MECÁNICA MATRICIAL DE HEISENBERG

Daniel Steinbach | Roberto Varela
dsteinbach.uy@gmail.com | juan.roberto.varela@gmail.com

Física Moderna 2024
Hugo Fort | Santiago Cabrera

TABLA DE CONTENIDO

1 **INTRODUCCIÓN**
Contexto Histórico

2 **TEORÍA ONDULATORIA**
Contexto general y su conexión con la teoría matricial

3 **BREVE INTRO A CUÁNTICA**
Un enfoque Matemático

4 **SCHRÖDINGER MATRICIAL**
Su teoría como teoría Matricial

INTRODUCCIÓN

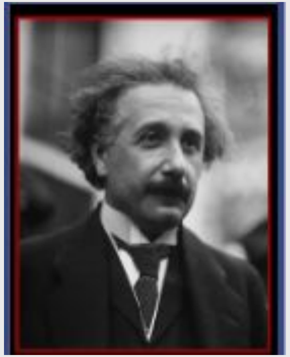
29/7/1925 “Sobre Re-Interpretación Teórica Cuántica de las Relaciones Cinemáticas y Mecánicas. Werner Heisenberg

07/11/1925 “Teoría de Mecánica Cuántica”, Paul Dirac

16/11/1925.“Sobre la Mecánica Cuántica II” W. Heisenberg, Max Born, Paul Jordan

27/01/1926. “La cuantización como problema de autovalores” , Erwin Schrödinger

CONTEXTO HISTÓRICO



Albert Einstein
(1879-1955)

Louis De Broglie
(1892-1987)

Erwin Schrodinger
(1887-1961)

Max Born
(1882-1970)

Pascual Jordan
(1902-1980)

CONTEXTO HISTÓRICO

En la deducción de las relaciones de indeterminación y en la solución del problema del oscilador armónico se ha visto que las propiedades de la conmutación de operadores, como magnitudes abstractas, **determinan las propiedades del sistema.**

En el cálculo de los niveles de energía del oscilador o de la mínima dispersión de la indeterminación, la existencia de las funciones de onda era sólo accidental.

Casi al mismo tiempo que Schrödinger describe su Mecánica Ondulatoria, Werner Heisenberg formuló una teoría equivalente con matrices y operadores abstractos (los cuales no estaban representados por derivadas) que obedecen a ciertas relaciones de conmutación.

La teoría fue llamada Mecánica de Matrices.

CONTEXTO HISTÓRICO

Hilbert se rió mucho de Born y Heisenberg porque, cuando descubrieron la Mecánica de Matrices, se encontraron con el mismo tipo de dificultades que, por supuesto, todo el mundo encuentra al manipular y tratar de resolver problemas con matrices [infinitas]. Cuando fueron a pedir ayuda a Hilbert, éste les dijo que las únicas veces que había tenido que ver con matrices fue cuando éstas aparecían como subproducto del estudio de autovalores de una ecuación diferencial con condiciones de contorno. Les sugirió que si encontraban la ecuación diferencial que originaba esas matrices, probablemente obtendrían más información. Heisenberg y Born pensaron que era un comentario para salir del paso, y que Hilbert no sabía realmente de lo que estaba hablando. Así que más tarde Hilbert se divirtió mucho, indicándoles que podían haber descubierto la Mecánica Ondulatoria de Schrödinger seis meses antes que éste, si le hubieran hecho caso (Jammer: 1989, 280 n. p. 37).

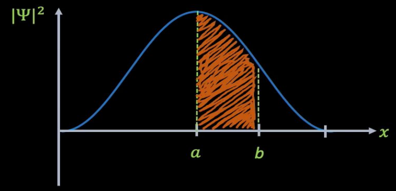
TEORÍA ONDULATORIA

Repaso general para dar contexto a la teoría matricial de Heisenberg

INTERPRETACIÓN DE MAX BORN

Interpretación probabilística de la función de onda

Max Born
(1882-1970)



Probabilidad de encontrar
una partícula entre x y x+dx

$$P(x,t)\,dx = |\Psi(x,t)|^2 dx$$

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)$$

$$a \leq x \leq b \longrightarrow \boxed{P(x,t) = \int_a^b |\Psi(x,t)|^2 dx}$$

$$P = \int_a^b |\Psi|^2 dx$$

Probabilidad en MC

$$P(x) = \int_a^b \rho(x) dx$$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^* x \Psi dx$$

