1) El oscilador armónico no se resuelve en mecánica cuántica ortonormalizando como apareció en un problema anterior sino utilizando los *operadores de destrucción y creación*:

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\Big(X + \frac{iP}{m\omega}\Big) \qquad \text{y} \qquad a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\Big(X - \frac{iP}{m\omega}\Big)$$

donde m, ω y por supuesto $\hbar$ (masa, velocidad angular y constante de Planck reducida), son constantes y X y P son operadores (aplicaciones) lineales autoadjuntos asociados al espacio y al momento. Salvo un cambio de escala, los posibles niveles de energía están dados por los autovalores de $N = a^\dagger a$ y los autoestados por sus *autofunciones* (se prefiere este nombre frente a autovectores porque pertenecen a un espacio de funciones).

I) Justifica que $a^\dagger$ es la aplicación adjunta de a, de hecho $L^\dagger$ es la notación típica en física para la adjunta de L.

II) Demuestra que la relación de incertidumbre $XP - PX = i\hbar\,\mathrm{Id}$ implica $aa^\dagger - a^\dagger a = \mathrm{Id}$.

III) Comprueba que si Ψ es autofunción de N con autovalor λ, entonces $a(\Psi)$ y $a^\dagger(\Psi)$, si no son nulas, son autofunciones de N con autovalores $\lambda - 1$ y $\lambda + 1$. Indicación: El apartado anterior permite relacionar $a^\dagger a^2$ con aN y $a^\dagger a a^\dagger$ con $a^\dagger N$.

*IV) Si Ψ_0 es una autofunción de N normalizada $\|\Psi_0\| = 1$ con autovalor 0 tal que $a(\Psi_0) = 0$, entonces $\frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n(\Psi_0)$ es una autofunción normalizada con autovalor n. Indicación: Si dominas las demostraciones por inducción, esto no debería ser difícil.

Comentarios: El proceso indicado permite en física obtener todas las autofunciones a partir de la función de ondas correspondientes al estado fundamental, la Ψ_0 del último apartado. El ascenso y descenso de la energía que representa el autovalor se asocia en el contexto de la teoría cuántica de campos a la aparición o desaparición de partículas de ahí el nombre de los operadores a y $a^\dagger$, mientras que a N se le llama *operador de número*.

2) Al estudiar la ecuación de Schrödinger uno se enfrenta habitualmente a problemas de autovalores en espacios de dimensión infinita. Por ejemplo, para estimar la energía del estado fundamental de una partícula bajo un potencial cuártico, hay que hallar el menor autovalor λ_0 del operador $H(\Psi) = -\Psi'' + 2x^4\Psi$, el cual actúa sobre funciones (de onda) $\Psi = \Psi(x)$ en un espacio de dimensión infinita. Vamos a ver una aproximación usando espacios de dimensión finita.

I) Si V es un espacio vectorial real de dimensión finita y $\{\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_n\}$ es una base ortonormal, explica por qué $\langle \vec{e}_i, L(\vec{e}_j)\rangle$ da el elemento a_{ij} de la matriz de $L : V \longrightarrow V$ en esta base.

II) Se conoce que las autofunciones (autovectores) de H correspondientes a λ_0 no se anulan en ningún punto y forman un espacio de dimensión 1. Deduce de ello que está generado por una

Las hojas opcionales tratan de mostrar la aplicación de la asignatura en diferentes temas de física. Son una propuesta de F. Chamizo. Si durante el curso 2018–2019 tienes alguna duda que no te resuelven en la clase de problemas, consulta con él. Los apartados con asterisco son más difíciles.

función par $\Psi_0(x) = \Psi_0(-x)$. Indicación: Prueba que si $\Psi(x)$ es autofunción, entonces $\Psi(-x)$ también lo es, por tanto $\Psi(x) = \mu\Psi(-x)$ y de ello $\Psi(x) = \mu^2\Psi(x)$. La no anulación excluye la posibilidad $\mu = -1$.

III) Siguiendo la recurrencia $H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x)$ con $H_0(x) = 1$ y $H_0(x) = 2x$, calcula los polinomios H_2 y H_4.

IV) Se sabe que las funciones $\psi_n(x) = H_n(x)e^{-x^2/2}\big(\pi^{1/2}n!2^n\big)^{-1/2}$ son ortonormales con el producto escalar $\langle f, g\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} fg$. Explica por qué Ψ_0 está en el complemento ortogonal del subespacio generado por $\{\psi_1, \psi_3, \psi_5, \dots\}$. Indicación: Recuerda la paridad.

