf{1}} + \frac{1}{\sqrt{2}} \sinh(\sqrt{2}) (\sigma_1 + \sigma_3).$$

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

- Probar que $\exp(\sigma_1 + \sigma_3) \neq \exp(\sigma_1) \exp(\sigma_3)$.
-

Operadores Hermitianos

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

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

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:

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

Más operadores

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

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

$$B_{mn} = \langle m|\hat{\mathbf{B}}|n\rangle$$

Demuestre que:

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

- Muestre que:

$$A_{pq} = \text{tr}(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}}^\dagger(p, q))$$

Hermiticidad de operadores

Determine cual de los siguientes operadores son hermiticos considerando que $\hat{\mathbf{x}}^\dagger = \hat{\mathbf{x}}$ y $\hat{\mathbf{p}}^\dagger = -\hat{\mathbf{p}}$:

- $\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{p}}$
- $\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{x}}$
- $\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{x}}$
- $e^{\hat{\mathbf{p}}}$

Operadores lineales

Determine cuales de los siguientes operadores son lineales:

- $\sqrt{(\cdot)}$

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

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

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

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

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

Muestre que xe^{-x^2} es una eigenfunción del operador lineal $\frac{d^2}{dx^2} - 4x^2$. ¿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 conmutadores, 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 $\alpha \left[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}} \right] = \left[\alpha \hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}} \right] = \left[\hat{\mathbf{A}}, \alpha \hat{\mathbf{B}} \right]$, siendo α un escalar arbitrario.

Los autovectores del operador $\hat{\mathbf{A}}$ 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 $\hat{\mathbf{A}}$ con autovalor α .
- Construya dos combinaciones lineales $|\tilde{1}\rangle$ y $|\tilde{2}\rangle$ en términos de $|1\rangle$ y $|2\rangle$ que sean ortonormales $\implies \langle \tilde{i} | \tilde{j} \rangle = \delta_{ij}$

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

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

es $\exp(-i\hat{\mathbf{A}})$.

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

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

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

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

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

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

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

$$[\hat{\mathbf{A}}_1, \hat{\mathbf{A}}_2] \neq 0$$

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

$$[\hat{\mathbf{A}}_1, \hat{\mathbf{H}}] = 0, \quad [\hat{\mathbf{A}}_2, \hat{\mathbf{H}}] = 0$$

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

Obtenga las funciones propias de los siguientes operadores:

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

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

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

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:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

y descritas en la base de σ_3 (por algo esta es diagonal) debe ser un múltiplo de la matriz Identidad $\hat{\mathbf{1}}_{2 \times 2}$

- Muestre que una matriz hermitiana que anticonmute con las tres matrices de Pauli no existe.
-

Demostrar las siguientes identidades

- $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}\hat{\mathbf{1}}$
 - $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k$
 - $\sigma_j^2 = \hat{\mathbf{1}}$
-

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

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B}) = \vec{A} \cdot \vec{B} + i\vec{\sigma} \cdot (\vec{A} \times \vec{B})$$

siendo $\vec{\sigma} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$.

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

- Muestre que $\text{tr}(\vec{\sigma} \cdot \vec{A}) = 0$
- Evalúe $\text{tr}[(\vec{\sigma} \cdot \vec{A})(\vec{\sigma} \cdot \vec{B})(\vec{\sigma} \cdot \vec{C})]$

Asuma como base aquella donde σ_3 es diagonal (ver problema **Más de matrices de Pauli**).

Contenido : Ecuación de Schrödinger

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

Considere el valor de expectación del momentum (unidimensional):

$$\langle p \rangle = \int dx \psi^*(x, t) \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, t)$$

donde $\psi(x, t)$ es una función de onda normalizable (esto es, se anula en el infinito). Integrando por partes demuestre que el operador:

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

es hermitiano.