Valor medio de la posición en MC

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x\rho(x) dx$$

JUSTIFICACIONES E IMPLICANCIAS

Ondas y partículas deben ser asociadas en el espacio

Las partículas tiene que estar en determinada posición mientras la onda tiene una determinada amplitud

La Densidad de probabilidad $P(x,t)$ es un cantidad medible

Tiene que ser una medida Real

$\psi^*(x,t)\psi(x,t)$ es siempre real y positivo

Tal vez $|\psi|^2$ tenga correlación con algo que se pueda determinar experimentalmente

La interpretación de Born introduce la indeterminación a la MC

No se puede predecir con certeza el resultado de un experimento

Todo lo que tiene para ofrecer la MC es información estadística sobre posibles resultados

MEDICIONES EN MECÁNICA CUÁNTICA

En teoría cuántica a cada magnitud con significado físico se le asocia un operador. Un ejemplo de tal asociación es el operador que representa el momento, $\mathbf{p} = (h/i)\nabla$.

Se admite que cada uno da estos operadores posee un conjunto de valores propios y de funciones propias asociadas al mismo.

En algunos casos, como en el del impulso, los valores propios pueden adoptar cualquier valor y el conjunto de funcionen propias. En el caso de las funciones propias de la energía existe un conjunto finito de las mismas y un conjunto restringido de valores propios.

En cada caso las funciones propias son ortogonales, pueden normilizarse y constituyen conjunto completo.

$$u(\mathbf{r}) = \sum_m C_m \psi_{am}(\mathbf{r}).$$

Las ψ_{am} son las que forman el conjunto completo de funciones. El subíndice a recuerda que son las funciones propias de un operador A. El índice m individualiza los valores propios.

SUMA DE PROBABILIDADES

La función $u(\mathbf{r})$ es arbitraria y no es necesariamente función propia de algún operador. Solamente se requiere que esté normalizada

$$\int |u(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1$$

Esto nos asegura que los C_m representan una distribución de probabilidad para la magnitud física asociada al operador $\mathbf{A}$. Por otro lado tenemos que la suma de las probabilidades es igual a 1. Operando:

$$1 = \int |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = \sum_{m,m'} \int C_m^* C_{m'} \psi_{am}^*(\mathbf{r}) \psi_{am'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Requisito para una distribución de probabilidad

$$\boxed{\sum_{m,m'} C_m^* C_{m'} \delta_{m,m'} = \sum_m |C_m|^2 = 1}$$

DISTRIBUCIONES DE PROBABILIDAD ASOCIADAS A OPERADORES

Puesto que las ψ_{am} son funciones propias del operador $\mathbf{A}$. se tiene por definición

$$\mathbf{A}\psi_{am} = a_m \psi_{am}.$$

Si calculamos el valor medio de $\mathbf{A}$ con respecto a la distribución $u(\mathbf{r})$, vemos que éste es igual a

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \int u^*(\mathbf{r})\mathbf{A}u(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \sum_{m,m'} \int C_m^* C_m \psi_{am}^*(\mathbf{r})\mathbf{A}\psi_{am'}(\mathbf{r})d\mathbf{r}$$

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \sum_{m,m'} \int C_m^* C_{m'} \psi_{am}^*(\mathbf{r}) a_m \psi_{am'}(\mathbf{r})d\mathbf{r}$$

$$= \sum_{m,m'} C_m^* C_{m'} a_m \int \psi_{am'}^*(\mathbf{r})\psi_{am}(\mathbf{r})d\mathbf{r}$$

$$\boxed{\langle \mathbf{A} \rangle = \sum_{m,m'} C_m^* C_{m'} a_m \delta_{m,m'} = \sum_m |C_m|^2 a_m.}$$

PRINCIPIO DE INDETERMINACIÓN

Supongamos que tenemos un sistema en un estado propio de un operador ψ_{am}. Si se midiera la magnitud correspondiente a A (por ejemplo, el p de una onda plana) en numerosos sistemas idénticos que se hallaran en dicho estado propio, se encontraría que el valor medio de $\mathbf{A}$ es precisamente a_m ya que:

$$\langle \mathbf{A} \rangle = \int \psi^*_{am} \mathbf{A} \psi_{am} d\mathbf{r} = a_m \int \psi^*_{am} \psi_{am} d\mathbf{r} = a_m.$$

Lo interesante experimentalmente es que no solamente a_m es el valor medio, sino que es el valor que se obtiene cada vez que se efectúa la medida. En estadística se dice que **la dispersión de las medidas es nula.**

Este caso es muy particular. Corresponde a una función de onda $u(\mathbf{r})$ que es igual a cierta ψ_{am} .

