Parcial 1

Mecánica Cuántica

Fernando Londoño[1] and Thomas Martinod[2]

[1]Ingeniería Física, Universidad EAFIT, Colombia, *flondonop@eafit.edu.co*
[2]Ingeniería Física, Universidad EAFIT, Colombia, *tmartinods@eafit.edu.co*

Resumen

El presente documento corresponde a la entrega del primer parcial del curso de Mecánica Cuántica, impartido en la Universidad EAFIT. En este se presentan dos operadores hermíticos H y L que actuan en el espacio de Hilbert $\mathbb{C}^3$, y se realiza un análisis de los temas de formalismo matemático de la mecánica cuántica vistos en el curso.

Instrucciones. El examen se debe resolver en parejas, no se admiten exámenes individuales. No puede haber comunicación entre parejas. Pueden usar algún software para desarrollar los cálculos matemáticos. Sólo se debe usar las notas de clase o el texto guía. Cada pareja debe hacer y entregar un documento tipo artículo (latex o word). La segunda parte del examen consiste en una evaluación "peer-to-peer".

Nota. Se recomienda encarecidamente leer este documento en conjunto con el código desarrollado en Python, el cual está ampliamente descrito y documentado en un cuaderno de Jupyter. El código está disponible en: https://github.com/thomas-martinod/mecanica-cuantica en la carpeta *parcial-1*.

Problema 1. Construya dos operadores (matrices) Hermíticos H y L que actúen sobre un espacio de Hilbert tridimensional. Los operadores deben tener por lo menos una entrada compleja.

El examen se basa en emplear las representaciones matriciales de dos operadores lineales $\hat{H}$, $\hat{L}$ que actúan en el espacio de Hilbert $\mathbb{C}^3$. Para ello, se establecerá una base arbitraria $B = \{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle\}$ sobre la que se escribirán los vectores y matrices a emplear.

Inicialmente se deben definir dos matrices hermíticas que representen los operadores lineales $\hat{H}$ y $\hat{L}$. Se eligieron para el desarrollo del parcial las siguientes matrices:

$$H = \begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 3 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad L = \pi \begin{bmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix} \tag{1}$$

Para probar su hermiticidad, se aplica el operador daga sobre cada matriz y se puede ver que:

$$H^\dagger = \left(\begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 3 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix}^T \right)^* = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 3 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{bmatrix}^* = \begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 3 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix} = H \tag{2}$$

$$L^\dagger = \left(\pi \begin{bmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix}^T \right)^* = \pi \begin{bmatrix} 1 & -i & 0 \\ i & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix}^* = \pi \begin{bmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix} = L \tag{3}$$

Luego, por definición, como ambos operadores son iguales a su adjunto, estos operadores son hermíticos.

Problema 2. Calcule el conmutador $[H, L]$.

El conmutador de las matrices H y L se calcula como:

$$\begin{aligned}[H,L] &= HL - LH \\ &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 3 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \pi & i\pi & 0 \\ -i\pi & 2\pi & \pi \\ 0 & \pi & 3\pi \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \pi & i\pi & 0 \\ -i\pi & 2\pi & \pi \\ 0 & \pi & 3\pi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 3 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & -2i\pi & 2i\pi \\ -2i\pi & 0 & 2\pi \\ 2i\pi & -2\pi & 0 \end{bmatrix}\end{aligned} \tag{4}$$

que es diferente de la matriz nula de orden 3 ($\mathcal{O}_3$). Luego, las matrices H y L no conmutan y sus operadores respectivos $\hat{H}$ y $\hat{L}$ tampoco.

Problema 3. Calcule los autovalores y los autovectores de H y L. Para los autovectores de ambos operadores construya las expresiones normalizadas para las bases $\{|h_1\rangle, |h_2\rangle, |h_3\rangle\}$ y $\{|l_1\rangle, |l_2\rangle, |l_3\rangle\}$.

