Mecánica Cuántica II

Prof. Aníbal Iucci
JTP Alejo Costa

Práctica 0: Repaso Cuántica I

Año 2023

1. ¿A qué nos referimos con la notación $|\psi\rangle$? ¿Es dependiente de alguna base? ¿Qué representa la notación $\langle\psi_1|\psi_2\rangle$? ¿y la notación $\langle\psi_1|\,\mathcal{O}\,|\psi_2\rangle$?

2. Dado un espacio de Hilbert con vectores base $|e_1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$ y $|e_2\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$. ¿Qué hace el operador $\hat{P}_1 = |e_1\rangle\langle e_1|$? ¿Y $\hat{P}_2 = |e_2\rangle\langle e_2|$? ¿Cómo escribiría estos operadores en forma matricial?

3. Dado el mismo espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ bidimensional que en el ejercicio anterior, definimos el operador identidad como el operador que cumple $\hat{I}\,|\beta\rangle = |\beta\rangle\ \forall\,|\beta\rangle \in \mathcal{H}$. ¿Puede construirlo utilizando la notación de Dirac? ¿Y si desearamos construirlo para un espacio n dimensional con una base ortonormal $\{|e_i\rangle\}$?

4. Si identificamos un sistema cuántico con el ket $|\psi\rangle$ y con la función de onda $\psi(\boldsymbol{x})$. ¿Son $|\psi\rangle$ y $\psi(\boldsymbol{x})$ el mismo objeto? ¿Podemos obtener uno a partir del otro? ¿Cómo?

5. **Algunos ejercicios con matrices de Pauli**

   Para refrescar la memoria. Los operadores $\hat{\sigma}_{x,y,z}$ tienen una representación matricial en la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ dada por

$$\sigma_x = \sigma_1 = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$$
$$\sigma_y = \sigma_2 = \begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$$
$$\sigma_y = \sigma_3 = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$
$$|+\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} \qquad |-\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

   a) ¿Son estas matrices hermíticas? Hallar sus autovalores y autovectores

   b) Verifique las siguientes propiedades:

$$\begin{array}{ccc} \det(\sigma_k) = -1 & \mathrm{Tr}(\sigma_k) = 0 & [\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k \\ \sigma_i^2 = I & \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}I & \sigma_j\sigma_k = i\epsilon_{jkl}\sigma_l + I\delta_{jk} \end{array}$$

   con $i, j, k = 1, 2, 3$.

   c) A partir de las matrices de Pauli podemos definir los operadores de spin $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$. Construya en términos de los autoestados de S_z un estado $|\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}\rangle$, con $\boldsymbol{n} = (\cos(\phi)\sin(\theta), \sin(\phi)\sin(\theta), \cos(\theta))$ vector unitario, tal que

$$\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{n}\,|\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}\rangle = \frac{\hbar}{2}\,|\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{n}\rangle$$

   siendo el operador $\hat{\boldsymbol{S}}\cdot\boldsymbol{n} = n_x\hat{S}_x + n_y\hat{S}_y + n_z\hat{S}_z$

6. **Simetrías**

   Repasaremos algunos conceptos de simetría en mecánica cuántica. Decimos que una transformación U es una simetría de un sistema si deja invariante el módulo del producto interno entre dos vectores cualesquiera y además conmuta con el hamiltoniano H. Es decir, $\hat{U}$ cumple

$$\left(\langle\alpha|\,\hat{U}^\dagger\right)\hat{U}\,|\beta\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle \quad \text{y} \quad \left[\hat{U}, \hat{H}\right] = 0$$

   a) Sea $U = e^{isG}$ un operador de simetría de un hamiltoniano H.

1) Muestre que $[G, H] = 0$. G se conoce como el generador infinitesimal de la simetría.
2) Muestre que $\langle G \rangle$ se conserva en el tiempo.
3) Muestre que si $|n\rangle$ es autoestado de H con energía E_n, entonces $f(G)|n\rangle = |\psi\rangle$, teniendo f un desarrollo en serie, es autoestado de H con la misma energía. Como en general $|\psi\rangle \neq |n\rangle$ las simetrías suelen inducir degeneraciones.

b) Definimos el operador de **paridad** o **inversión espacial** como el operador unitario $\hat{\pi}$ cuya acción sobre un estado $|\alpha\rangle$ está determinada por

$$|\alpha\rangle \to \hat{\pi}|\alpha\rangle \qquad \langle\alpha|\hat{\pi}^\dagger \hat{\boldsymbol{x}}\hat{\pi}|\alpha\rangle = -\langle\alpha|\hat{\boldsymbol{x}}|\alpha\rangle$$