En el caso general, cuando en la suma aparecen un número infinito de términos, el valor medio de $\mathbf{A}$ obtenido en las medidas no sería igual a ningún a_m particular, sino que correspondería a la suma.

En este caso la dispersión de las medidas no sería nula.

$\boxed{\text{Solamente en el caso que } u(\mathbf{r}) \text{ sea una función propia de } \mathbf{A} \text{ será nula la dispersión.}}$

PRINCIPIO DE INDETERMINACIÓN

Para cada **operador** que se introduce en la mecánica ondulatoria puede encontrarse *una distribución de probabilidad* en la cual *la dispersión de las medidas de la magnitud física* que corresponde a este operador sea **cero.**

Esta es la distribución de probabilidad formada a partir de una **función propia de dicho operador.**

¿es posible hallar una distribución en la cual dos magnitudes físicas diferentes puedan ser medidas simultáneamente sin dispersión?

¿existen funciones propias de un operador que sean también funciones propias de otro?

Las funciones propias de la energía de un oscilador armónico no son funciones propias del impulso, y viceversa. Estas dos magnitudes no pueden ser medidas simultáneamente con infinita precisión para el oscilador armónico.

PRINCIPIO DE INDETERMINACIÓN

$$(\Delta x)^2(\Delta p_x)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Cualquier par de operadores $\mathbf{A}, \mathbf{B}$ cuyo conumutador sea

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = i\hbar$$

tendrían el producto de sus dispersiones mayor o igual a $\hbar^2/4$.

Solamente operadores que conmuten entre sí $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0$, pueden tener el producto de sus dispersiones igual a cero.

En consecuencia **solamente los operadores que conmutan entre sí pueden tener estados propios simultáneos.**

LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\phi(t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

$\psi(x)$ funciones propias, soluciones de la ecuación

$$\phi(t) = e^{-Et/\hbar}$$

E es la energía total en el sistema

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

$$H\psi(x) = E\psi(x)$$

Ecuación valor propio de la *Energía*

BREVE INTRODUCCIÓN A LA MECÁNICA CUÁNTICA

Breve introducción a los Axiomas de la Mecánica Cuántica desde una mirada Matemática

1 ESTADOS

Conceptos de álgebra lineal y su importancia en la mecánica cuántica

2 EVOLUCIÓN DE LOS ESTADOS

Fundamentos de la evolución temporal y su aplicación a sistemas cerrados

3 OBSERVABLES Y MEDIDAS

Definiciones y proceso de medida

ESTADOS

1.Vectores de Estado:

Un estado cuántico $|\psi\rangle$ se representa como un vector columna ψ en un espacio de Hilbert. Por ejemplo:

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \vdots \\ \psi_n \end{pmatrix}$$

2.Operadores Lineales:

Los observables físicos se representan como operadores lineales en el espacio de Hilbert. Por ejemplo, el operador de posición $\hat{x}$ se puede representar como una matriz:

$$\hat{x} = \begin{pmatrix} x_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & x_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & x_n \end{pmatrix} \text{ Donde } x_1, x_2, \ldots, x_n$$

son las posiciones discretas en las que se evalúa el observable.

EVOLUCIÓN DE LOS ESTADOS

Según la ecuación de Schrodinger :

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial x} = H\psi$$

donde H es un operador hermitico que define al sistema y se llama Halmintoniano.

Surge de esta ecuación

$$\psi(x,t) = \phi(t)\psi(x)$$

donde $\phi(\mathrm{t})$ es un operador unitario.

OBSERVABLES Y MEDIDAS

1.Observables:

Los observables se representan como operadores lineales hermíticos en el espacio de Hilbert. Siendo $\hat{O}$ un observable, su representación matricial O en una base dada está dada por:

$$O = \begin{pmatrix} o_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & o_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & o_{nn} \end{pmatrix}$$

2. Mediciones:

Cuando se mide un observable representado por la matriz O, los resultados posibles de la medición son los valores propios de O.