Para calcular los autovalores y autovectores de la matriz H, se establece la ecuación de autovalores y autovectores:

$$H\,|h\rangle = \lambda\,|h\rangle \tag{5}$$

que se puede reescribir como:

$$(H - \mathcal{I}_3\lambda)\,|h\rangle = 0 \tag{6}$$

y como se desean kets $|h\rangle$ no nulos, la matriz inversa de $H - \mathcal{I}_3\lambda$ no debe existir. Luego, $H - \mathcal{I}_3\lambda$ es una matriz singular, y por ende su determinante es nulo. Así, se obtiene la ecuación característica:

$$\begin{vmatrix} 0-\lambda & 0 & i \\ 0 & 3-\lambda & 0 \\ -i & 0 & 0-\lambda \end{vmatrix} = 0 \tag{7}$$

Empleando `Sympy`, los autovalores para H son:

$$\lambda_1 = -1, \quad \lambda_2 = 1, \quad \lambda_3 = 3 \tag{8}$$

Ahora, si se reemplaza la matriz H y el primer autovalor λ_1 en la ecuación de autovalores, se obtiene el sistema de ecuaciones:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 3 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = -1 \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \tag{9}$$

cuya solución única son las componentes del autovector $|h_1\rangle = (x, y, z)$ escritas en la base B. Realizando este proceso para cada uno de los autovalores en `Sympy`, se obtienen los autokets $|h_i\rangle$ respectivos a cada autovalor λ_i mostrados a continuación:

$$|h_1\rangle = \begin{bmatrix} -i \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |h_2\rangle = \begin{bmatrix} i \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |h_3\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{10}$$

Repitiendo el proceso enunciado anteriormente para los autovalores y autovectores de la matriz L, se obtienen los autovalores:

$$\lambda_1 = 2\pi, \quad \lambda_2 = \pi(-\sqrt{3}+2), \quad \lambda_3 = \pi(\sqrt{3}+2) \tag{11}$$

cuyos respectivos autovectores son:

$$|l_1\rangle = \begin{bmatrix} -i \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |l_2\rangle = \begin{bmatrix} i(\sqrt{3}+2) \\ -\sqrt{3}-1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad |l_3\rangle = \begin{bmatrix} i\left(2-\sqrt{3}\right) \\ -1+\sqrt{3} \\ 1 \end{bmatrix} \tag{12}$$

Ahora, para normalizar estos autovectores (para los de H y los de L), se debe calcular la norma de cada uno de los autokets $|h_i\rangle$, y $|l_i\rangle$ enseñados anteriormente. Para ello, se tiene en cuenta que la norma de un vector en un espacio vectorial complejo, se puede hallar como:

$$\|\psi\| := \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle} = \left(\sum_{i=1}^{n} {\psi_i}^2\right)^{1/2} \tag{13}$$

El código desarrollado usando `SymPy` arroja las siguientes normas para los autokets obtenidos del operador H:

$$\|h_1\| = \sqrt{2}, \quad \|h_2\| = \sqrt{2}, \quad \|h_3\| = 1 \tag{14}$$

y de forma similar, para los autokets obtenidos del operador L se tiene:

$$\|l_1\| = \sqrt{3}, \quad \|l_2\| = \sqrt{6\sqrt{3}+12}, \quad \|l_3\| = \sqrt{12-6\sqrt{3}} \tag{15}$$

Entonces, para obtener los autokets normalizados se debe **redefinir**:

$$|h_i\rangle := \frac{1}{\|h_i\|}\,|h_i\rangle\,, \quad |l_i\rangle := \frac{1}{\|l_i\|}\,|l_i\rangle \tag{16}$$

para $i = 1, 2, 3$. Realizando este proceso en la función *Normalize* desarrollada en `SymPy`, se obtienen los autovectores normalizados para el operador H:

$$|h_1\rangle = \begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{2}i}{2} \\ 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}, \quad |h_2\rangle = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}i}{2} \\ 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}, \quad |h_3\rangle = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{17}$$

y también los autovectores normalizados para el operador L:

$$|l_1\rangle = \begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{3}i}{3} \\ -\frac{\sqrt{3}}{3} \\ \frac{\sqrt{3}}{3} \end{bmatrix}, \quad |l_2\rangle = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{-12-6\sqrt{3}}}{6} \\ -\frac{\sqrt{6}\left(1+\sqrt{3}\right)}{6\sqrt{\sqrt{3}+2}} \\ \frac{\sqrt{6}}{6\sqrt{\sqrt{3}+2}} \end{bmatrix}, \quad |l_3\rangle = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{-12+6\sqrt{3}}}{6} \\ \frac{\sqrt{6}\left(-1+\sqrt{3}\right)}{6\sqrt{2-\sqrt{3}}} \\ \frac{\sqrt{6}}{6\sqrt{2-\sqrt{3}}} \end{bmatrix} \tag{18}$$

Y puede ser verificado que cada uno de estos nuevos vectores tiene norma 1 (se hace en el código). **Nota:** De ahora en adelante, cada vez que se haga referencia a los kets $|h_i\rangle$, o, $|l_i\rangle$, se pretenderá referirse a los autokets **normalizados**.

Problema 4. Estudie la degeneración de los operadores H y L.

Dado que la matriz H no presenta valores propios repetidos, como se aprecia en la ecuación (8), y el caso es análogo en la matriz L, como se aprecia en la ecuación (11), podemos decir que este sistema cuántico no presenta degeneración.

Por lo tanto, el sistema cuántico (en caso de ser una representación de un sistema físico) sería un sistema no degenerado, lo que indica que a cada estado cuántico le corresponde un único valor energético. Esto podría implicar que el sistema no presenta simetrías y es sensible a las perturbaciones.

Problema 5. ¿Es posible construir una base común para H y L? En caso afirmativo, constrúyala.

No es posible crear una base común para ambos operadores. Para comprender por qué, podemos recurrir al teorema 3 expuesto en la sección 2.4.8 del texto guía [1].

Teorema 1. *Si dos operadores hermíticos, $\hat{A}$ y $\hat{B}$, conmutan y si $\hat{A}$ no tiene valores propios degenerados, entonces cada autovector de $\hat{A}$ también es un autovector de $\hat{B}$. Además, podemos construir una base ortonormal común que está formada por los autovectores conjuntos de $\hat{A}$ y $\hat{B}$.*

En general, las bases comunes hacen referencia a conjuntos de autovectores de dos operadores hermíticos, tal que cada autovector de un operador $\hat{A}$ es un múltiplo escalar de alguno de los autovectores del operador $\hat{B}$, de modo que se comparten todos los autovectores (en el caso no degenerado).

Sin embargo, como las matrices H y L definidas anteriormente no conmutan (ver problema 2), el teorema no garantiza la existencia de la base común, puesto que se viola la principal hipótesis del mismo. No obstante, el teorema no indica si esta base puede ser creada o no al no conmutar.

Para ver que no es posible esto, consideremos que el ket $|l_1\rangle$ se puede escribir como combinación lineal de los autovectores de H, en particular, $|l_1\rangle = |h_1\rangle - |h_3\rangle$. Luego, si tratásemos de introducir $|l_1\rangle$ a la base formada por los autovectores de H, este se convertiría en un conjunto linealmente dependiente, perdiendo así su estatus de base.

Un razonamiento similar aplica para cualquier múltiplo escalar de $|l_1\rangle$, siempre será una combinación lineal de las $|h_i\rangle$ y por ende se perderá al menos uno de los autovalores de L, imposibilitando la creación de la base común.

Problema 6. Construya las matrices que representan los proyectores en esos autovectores (para los dos operadores). Luego verifique si las bases satisfacen las relaciones de ortogonalidad y completez.

