Estructura de la Materia 3

Serie 0: Preliminares matemáticos

1. Mostrar que un operador hermítico, es tal que su matriz asociada posee la siguientes propiedades,

a) sus autovalores son reales;

b) sus autovectores correspondientes a autovalores no degenerados son mutuamente ortogonales;

c) los autovectores correspondientes a autovalores degenerados pueden elegirse libremente como ortogonales a los no degenerados

2. Sea una base $\{|\psi_i > \quad i = 1, \ldots, K\}$ no ortogonal del espacio de estados de un sistema físico y $< \psi_i|\psi_j >= S_{ij}$, el elemento de matrix de la matriz de solapamiento entre dichos estados:

a) Encuentre en la literatura los siguientes métodos de obtener una base ortonormal que genere el mismo subespacio: i. método de Gram-Schmidt; ii. simétrica (método de Löwdin). Analizar las ventajas y desventajas de obtener bases ortonormales mediante estas formas.

b) construir un proyector ortogonal $\mathbf{P}$ sobre el subespacio generado por un subconjunto $|\psi_i >, \ldots, |\psi_N >$ de funciones de la base. Qué propiedades debe satisfacer?

c) verificar que se cumple, $0 \leq < \Psi|\mathbf{P}|\Psi > \leq 1$, para todo $|\Psi >$.

3. Dado un operador F, comparar las representaciones matriciales, $F_{ij} =< \psi_i|F|\psi_j >$ y $\{f_{ij}\}$, de manera que, $F|\psi_j >= \sum_i f_{ij}|\psi_i >$:

a) Cómo están relacionadas ambas matrices?

b) en qué casos coinciden?

4. i. Mostrar que el operador permutación P es unitario;

ii. mostrar que el operador antisimetrización $A = (N!)^{-1/2}\sum_p (-1)^p P$, satisface: $A^\dagger = A$ y $A^2 = (N!)^{1/2}A$, lo cual indica que es un proyector ortogonal
iii. mostrar que dada una base ortonormal de funciones de una partícula para un sistema de N fermiones, $\{\psi_i\}$, cualquier conjunto $\{A\psi_{i_1}\ldots\psi_{i_N}\}$, es una base ortonormal del sistema. Si la base de funciones de una partícula tiene K elementos, cuántos tiene el conjunto de las N-partículas, es decir cuál es su dimensión?

5. Analizar el conmutador de los operadores $[A, F]$ cuando F es un operador de una y dos partículas.

6. Mostrar que dos matrices *equivalentes* o similares tienen los mismos autovalores, cúal es la importancia de este resultado?

7. Mostrar que la traza de una matriz, el determinante y los coeficientes de la ecuación secular son invariantes ante transformaciones de similaridad.

8. Mostrar que los autovectores de una matriz no degenerada son linealmente independientes.

9. Mostrar que la inversa de una matriz cuadrada A de orden $n\times n$ se puede expresar en términos de potencias de A de hasta orden $n-1$.

10. Mostrar que una matriz U que transforma una matriz hermítica en otra de forma diagonal es unitaria.

11. Mostrar que el producto interno de dos vectores es invariante ante una transformación unitaria de los mismos.

12. a) Determine aproximadamente la energía del estado fundamental del átomo de He (mejor dicho, hallar una cota superior a su valor) usando el principio variacional y aproximando la función de onda por dos funciones $1s$ con una carga nuclear efectiva Z^*.

b) Compare el resultado anterior con el que se obtiene de calcular el valor medio de la energía del estado $|1s\alpha 1s\beta >$ para el átomo de He, usando como función $1s$ el orbital exacto del átomo He^+.

Ayuda: El orbital $1s$ exacto del átomo hidrogenoide es: $\phi_{1s} = (Z^3/\pi)^{1/2} e^{-Zr}$. A partir de este orbital, en las pág 366 y siguientes del libro Sakurai (Modern Quantum Mechanics) hay un cálculo explícito de las cantidades J, K.