Física Teórica 2 - Guía 1: Dimensión 2

Vladimir Daniel Rodríguez Chariarse

30 de marzo de 2022

1. Problema 1

Este problema repasa algunos de los experimentos tipo Stern-Gerlach, que son utilizados para motivar el uso de un espacio vectorial complejo como lenguaje para describir la Mecánica Cuántica.

Lo presentamos en clase usando el programa QM Spins. Este programa de simulación requiere Java. La notación es ligeramente distinta a la de clase, pero es clara. Usando el experimento básico:

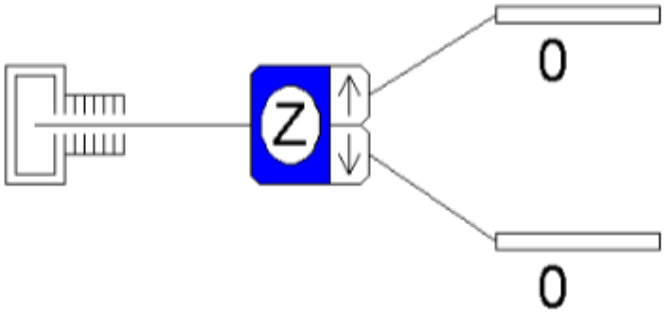

Figura 1: *Esquema de experimento tipo Stern Gerlach básico del programa de simulación QM Spins*

En este esquema se analiza el spin en la dirección z, y los dos resultados posibles se muestran a la derecha de la caja, finalmente las flechas llevan a detectores que cuentan el número de átomos en cada canal. En la simulación el número de atomos detectados en ambos contadores, era similar dentro de una variabilidad estadística. Se propone a los alumnos hacer los esquemas del problema y capturar las figuras de sus resultados.

Hice corridas de 10000 átomos a la salida del horno y los resultados se muestran para cada caso en la Figura 2.

Se deja a los alumnos el cálculo de las frecuencias de la simulación y su comparación con las probabilidades teóricas.

La última secuencia muestra la necesidad de considerar suma de amplitudes cuando no se hace una determinación (medición) efectiva de lo átomos (existe interferencia).

2. Problema 2

En un espacio vectorial complejo de dimensión 2 considere los operadores $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$, que en la base ortonormal $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ con

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

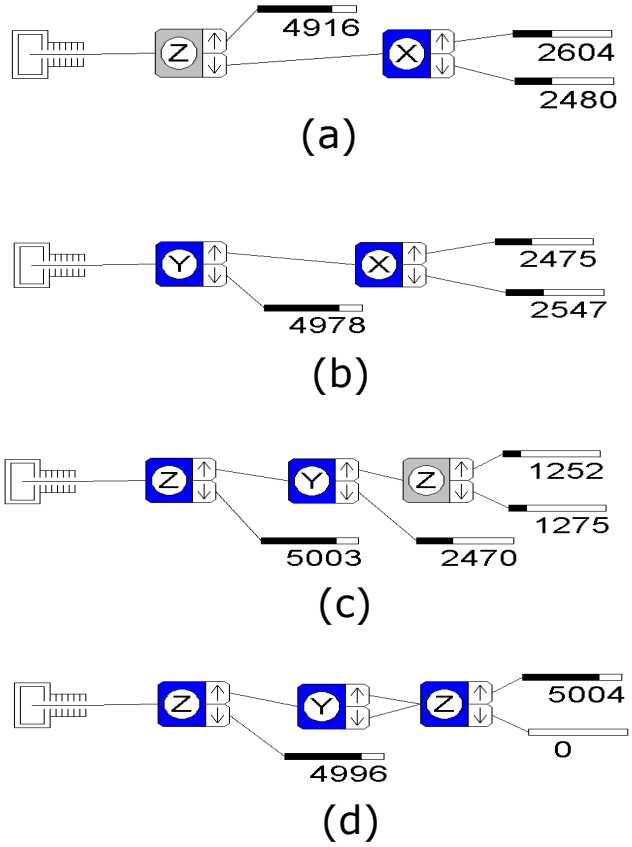

Figura 2: *Esquemas de experimentos tipo Stern Gerlach del programa de simulación QM Spins*

se representan mediante las matrices

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

Estas tres matrices se conocen como *matrices de Pauli*.

(a) ¿Son hermíticas estas matrices? Halle sus autovalores y autovectores en esta base.