En este punto, es esencial entonces crear las dos bases B_H y B_L dadas por los autokets normalizados de ambos operadores como:

$$B_H = \left\{ \begin{bmatrix} -i \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} i \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \right\}, \quad B_L = \left\{ \begin{bmatrix} -i \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} i(\sqrt{3}+2) \\ -\sqrt{3}-1 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} i\left(2-\sqrt{3}\right) \\ -1+\sqrt{3} \\ 1 \end{bmatrix} \right\} \tag{19}$$

Dada una base B, el operador de proyección sobre una de las componentes $|b_i\rangle$ se define como el ket-bra $|b_i\rangle\langle b_i|$, es decir, el producto matricial:

$$|b_i\rangle\langle b_i| = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1^* & b_2^* & \cdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 b_1^* & b_1 b_2^* & \cdots \\ b_2 b_1^* & b_2 b_2^* & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \tag{20}$$

Entonces, simplemente se trata de computar el producto de cada ket con su respectivo bra. Para $|h_1\rangle$, su operador proyección viene dado por:

$$|h_1\rangle\langle h_1| = \begin{bmatrix} -i \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} i & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & -\frac{i}{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{i}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \tag{21}$$

Y computando en `SymPy` el resto de productos de los $|h_i\rangle$ se obtiene:

$$|h_2\rangle\langle h_2| = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{i}{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\frac{i}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad |h_3\rangle\langle h_3| = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{22}$$

Similarmente, los proyectores de los componentes de la base B_L son:

$$\begin{gathered} |l_1\rangle\langle l_1| = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{i}{3} & -\frac{i}{3} \\ -\frac{i}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ \frac{i}{3} & -\frac{1}{3} & \frac{1}{3} \end{bmatrix}, \quad |l_2\rangle\langle l_2| \approx \begin{bmatrix} 0{,}622 & -0{,}455i & 0{,}167i \\ 0{,}455i & 0{,}333 & -0{,}122 \\ -0{,}167i & -0{,}122 & 0{,}0447 \end{bmatrix} \\ |l_3\rangle\langle l_3| \approx \begin{bmatrix} 0{,}0447 & 0{,}122i & 0{,}167i \\ -0{,}122i & 0{,}333 & 0{,}455 \\ -0{,}167i & 0{,}455 & 0{,}622 \end{bmatrix} \end{gathered} \tag{23}$$

Las últimas dos matrices se presentan numéricamente, puesto que en el código desarrollado se observa que `SymPy` llega a expresiones radicales irreducibles muy grandes.

Ahora, usemos estos proyectores para verificar la relación de completez del espacio de Hilbert en términos de las representaciones matriciales de los kets base. Un conjunto de kets en el espacio de Hilbert de dimensión n se dice completo si y solo si, se cumple que:

$$\sum_{i=1}^{n} |b_i\rangle\langle b_i| = \mathcal{I}_n \tag{24}$$

Entonces, debemos calcular para cada una de las bases creadas esta sumatoria, y ver si se obtiene la identidad de orden 3. Para la base B_H se tiene que:

$$\sum_{i=1}^{3} |h_i\rangle\langle h_i| = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & -\frac{i}{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{i}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & 0 & \frac{i}{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ -\frac{i}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathcal{I}_3 \tag{25}$$

Realizando el cálculo idéntico para la base L, se tiene:

$$\sum_{i=1}^{3} |l_i\rangle\langle l_i| = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathcal{I}_3 \tag{26}$$

Luego, ambos conjuntos por separado son conjuntos completos, lo que quiere decir que ambos conjuntos *generan* todo el espacio ($\text{gen}(B_H) = \text{gen}(B_L) = \mathbb{C}^3$).

Para ver que estos conjuntos representan una base, falta ver su ortonormalidad, es decir, verificar que $\langle h_i|h_j\rangle = \delta_{ij}$ y $\langle l_i|l_j\rangle = \delta_{ij}$ para $i, j = 1, 2, 3$.