1) Muestre que $\{\hat{\boldsymbol{x}}, \hat{\pi}\} = 0$
2) Muestre que $\hat{\pi}|\boldsymbol{x}'\rangle = e^{i\delta}|-\boldsymbol{x}'\rangle$. Siendo $e^{i\delta}$ una fase.
3) Muestre que $\pi^2 = I$, si tomamos $e^{i\delta} = 1$
4) Muestre que $\{\hat{\pi}, \hat{\boldsymbol{p}}\} = 0$, recuerde que el operador momento actúa como un gradiente en la base del operador posición.

c) Definimos una transformación Θ como antiunitaria si

$$|\alpha\rangle \to |\tilde{\alpha}\rangle = \Theta|\alpha\rangle \quad |\beta\rangle \to \left|\tilde{\beta}\right\rangle = \Theta|\beta\rangle$$

y además

$$\langle\beta|\alpha\rangle = \left\langle\tilde{\beta}|\tilde{\alpha}\right\rangle^* = \left\langle\tilde{\alpha}|\tilde{\beta}\right\rangle$$
$$\Theta(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = c_1^*\Theta|\alpha\rangle + c_2^*\Theta|\beta\rangle$$

Un operador antiunitario puede escribirse como

$$\Theta = UK$$

Donde U es un operador unitario y K es el operador de complejo conjugado, que devuelve el complejo conjugado de cualquier coeficiente que multiplique a un ket, es decir

$$Kc|\alpha\rangle = c^*K|\alpha\rangle$$

1) ¿Cómo actúa K sobre el ket $|\alpha\rangle$ cuando lo expandimos en una base ortonormal?
2) Uno de los operadores antiunitarios con importantes aplicaciones es el operador de inversión temporal $\mathcal{T}$. Para un sistema con momento angular j el operador de inversión temporal puede escribirse como
$$\mathcal{T} = \eta e^{-i\pi J_y/\hbar}K$$
Con η una fase arbitraria. Verifique cómo actúa este operador sobre un estado arbitrario de spin 1/2.
3) ¿Qué valor toma $\mathcal{T}^2$ para sistemas de spin semi entero?
4) Demuestre el teorema de degeneración de Kramer, esto es, si $\mathcal{T}$ es un operador antiunitario actuando sobre un espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ y además cumple $\mathcal{T}^2 = -1$, entonces $\forall v \in \mathcal{H}$, $\mathcal{T}v$ es ortogonal a v. ¿Qué implica para un sistema de espín semientero con invarianza frente a inversiones temporales?

d) Un sistema de spin 1 tiene el siguiente hamiltoniano

$$H = AS_z^2 + B(S_x^2 - S_y^2)$$

siendo

$$S_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad S_z = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Encuentre exactamente los autoestados normalizados y sus autovalores. ¿Es este hamiltoniano invariante frente a inversión temporal? ¿Cómo cambian los autoestados normalizados que obtuvo frente a una transformación de inversión temporal?

7. Un oscilador armónico simple unidimensional es sujeto a una perturbación de la forma $H = H_0 + \lambda H_1$, con $\lambda H_1 = bx$ y H_0 el hamiltoniano del oscilador armónico simple y b una constante real.

a) Calcule el corrimiento en la energía del estado fundamental al orden más bajo en teoría de perturbaciones

b) Resuelva el problema exactamente y compare los resultados

8. Encuentre las correcciones a segundo orden para el nivel de energía más bajo de un oscilador armónico unidimensional con una perturbación del tipo $\lambda b x^4$, con b una constante con unidades de E/L^4.

9. **Opcional teoría de perturbaciones en el caso degenerado:**

   El hamilltoniano para un sistema de 3 estados puede escribirse como

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & a \\ 0 & E_1 & b \\ a^* & b^* & E_2 \end{pmatrix}$$

   donde $E_2 > E_1$ y las cantidades a y b deben ser tomadas como perturbaciones pequeñas comparadas con $E_2 - E_1$.

   a) Diagonalice la matriz y encuentre los autovalores de manera exacta. Rdealice una expansión de Taylor de sus resultados a primer orden en $(|a|^2 + |b|^2)/(E_2 - E_1)^2$

   b) Encuentre las correcciones a orden no nulo más bajo para los autovalores usando teoría de perturbaciones no degenerada

   c) Use teoría de perturbaciones degenerada a segundo orden para calcular los autovalores y compare los 3 resultados.