Por inspección son matrices hermíticas, pues son auto-adjuntas: la matriz es igual a su transpuesta conjugada: $\sigma_i = \sigma_i^{t*} \equiv \sigma_i^\dagger$. Como tal, poseen autovalores reales. Vemos que en esta base σ_3 es diagonal, por lo que sus autovectores son $|\pm\rangle$ y sus autovalores son ± 1, respectivamente. Se puede verificar (un cálculo de autovectores y autovalores lo haremos en el Problema 3):

$$\sigma_1 \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix}$$

$$\sigma_2 \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix} = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm i \end{pmatrix}$$

de donde se deducen los autovalores (± 1) de cada matriz de Pauli junto a sus correspondientes autovectores (siendo $1/\sqrt{2}$ el correcto factor de normalización).

Es útil ver que se satisfacen las siguientes propiedades:

$$\boxed{\sigma_1 \left|\pm\right\rangle = \left|\mp\right\rangle, \quad \sigma_2 \left|\pm\right\rangle = \pm i \left|\mp\right\rangle}$$

(b) Verifique que se satisfacen las siguientes propiedades

$$\begin{aligned}
\det(\sigma_k) &= -1, \text{ producto de autovalores y por cálculo} \\
\mathrm{tr}(\sigma_k) &= 0, \text{ suma de autovalores y por cálculo} \\
\sigma_i^2 &= \mathbb{I}, \text{ en la base en que es diagonal es directo, como es } \mathbb{I} \text{ vale en} \\
&\quad \text{cualquier base. Hacer el cálculo.} \\
\sigma_j \sigma_k &= i\epsilon_{jkl}\sigma_l + \mathbb{I}\delta_{jk}, \text{ el caso } k = j \text{ sigue de } \sigma_i^2 = \mathbb{I}, \text{ hay que calcular} \\
&\quad \sigma_1\sigma_2 = i\sigma_3 = -\sigma_2\sigma_1,\ \sigma_2\sigma_3 = i\sigma_1 = -\sigma_3\sigma_2,\ \sigma_3\sigma_1 = i\sigma_2 = -\sigma_1\sigma_3\ , \\
[\sigma_i, \sigma_j] &= 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k \text{ y } \{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}\mathbb{I}\ , \text{ de lo anterior y que } \epsilon_{jik} = -\epsilon_{ijk},
\end{aligned}$$

donde $\mathbb{I}$ representa a la matriz identidad, $k = 1, 2, 3$ (x, y, z), ϵ_{ijk} es el símbolo de Levi-Civita δ_{ij} es la delta de Kronecker. Se usó la notación de que índice repetido es una suma sobre dicho índice de 1 a 3 (notación de Einstein caso 3D).

(c) Utilizando las propiedades anteriores muestre que dados dos vectores $\boldsymbol{a} = (a_x, a_y, a_z)$, $\boldsymbol{b} = (b_x, b_y, b_z)$, vale que

$$\boxed{(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}) = \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}\,\mathbb{I} + i(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\boldsymbol{\sigma}}$$

donde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$.
Usando la notación en la que el índice repetido es una suma sobre dicho índice:

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma})(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}) &= a_j\sigma_j b_k\sigma_k = a_j b_k \sigma_j\sigma_k \\
&= a_j b_k (i\epsilon_{jkl}\sigma_l + \mathbb{I}\delta_{jk}) = a_j b_j \mathbb{I} + \epsilon_{jkl} a_j b_k \sigma l \\
&= \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}\,\mathbb{I} + i(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})_l\sigma_l = \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b}\,\mathbb{I} + i(\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b})\cdot\boldsymbol{\sigma}
\end{aligned}$$

(d) Dadas las matrices da Pauli, podemos definir los operadores $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$. ¿Cuáles son sus autoestados y sus autovalores? ¿Cómo se relacionan con los estados y posibles valores de spin 1/2 ?
Los autoestados (autovectores) son los mismos, el autovalor se obtiene multiplicando ± 1 por el factor $\hbar/2$.

3. Problema 3

Dado un versor $\hat{\boldsymbol{n}}$, buscamos encontrar los autoestados y autovalores del operador $\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}$. Para ello, consideraremos dos posibles caminos. El método del proyector se verá mas adelante.

1. En primer lugar, escriba explícitamente la representación matricial del operador $\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma}$,y resuelva el problema estándar de autovalores y autovectores. Use la parametrización de $\hat{\boldsymbol{n}}$ en ángulos polares α, β de la figura.