Se enseñará el primer cálculo realizado a mano, y la verificación de todos los casos se enseña por completo en el código. Haciendo el producto interno de $|h_1\rangle$ consigo mismo, se obtiene:

$$\langle h_1|h_1\rangle = \begin{bmatrix} i & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -i \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = 1 \tag{27}$$

lo que indica que este tiene norma 1. Ahora, usando `SymPy` para calcular las 2×9 combinaciones, se obtuvo que $\langle h_i|h_j\rangle = \delta_{ij}$ y $\langle l_i|l_j\rangle = \delta_{ij}$ para todo $i, j = 1, 2, 3$.

Estos resultados igual se pueden demostrar de forma general dada la ya verificada hermiticidad de las matrices H y L. El teorema se encuentra enunciado en el teorema 2 de la misma sección del libro de *Zetilli* mencionada anteriormente.

Problema 7. Construya la matriz U que transforma de la base $\{h_i\}$ a la base $\{l_i\}$. Muestre que $U^{-1} = U^\dagger$. Verifique que $U^\dagger U = I$. Calcule cómo se transforma la matriz H bajo U, es decir, $H' = UHU^\dagger$.

Consideremos las bases $B_H = \{|h_i\rangle\}$ y $B_L = \{|l_i\rangle\}$. Para responder a ¿cómo transforma la escritura de un vector en la base B_H a ese mismo vector en la base B_L?, debemos analizar la transformación de los vectores base $|h_j\rangle$. Para ello, veamos que:

$$|h_j\rangle = \mathcal{I}_3 |h_j\rangle = \left(\sum_{i=1}^{3} |l_i\rangle\langle l_i| \right) |h_j\rangle = \sum_{i=1}^{3} U_{ij} |l_i\rangle \tag{28}$$

donde la matriz $U_{H\to L} = U$ viene definida por sus componentes como $U_{ij} = \langle l_i|h_j\rangle$. En general, un vector escrito en la base B_H transforma a su escritura en la base B_L como:

$$|\phi\rangle_L = U_{H\to L} |\phi\rangle_H = U |\phi\rangle_H \tag{29}$$

La matriz U viene dada entonces por:

$$U = \begin{bmatrix} \langle l_1|h_1\rangle & \langle l_1|h_2\rangle & \langle l_1|h_3\rangle \\ \langle l_2|h_1\rangle & \langle l_2|h_2\rangle & \langle l_2|h_3\rangle \\ \langle l_3|h_1\rangle & \langle l_3|h_2\rangle & \langle l_3|h_3\rangle \end{bmatrix} \tag{30}$$

Calculando la primera componente:

$$U_{11} = \langle l_1|h_1\rangle = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}i}{3} & -\frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{3}}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{2}i}{2} \\ 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} = \frac{\sqrt{6}}{3} \tag{31}$$

y el resto se calculan usando `SymPy`. La matriz U se enseña a continuación:

$$U = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{6}}{3} & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{3} \\ \frac{-3-\sqrt{3}}{6\sqrt{\sqrt{3}+2}} & \frac{1+\sqrt{3}}{2\sqrt{\sqrt{3}+2}} & \frac{-3\sqrt{2}-\sqrt{6}}{6\sqrt{\sqrt{3}+2}} \\ \frac{\sqrt{2-\sqrt{3}}(\sqrt{3}+3)}{6} & \frac{(1+\sqrt{3})\sqrt{2-\sqrt{3}}}{2} & \frac{\sqrt{2-\sqrt{3}}(\sqrt{6}+3\sqrt{2})}{6} \end{bmatrix} \tag{32}$$

En `SymPy`, se podrá observar un método diferente para calcular esta matriz de transformación. Para prueba informal de este método, consideremos que un *vector* es una forma invariante ante cualquier cambio de coordenadas.

El álgebra lineal indica que la matriz de transformación de cualquier base a la base canónica $B = \{|e_1\rangle, |e_2\rangle, |e_3\rangle\}$ es la matriz compuesta por los vectores de la nueva base. Es decir, $x_B = P_H x_H$ para toda base compuesta por las columnas de P_H que genere el mismo espacio que B.