3.Colapso del Estado:

Después de una medición, el estado del sistema colapsa al vector propio asociado con el valor propio medido. Si el valor propio medido es λ_i y el correspondiente vector propio es $|v_i\rangle$, entonces el estado colapsado se expresa como: $|\psi'\rangle = |v_i\rangle$ Donde $|\psi'\rangle$ es el nuevo estado del sistema después de la medición. Matricialmente, este proceso se representa utilizando proyecciones. Si P_i es el operador de proyección asociado con el vector propio $|v_i\rangle$, entonces el estado colapsado se puede expresar como: $|\psi'\rangle = P_i|\psi\rangle$ Donde $|\psi\rangle$ es el estado del sistema antes de la medición.

LA TEORÍA DE SCHRÖDINGER COMO TEORÍA MATRICIAL

A partir de la Teoría Matricial de Heisenberg se plantea la teoría de Schrödinger matricial

BREVE INTRODUCCIÓN AL ÁLGEBRA

Los coeficientes de Fourier

Proposición: Sea $S = \{\varphi_1, \ldots, \varphi_n\}$ un conjunto ortogonal de vectores no nulos y $\psi \in [\varphi_1, \ldots, \varphi_n]$.

$$\text{Si } \psi = \sum_{i=1}^{n} a_i \varphi_i, \text{ entonces } a_i = \frac{\langle \psi, \varphi_i \rangle}{\|\varphi_i\|^2}, \forall i = 1, \ldots, n.$$

Definición: Sea $\mathcal{B}$ un conjunto (posiblemente infinito) ortonormal en H.
Si $\psi \in H$, entonces los escalares $\langle \psi, \varphi \rangle$, con $\varphi \in \mathcal{B}$, se llaman los *coeficientes de Fourier* de ψ respecto a $\mathcal{B}$.

OPERADORES AUTOADJUNTOS

Definición. Un operador $\hat{A} \in \mathcal{L}(H)$ es **Autoadjunto** si verifica

$$\langle \hat{A}(\psi), \phi \rangle = \langle \psi, \hat{A}(\phi) \rangle, \quad \forall \psi, \phi \in H.$$

Proposición. Sea $\hat{A} \in \mathcal{L}(H)$ y $\mathcal{B} = \{\phi_1, \ldots, \phi_n\}$ una base de H. Entonces $\hat{A}$ es autoadjunto si y solo si verifica

$$\left\langle \hat{A}(\phi_i), \phi_j \right\rangle = \left\langle \phi_i, \hat{A}(\phi_j) \right\rangle, \quad \forall i, j = 1, \ldots, n.$$

Proposición: Sean $\hat{A} \in \mathcal{L}(H), \mathcal{B} = \{\varphi_1, \ldots, \varphi_n\}$ una base ortonormal de H y $[\hat{A}]_{\mathcal{B}} = (a_{ij})$. Entonces $a_{ij} = \left\langle \hat{A}(\varphi_j), \varphi_i \right\rangle$, para todo $i, j = 1, \ldots, n$.

MATRICES HERMITIANA Y UNITARIA

Definición: Una matriz $A = (a_{ij}) \in M_n(\mathbb{C})$ se dice que es **Hermitiana** si verifica $a_{ij} = \overline{a_{ji}}$, para todo i, j.
Notar que las entradas diagonales de una matriz hermitiana siempre son números reales.

Proposición: Sea $\hat{A} \in \mathcal{L}(H)$, $\mathcal{B}$ base ortonormal de H y $A = [\hat{A}]_{\mathcal{B}}$.
Entonces $\hat{A}$ es Autoadjunto si y solo si A es simétrica en el caso real o hermitiana en el caso complejo.

Definición: Sea $\mathbb{k}$ un cuerpo arbitrario, una matriz $A \in M_n(\mathbb{k})$ se dice ortogonal si $A^t A = AA^t = I$. Si $\mathbb{k} = \mathbb{C}$, una matriz $A \in M_n(\mathbb{C})$ se dice **Unitaria** si $A^* A = AA^* = I$.

TEOREMA ESPECTRAL

Definición: Un operador $\hat{A} \in \mathcal{L}(H)$ es normal si verifica $\hat{A} \circ \hat{A}^* = \hat{A}^* \circ \hat{A}$.
Análogamente, decimos que una matriz $A \in M_n(\mathbb{k})$ es normal si verifica $AA^* = A^*A$

Teorema espectral: Un operador $\hat{A} \in \mathcal{L}(H)$ es diagonalizable en una base ortonormal si y solo si $\hat{A}$ es normal en el caso complejo o autoadjunto en el caso real.