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{\sigma} &= n_x\sigma_x + n_y\sigma_y + n_z\sigma_z \\
&= n_x \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + n_y \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} + n_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

Solución Para resolver el problema de autovectores y autovalores:

$$\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \ |\psi_\lambda\rangle = \lambda \, |\psi_\lambda\rangle \quad \Longrightarrow \quad (\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \lambda \mathbb{I}) \, |\psi_\lambda\rangle = 0$$

Para obtener una solución no trivial (no nula), pedimos que $|\hat{\boldsymbol{n}} \cdot \boldsymbol{\sigma} - \lambda \mathbb{I}| = 0$

$$\begin{vmatrix} n_z - \lambda & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & -n_z - \lambda \end{vmatrix} = \lambda^2 \underbrace{-n_z^2 - -n_x^2 - n_y^2}_{-1} = \lambda^2 - 1 \quad \Longrightarrow \quad \lambda = \pm 1$$

Encontraremos el autovector correspondiente al autovalor $\lambda = +1$. A menos de una constante de normalización proponemos

$$|\psi_\lambda\rangle = |+\rangle + \gamma \, |-\rangle := \begin{pmatrix} 1 \\ \gamma \end{pmatrix}$$

de modo que la ecuación que determina γ es:

$$\begin{pmatrix} n_z - 1 & n_x - i n_y \\ n_x + i n_y & -n_z - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \gamma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{1}$$

igualando la primera fila:

$$n_z - 1 + \gamma(n_x - i n_y) = 0 \Longrightarrow \gamma = \frac{1 - n_z}{n_x - i n_y} = \frac{1 - \cos\beta}{\sin\beta e^{-i\alpha}} = \frac{\sin(\beta/2)}{\cos(\beta/2)} e^{i\alpha}$$

donde se usaron las identidades: $1 - n_z = 1 - \cos\beta = 2\sin^2\beta/2$ y $n_x - i n_y = \sin\beta(\cos\alpha - i\sin\alpha) = 2\sin(\beta/2)\cos(\beta/2)e^{-i\alpha}$.

Finalmente para normalizar es suficiente multiplicar por $\cos(\beta/2)$, obteniéndose:

$$|\psi_{+1}\rangle \equiv |+, \hat{\boldsymbol{n}}\rangle = \cos(\beta/2) \, |+\rangle + \sin(\beta/2) e^{-i\alpha} \, |-\rangle := \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) \\ \sin(\beta/2) e^{i\alpha} \end{pmatrix}$$

Verificaciones:

- Si $\beta = 0$, obtenemos $|+\rangle$, en este caso $\hat{\boldsymbol{n}} = \hat{\boldsymbol{z}}$ por lo cual es correcto.
- Si $\beta = \pi/2$, y $\alpha = 0$ obtenemos $|+, \hat{\boldsymbol{x}}\rangle$. Lo mismo si cambiamos a $\alpha = \pi/2$ se obtiene $|+, \hat{\boldsymbol{y}}\rangle$.

Tarea: Probar que el autovector con $\lambda = -1$ es:

$$|\psi_{-1}\rangle \equiv |-, \hat{\boldsymbol{n}}\rangle = \sin(\beta/2) \, |+\rangle + \cos(\beta/2) e^{-i\alpha} \, |-\rangle := \begin{pmatrix} \sin(\beta/2) \\ \cos(\beta/2) e^{i\alpha} \end{pmatrix}$$

4. Problema 4

Usando los resultados del problema anterior encuentre los autoestados y autovalores del spin en una dirección $\hat{\boldsymbol{n}}$ cualquiera, $\boldsymbol{S} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}$. Demuestre que si medimos la componente $S_{\hat{\boldsymbol{n}}}$ y luego la componente $\boldsymbol{S}_{\hat{\boldsymbol{m}}}$, la probabilidad de obtener $S_{\hat{\boldsymbol{m}}} = \frac{\hbar}{2}$ dado que obtuvimos $S_{\hat{\boldsymbol{n}}} = \frac{\hbar}{2}$ es $P\left(S_{\hat{\boldsymbol{m}}} = + | S_{\hat{\boldsymbol{n}}} = +\right) = \frac{1}{2}(1 + \hat{\boldsymbol{n}} \cdot \hat{\boldsymbol{m}})$.

Recordemos la regla de Born para el cálculo de probabilidades:

$$P\left(S_{\hat{\boldsymbol{m}}} = + | S_{\hat{\boldsymbol{n}}} = +\right) = |\langle +, S_{\hat{\boldsymbol{m}}} | +, S_{\hat{\boldsymbol{n}}}\rangle|^2$$

Dado que los autoestados de $S_{\hat{\boldsymbol{n}}}$ son los mismos que los de $\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}$, podemos usar el resultado del problema anterior:

$$|+,\hat{\boldsymbol{n}}\rangle = \cos(\beta_1/2)\,|+\rangle + \sin(\beta_1/2)e^{-i\alpha_1}\,|-\rangle := \begin{pmatrix}\cos(\beta_1/2)\\ \sin(\beta_1/2)e^{i\alpha_1}\end{pmatrix}$$

$$|+,\hat{\boldsymbol{m}}\rangle = \cos(\beta_2/2)\,|+\rangle + \sin(\beta_2/2)e^{-i\alpha_2}\,|-\rangle := \begin{pmatrix}\cos(\beta_2/2)\\ \sin(\beta_2/2)e^{i\alpha_2}\end{pmatrix}$$

podemos evaluar el transpuesto conjugado de esta última expresión

$$\langle +,\hat{\boldsymbol{m}}| = \cos(\beta_2/2)\,\langle +| + \sin(\beta_2/2)e^{-i\alpha_2}\,\langle -| := (\cos(\beta_2/2), \sin(\beta_2/2)e^{-i\alpha_2})$$