Aplicando este razonamiento con las bases B_H y B_L,

$$P_H x_H = x_B = P_L x_L \tag{33}$$

es fácil ver que para convertir un vector escrito en la base B_H a un vector escrito en la base B_L, se debe hacer:

$$x_L = {P_L}^{-1} P_H x_H \tag{34}$$

de modo que la matriz de transformación es $U_{H\to L} = U = {P_L}^{-1} P_H$. Esta forma es importante, puesto que en `SymPy` se cuenta con estas matrices de inmediato, correspondiendo a *NHvects* y *NLvects*.

Ahora, para verificar que $U^{-1} = U^\dagger$, se empleó la forma equivalente de esta expresión $U^{-1} - U^\dagger = \mathcal{O}_3$ (puesto que la resta en los complejos es más eficiente que la comparación). Calculando la forma de ambas matrices involucradas, estas son:

$$U^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{6}}{3} & \frac{-3-\sqrt{3}}{6\sqrt{\sqrt{3}+2}} & \frac{\sqrt{3}+3}{6\sqrt{2-\sqrt{3}}\left(\sqrt{3}+2\right)} \\ 0 & -\frac{\sqrt{\sqrt{3}+2}}{2} + \frac{\sqrt{3}\sqrt{\sqrt{3}+2}}{2} & \frac{\sqrt{3}+2}{\sqrt{2-\sqrt{3}}\cdot\left(5+3\sqrt{3}\right)} \\ -\frac{\sqrt{3}}{3} & -\frac{\sqrt{2}\sqrt{\sqrt{3}+2}}{2} + \frac{\sqrt{6}\sqrt{\sqrt{3}+2}}{6} & \frac{\sqrt{2}+\sqrt{6}}{2\sqrt{2-\sqrt{3}}\cdot\left(3+2\sqrt{3}\right)} \end{bmatrix} \tag{35}$$

$$U^\dagger = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{6}}{3} & \frac{-3-\sqrt{3}}{6\sqrt{\sqrt{3}+2}} & \frac{\sqrt{2-\sqrt{3}}\left(\sqrt{3}+3\right)}{6} \\ 0 & \frac{1+\sqrt{3}}{2\sqrt{\sqrt{3}+2}} & \frac{\left(1+\sqrt{3}\right)\sqrt{2-\sqrt{3}}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{-3\sqrt{2}-\sqrt{6}}{6\sqrt{\sqrt{3}+2}} & \frac{\sqrt{2-\sqrt{3}}\left(\sqrt{6}+3\sqrt{2}\right)}{6} \end{bmatrix} \tag{36}$$

Y al restarlas (usando `SymPy`) se obtiene, $U^{-1} - U^\dagger = \mathcal{O}_3$, verificando la igualdad. Ahora, dado que $U^{-1} = U^\dagger$, se debería cumplir que $U^\dagger U = \mathcal{I}_3$. Conociendo las matrices, solo falta multiplicarlas. En `SymPy`, es fácil ver que esto se cumple.

Finalmente, para calcular como transforma la matriz H (asumiendo que está escrita en la base B_H), se debe calcular el producto $H_L = UHU^\dagger$. Haciendo el cálculo numérico en `SymPy` se obtuvo de forma aproximada:

$$H_L = UHU^\dagger \approx \begin{bmatrix} 0 & -0{,}707i & 0{,}707i \\ 0{,}707i & 1{,}5 & 1{,}5 - 3{,}84\cdot 10^{-12} i \\ -0{,}707i & 1{,}5 + 4{,}64\cdot 10^{-12} i & 1{,}5 \end{bmatrix} \tag{37}$$

Problema 8. Calcule la traza y el determinante de las matrices H y L y compárelos con la traza y el determinante de esas mismas matrices en su forma diagonal.