Observación: El producto interno de funciones f y g en $L^2(X, \mu)$ se define como

$$\langle f, g\rangle = \int_X f(t)\overline{g(t)}\mathrm{d}\mu(t)$$

LA TEORÍA DE SCHRÖDINGER COMO TEORÍA MATRICIAL

El **valor esperado** de un operador $\mathbf{A}$ **en un estado** ψ_i es el elemento de matriz a_{ii} de dicho operador.

El problema de **valores propios** que se presenta en la teoría de Schrödinger puede plantearse como el problema de hallar el conjunto completo ortonormal que haga diagonal la matriz del operador de energía $\mathbf{H}$,

$$\boxed{(\psi_j, \mathbf{H}\psi_i) = a_{ij} = E_i\delta_{ij}.}$$

$$\begin{pmatrix} E_{11} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & E_{jk} \end{pmatrix}$$

> La ecuación se cumple porque se requiere que $\mathbf{H}\psi_i = E_i\psi_i$ y que las ψ_i sean ortogonales.
>
> Los elementos diagonales son los valores propios de la energía.

LA TEORÍA DE SCHRÖDINGER COMO TEORÍA MATRICIAL

El valor medio de otros operadores en este estado puede hallarse determinando los elementos de sus matrices, tomando las ψ_i como conjunto de funciones de base para las mismas.

Si se desarrollasen las ψ_i en serie de funciones propias de los operadores, se podría obtener, que

$\langle \mathbf{A} \rangle = \sum_k |C_k|^2 a_{kk}$ donde las a_{kk}

son los valores propios de $\mathbf{A}$ y los C_k son los coeficientes del desarrollo.

LA TEORÍA DE SCHRÖDINGER COMO TEORÍA MATRICIAL

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}+V(x)=\hat{H} \qquad \hat{H}\psi(x,t)=-i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}$$

$$\hat{H}\varphi=i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t}\rightarrow\frac{\partial\varphi}{\partial t}=-\frac{1}{i\hbar}\hat{H}$$

Ecuación de onda dependiente del tiempo unidimensional:

$$i\,\mathrm{h}\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2}+V(x)\psi(x,t)$$

$$\frac{d}{dt}a_{ij}=\frac{d}{dt}(\psi_i,\mathbf{A}\psi_j)=\left(\frac{\partial\psi_i}{\partial t},\mathbf{A}\psi_j\right)+\left(\psi_i,\mathbf{A}\frac{\partial\psi_j}{\partial t}\right)+\left(u_i,\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}\psi_j\right)$$

$$\frac{da_{ij}}{dt}=-\frac{1}{i\hbar}(u_i,\mathbf{HA}u_j)+\frac{1}{i\hbar}(u_i,\mathbf{AH}u_{ij})+\left(u_i,\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}u_j\right)$$

$$\left(\frac{d\mathbf{A}}{dt}\right)_{ij}=\frac{1}{i\hbar}([\mathbf{A},\mathbf{H}])_{ij}+\left(\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}\right)_{ij}$$

LA TEORÍA DE SCHRÖDINGER COMO TEORÍA MATRICIAL

La ecuación anterior representa la dependencia temporal de los elementos de la matriz que corresponde a un operador.

Casi todos los operadores de los que tratamos no dependen explícitamente del tiempo, de modo que corrientemente el último término es igual a cero.

El resto de la ecuación podría considerarse como la ecuación del movimiento para una matriz;

$$\boxed{\frac{d\mathbf{A}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\mathbf{A}, \mathbf{H}]}$$

quedando sobreentendido que los elementos de matriz en esta ecuación se toman entre estados que satisfacen la ecuación de Schrödinger.

MUCHAS GRACIAS

¿ALGUNA PREGUNTA?

BIBLIOGRAFÍA

Borowitz, Sidney. “Fundamentos de la Mecánica Cuántica”

Gratton, Julio. “Introducción a la Mecánica Cuántica”

Kasirajan, Venkateswaran. “Fundamentals of Quantum Computing”

Heisenberg, Werner. “Quantum-Theoretical Re-interpretation of Kinematic and Mechanical Relations”

Passeggi, Alejandro. “apuntes de Gal II 2022”

Andrés Abella. Notas para curso Algebra 2