Una partícula en una caja con bordes impenetrables en $x = 0$ y $x = a$, tiene la siguiente función de onda en algún tiempo inicial:

$$\Phi(x) = \frac{1}{\sqrt{5a}} \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right) + \frac{3}{\sqrt{5a}} \sin\left(\frac{3\pi x}{a}\right)$$

- ¿Cuáles son los posibles resultados de una medición de la energía E del sistema y con qué probabilidad de que ocurran?
- ¿Cuál es la forma de la función de onda después de una medición?
- Supongamos que inmediatamente después de una medición, la energía se mide de nuevo. ¿Cuáles son ahora las probabilidades relativas de los posibles resultados?

Un electrón se encuentra en el estado fundamental de un pozo infinito ubicado entre $x = 0$ y $x = a$. De repente una pared se mueve de $x = a$ hasta $x = 2a$. ¿Cuál es la probabilidad de que el electrón se encuentre en:

- El estado fundamental de la nueva caja.
- El primer estado excitado de la nueva caja.

El conjunto $\{\phi_n(x)\}$ denota los estados ortonormales de un sistema cuántico, cada uno correspondiente a una energía E_n . Supongamos que la función de onda normalizada del sistema en el tiempo $t = 0$ es $\Phi(x, 0)$. Una medida de la energía obtiene el valor de E_1 con una probabilidad de $\frac{1}{2}$, E_2 con una probabilidad de $\frac{3}{8}$ y E_3 con una probabilidad de $\frac{1}{8}$.

- Escriba la expresión más general para $\Phi(x, 0)$.
- ¿Cuál es la expresión correspondiente a $\Phi(x, t)$, la función de onda del sistema en el tiempo t ?
- Demostrar explícitamente que el valor esperado del Hamiltoniano $\hat{\mathbf{H}}$ no cambia con el tiempo.

Considere la ecuación Schrödinger para un potencial complejo:

$$V(x) = V_1(x) + iV_2(x)$$

donde ambos $V_1(x)$ y $V_2(x)$ son reales.

- ¿Es hermítico el Hamiltoniano?
- Demuestre que la normalización es dependiente del tiempo.
- Proporcione una interpretación física de los resultados. ¿Qué posible uso puede pensar para este potencial?

Para un estado estacionario arbitrario, $|n\rangle$, de una partícula en un pozo de potencial infinito, determine el producto de las incertezas $\Delta x \cdot \Delta p$.

Una partícula se mueve en una dimensión en una región donde el potencial está dado por $V(x)$. Muestre que el valor esperado del momentum en un estado estacionario, con autoenergías discretas, es cero.

Hint : Analice el conmutador $[\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{x}}]$.

Demuestre que una función de onda no degenerada siempre puede ser elegida como real. Luego demuestre que la corriente de probabilidad $J(x, t)$ es cero para cualquier estado ligado.

Considere la ecuación de movimiento de Heisenberg de $\langle xp \rangle$. Muestre que para un estado estacionario

$$\frac{d\langle xp \rangle}{dt} = 0$$

Por lo tanto, demostrar que:

$$\left\langle \frac{p^2}{m} \right\rangle = \left\langle x \frac{dV}{dx} \right\rangle$$

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

$$\hat{\mathbf{H}} = E_1 |1\rangle \langle 1| + E_2 |2\rangle \langle 2| + V |1\rangle \langle 2| + \tilde{V} |2\rangle \langle 1|$$

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

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

Considere a una partícula descrita por la función de onda:

$$\Psi(x, t) = A \exp\left(-\frac{|x|}{L} - i\frac{Et}{\hbar}\right)$$

- Determine el valor de la constante de normalización A .
 - Obtenga la probabilidad de encontrar a la partícula entre 0 y L , y luego entre L y $2L$.
 - Halle $\langle x \rangle$ y $\langle x^2 \rangle$.
-

Utilizando la función de onda del problema anterior, obtenga:

- $\Phi(p, t)$.
 - Halle $\langle p \rangle$ y $\langle p^2 \rangle$.
 - Obtenga la probabilidad de encontrar a la partícula con momentum entre 0 y $\left(\frac{\hbar}{L}\right)$.
-

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

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

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