Para realizar el cálculo de la traza de las matrices debemos entender que la traza es la suma de las componentes de la diagonal principal de una matriz cuadrada de dimensión n:

$$\mathrm{Tr}(A) = \sum_{i=1}^{n} a_{ii} \tag{38}$$

De este modo, las trazas de las matrices H y L serán entonces:

$$\mathrm{Tr}(H) = \mathrm{Tr}\left(\begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 3 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix}\right) = 0 + 3 + 0 = 3 \tag{39}$$

$$\mathrm{Tr}(L) = \mathrm{Tr}\left(\begin{bmatrix} \pi & i\pi & 0 \\ -i\pi & 2\pi & \pi \\ 0 & \pi & 3\pi \end{bmatrix}\right) = \pi + 2\pi + 3\pi = 6\pi \tag{40}$$

Similarmente, para realizar el cálculo de los determinantes, se tiene entonces que el determinante de una matriz A cuadrada será:

$$\det(A) = \sum_{j=1}^{n} a_{ij} C_{ij} = \sum_{i=1}^{n} a_{ij} C_{ij} \tag{41}$$

donde C_{ij} es el cofactor i, j de la matriz A. Computando en `SymPy` el determinante de las matrices H y L, se obtiene que:

$$\det(H) = \det\left(\begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 3 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix}\right) = -3 \tag{42}$$

$$\det(L) = \det\left(\begin{bmatrix} \pi & i\pi & 0 \\ -i\pi & 2\pi & \pi \\ 0 & \pi & 3\pi \end{bmatrix}\right) = 2\pi^3 \tag{43}$$

Por otra parte, la diagonalización de una matriz se basa en encontrar una matriz diagonal D y una matriz invertible P tal que $P^{-1}AP = D$, donde A es la matriz que se desea diagonalizar. En otras palabras, se busca una matriz de cambio de base P que transforme la matriz A en una forma diagonal D.

En general, esto permite simplificar cálculos y entender mejor las propiedades de la matriz original, ya que la forma diagonal facilita la identificación de valores propios y la resolución de sistemas de ecuaciones lineales. La diagonalización es posible si la matriz A tiene n vectores propios linealmente independientes, lo que garantiza que P sea invertible.

Al realizar el proceso de diagonalización de las matrices H y L, (cuyos 3 autovectores en cada caso son linealmente independientes), se obtiene que:

$$P_H D_H P_H^{-1} = H \tag{44}$$

Donde:

$$P_H = \begin{bmatrix} -i & i & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{45}$$

$$D_H = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} \tag{46}$$

Similarmente, para la diagonalización de la matriz L se obtuvo:

$$P_L D_L P_L^{-1} = L \tag{47}$$

Donde:

$$P_L = \begin{bmatrix} -i & i\left(\sqrt{3}+2\right) & i\left(2-\sqrt{3}\right) \\ -1 & -\sqrt{3}-1 & -1+\sqrt{3} \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \tag{48}$$

$$D_L = \begin{bmatrix} 2\pi & 0 & 0 \\ 0 & \pi\left(2-\sqrt{3}\right) & 0 \\ 0 & 0 & \pi\left(\sqrt{3}+2\right) \end{bmatrix} \tag{49}$$

Ahora, realizando el cálculo de las trazas y determinantes de H y L diagonalizadas se tienen los valores:

$$\mathrm{Tr}(P_H D_H P_H^{-1}) = 3 \tag{50}$$

$$\mathrm{Tr}(P_L D_L P_L^{-1}) = 6\pi \tag{51}$$

$$\det\left(P_H D_H P_H^{-1}\right) = -3 \tag{52}$$

$$\det\left(P_L D_L P_L^{-1}\right) = 2\pi^3 \tag{53}$$

De forma que se verifica que la traza y el determinante son **propiedades invariantes ante el cambio de base o transformación de coordenadas**.

Problema 9. Construya dos estados arbitrarios $|\phi_h\rangle = \sum_{i=1}^{3} \alpha_i |h_i\rangle$ y $|\phi_l\rangle = \sum_{i=1}^{3} \beta_j |l_j\rangle$ como combinación lineal de los vectores base de H y L.