Finalmente el producto escalar (¨braket¨)

$$\begin{aligned}
\langle +,\hat{\boldsymbol{m}}|+,\hat{\boldsymbol{n}}\rangle &= \cos(\beta_1/2)\cos(\beta_2/2) + \sin(\beta_1/2)\sin(\beta_2/2)e^{-i(\alpha_1-\alpha_2)}\\
&= e^{i(\alpha_1-\alpha_2)/2}\Bigg(\cos(\beta_1/2)\cos(\beta_2/2)\underbrace{e^{-i(\alpha_1-\alpha_2)/2}}_{\cos[(\alpha_1-\alpha_2)/2]-i\sin[(\alpha_1-\alpha_2)/2]} +\\
&\quad \sin(\beta_1/2)\sin(\beta_2/2)\underbrace{e^{i(\alpha_1-\alpha_2)/2}}_{\cos[(\alpha_1-\alpha_2)/2]+i\sin[(\alpha_1-\alpha_2)/2]}\Bigg)\\
&= e^{i(\alpha_1-\alpha_2)/2}\,(\cos[(\alpha_1-\alpha_2)/2]\cos[(\beta_1-\beta_2)/2] -\\
&\qquad i\sin[(\alpha_1-\alpha_2)/2]\cos[(\beta_1+\beta_2)/2])
\end{aligned}$$

al tomar el módulo cuadrado de esta expresión la fase global no interviene y tenemos:

$$\begin{aligned}
P\,(S_{\hat{\boldsymbol{m}}} = +|S_{\hat{\boldsymbol{n}}} = +) &= |\,\langle +,\hat{\boldsymbol{m}}|+,\hat{\boldsymbol{n}}\rangle\,|^2\\
&= \cos^2[(\alpha_1-\alpha_2)/2]\quad \underbrace{\cos^2[(\beta_1-\beta_2)/2]}_{\frac{1}{2}(1+\underbrace{\cos(\beta_1-\beta_2)}_{\cos\beta_1\cos\beta_2+\sin\beta_1\sin\beta_2})}\\
&\quad + \sin^2[(\alpha_1-\alpha_2)/2]\quad \underbrace{\cos^2[(\beta_1+\beta_2)/2]}_{\frac{1}{2}(1+\underbrace{\cos(\beta_1+\beta_2)}_{\cos\beta_1\cos\beta_2-\sin\beta_1\sin\beta_2})}\\
&= \frac{1}{2}\,(1+\cos\beta_1\cos\beta_2+\sin\beta_1\sin\beta_2\cos(\alpha_1-\alpha_2))
\end{aligned}$$

en la última igualdad identificamos el producto escalar $\hat{\boldsymbol{m}}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}$, por lo que finalmente

$$\boxed{P\,(S_{\hat{\boldsymbol{m}}} = +|S_{\hat{\boldsymbol{n}}} = +) = \frac{1}{2}(1+\hat{\boldsymbol{m}}\cdot\hat{\boldsymbol{n}})}$$

Casos especiales:

- Si $\hat{\boldsymbol{m}} = \hat{\boldsymbol{n}}$, entonces $P = 1$ como corresponde.
- Si $\hat{\boldsymbol{m}} = -\hat{\boldsymbol{n}}$, entonces $P = 0$, los autoestados son ortogonales, si los versores están en direcciones opuestas.
- Si $\hat{\boldsymbol{m}}\cdot\hat{\boldsymbol{n}} = 0$, entonces $P = \frac{1}{2}$. Esto es, cuando $\hat{\boldsymbol{m}}$ es ortogonal a $\hat{\boldsymbol{n}}$ entonces si el sistema está en un autoestado de $\boldsymbol{S}\cdot\hat{\boldsymbol{n}}$ con autovalor $\hbar/2$ es equiprobable encontralo con autovalores $\pm\hbar/2$ en la dirección $\hat{\boldsymbol{m}}$. Debido a esta propiedad, se dice que las bases correspondientes a direcciones ortogonales son mutuamente insesgadas. Como hay tres direcciones ortogonales posibles en el espacio, los autoestados de la proyección de spin sobre estas direcciones son bases mutuamente insesgadas.