Para resolver este punto se definen dos estados $|\phi_h\rangle$ y $|\phi_l\rangle$ como una combinación lineal de los vectores base de B_H y B_L respectivamente como:

$$|\phi_h\rangle = 2\begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{2}i}{2} \\ 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} - 1\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}i}{2} \\ 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} + 3\begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{3\sqrt{2}i}{2} \\ 3 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix} \tag{54}$$

$$|\phi_l\rangle = 3\begin{bmatrix} -\frac{\sqrt{3}i}{3} \\ -\frac{\sqrt{3}}{3} \\ \frac{\sqrt{3}}{3} \end{bmatrix} + 4\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{-12-6\sqrt{3}}}{6} \\ \frac{\sqrt{6}(-\sqrt{3}-1)}{6\sqrt{\sqrt{3}+2}} \\ \frac{\sqrt{6}}{6\sqrt{\sqrt{3}+2}} \end{bmatrix} - 2\begin{bmatrix} \frac{\sqrt{-12+6\sqrt{3}}}{6} \\ \frac{\sqrt{6}(-1+\sqrt{3})}{6\sqrt{2-\sqrt{3}}} \\ \frac{\sqrt{6}}{6\sqrt{2-\sqrt{3}}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\sqrt{3}i + \frac{\sqrt{-12-6\sqrt{3}}}{3} \\ -\sqrt{3} + \frac{\sqrt{6}(-\sqrt{3}-1)}{3\sqrt{\sqrt{3}+2}} \\ \frac{\sqrt{6}}{3\sqrt{\sqrt{3}+2}} + \sqrt{3} \end{bmatrix} \tag{55}$$

Cabe aclarar que con las matrices de transformación U y U^{-1} se puede hacer la traducción de $|\phi_h\rangle$ a la base B_L y $|\phi_l\rangle$ a la base B_H.

Problema 10. Calcule el producto de las incertidumbres $\Delta H \Delta L$ de H y L primero en el estado $|\phi_h\rangle$ y luego $|\phi_l\rangle$.

Para resolver este punto, necesitamos definir la incertidumbre $\Delta H \Delta L$ en un estado $|\phi\rangle$ de la siguiente forma:

$$\Delta H \Delta L = \sqrt{(\Delta H)^2 (\Delta L)^2} \tag{56}$$

Donde:

$$(\Delta H)^2 = \sqrt{\langle\phi|H^2|\phi\rangle - (\langle\phi|H|\phi\rangle)^2} \tag{57}$$

$$(\Delta L)^2 = \sqrt{\langle\phi|L^2|\phi\rangle - (\langle\phi|L|\phi\rangle)^2} \tag{58}$$

$$\tag{59}$$

Y se debe cumplir la desigualdad dada por el principio de incertidumbre, que establece una cota inferior para el producto de las incertidumbres $\Delta H \Delta L$:

$$\Delta H \Delta L \geq \frac{1}{2} \left| \langle \phi | [H, L] | \phi \rangle \right| \tag{60}$$

Ahora, calculando computacionalmente con ayuda de `SymPy`, obtenemos que para el primer estado $|\phi_h\rangle$:

$$\Delta H \Delta L = \sqrt{(\Delta H)^2 (\Delta L)^2} = 965{,}30 \tag{61}$$

Lo cual cumple con el principio de incertidumbre, ya que:

$$\Delta H \Delta L = 965{,}30 \geq \frac{1}{2} \left| \langle \phi_h | [H, L] | \phi_h \rangle \right| \approx 0 \tag{62}$$

Mientras que para el segundo estado $|\phi_l\rangle$, tenemos:

$$\Delta H \Delta L = \sqrt{(\Delta H)^2 (\Delta L)^2} = 1286{,}90 \tag{63}$$

Lo cual también cumple con la desigualdad de Robertson-Schrödinger, ya que:

$$\Delta H \Delta L = 1286{,}90 \geq \frac{1}{2} \left| \langle \phi_l | [H, L] | \phi_l \rangle \right| \approx 0 \tag{64}$$

Referencias

[1] N. Zettili, Quantum mechanics: Concepts and applications, 2a ed. Hoboken, NJ: Wiley, 2009.