*V) Lo anterior motiva considerar un subespacio de dimensión finita generado por unas cuantas ψ_{2n} para tratar H como si fuera una matriz. Con *software* adecuado calcula $a_{ij} = \langle \psi_{2i}, H(\psi_{2j})\rangle$ para $0 \le i, j \le 2$ y halla el menor autovalor de la matriz 3×3 resultante. El resultado obtenido es una estimación de λ_0 que es $1{,}3359\dots$ utilizando cálculos más extensos.

Comentarios: En realidad las funciones ψ_n son las autofunciones de N en el problema del oscilador armónico. Es decir, estamos usando las soluciones cuando el potencial es cuadrático para estimar soluciones con un potencial bien distinto. Desde el punto de vista matemático, el teorema espectral nos permite en muchos casos usar las autofunciones de operadores hermíticos para obtener una “base” con la que generar todas las funciones con ciertas propiedades razonables.

3) La exponencial de una matriz permite tratar las ecuaciones diferenciales del tipo $\vec{x}' = A\vec{x}$ de manera unificada sin depender de la dimensión de $\vec{x}$, lo cual es un modelo muy bueno para entender la ecuación de Schrödinger, para la que la dimensión es normalmente infinita. Cuando esta ecuación se plantea con hamiltonianos (energías) dependientes del tiempo, las cosas son más complicadas de lo que cabría esperar y la exponencial pierde parte de su utilidad, pero no toda, como exploraremos a continuación.

I) Comprueba que $x(t) = \exp\big(\int_0^t A(u)\ du\big)x_0$ resuelve la ecuación diferencial $x' = A(t)x$ con $x(0) = x_0$ cuando x y A son escalares, funciones de $\mathbb{R}$ en $\mathbb{R}$.

II) Busca un ejemplo que muestre que el análogo vectorial del apartado anterior es falso en general. Es decir, encuentra una matriz $A = A(t)$ tal que $\vec{x}(t) = \exp\big(\int_0^t A(u)\ du\big)\vec{x}_0$ no resuelva la ecuación $\vec{x}' = A(t)\vec{x}$ con $\vec{x}(0) = \vec{x}_0$. Indicación: Casi cualquier cosa no constante y no diagonal funciona, por ejemplo $a_{12} = a_{22} = 0$, $a_{11} = 1$, $a_{21} = 2t$.

III) Comprueba que la matriz $A(t) = \left(\begin{smallmatrix} 2t-t^2 & t-t^2 \\ 2t^2-2t & 2t^2-t \end{smallmatrix}\right)$ cumple $A(t_1)A(t_2) = A(t_2)A(t_1)$ para todo $t_1, t_2 \in \mathbb{R}$.

IV) Para la $A(t)$ del apartado anterior, $B(t) = \exp\big(\int_0^t A(u)\ du\big)$ tiene como elementos $b_{11} = -e^{t^3/3} + 2e^{t^2/2}$, $b_{12} = -e^{t^3/3} + e^{t^2/2}$, $b_{21} = 2e^{t^3/3} - 2e^{t^2/2}$ y $b_{22} = 2e^{t^3/3} - e^{t^2/2}$. Comprueba que $B'(t) = A(t)B(t)$ y deduce de ello que para esta $A(t)$ la ecuación $\vec{x}' = A(t)\vec{x}$ sí se puede resolver con $\vec{x}(t) = \exp\big(\int_0^t A(u)\ du\big)\vec{x}_0$, cualquiera que sea $\vec{x}(0) = \vec{x}_0$.

*V) Demuestra que si una matriz $n\times n$ cumple $A(t_1)A(t_2) = A(t_2)A(t_1)$ para todo $t_1, t_2 \in \mathbb{R}$ entonces $\vec{x}(t) = \exp\big(\int_0^t A(u)\ du\big)\vec{x}_0$ es solución de $\vec{x}' = A(t)\vec{x}$ con $\vec{x}(0) = \vec{x}_0$.

Comentarios: Se llama *exponencial ordenada en el tiempo* a lo que resuelve la ecuación diferencial cuando la condición del último apartado no se da. Esto es en principio poco más que un nombre porque no hay una manera sencilla de calcularla. Sin embargo tiene una interpretación interesante que explica su nombre: en un instante muy pequeño $A(t)$ es prácticamente constante y eso condiciona el valor de la solución en el instante siguiente a partir de las constantes anteriores siempre conservando que es el pasado el que afecta al futuro. Las *series de Dyson*, el *desarrollo de Magnus* y otros objetos que aparecen en física cuántica avanzada involucran expresiones del tipo $\int_0^t \int_0^{t_1} \cdots \int_0^{t_n} A(t_1)A(t_2)\cdots A(t_n)\, dt_n \cdots dt_2 dt_1$ donde los límites de integración imponen la ordenación temporal $t_1 > t_2 > \cdots > t_n$.

4) En la teoría en la que se basan las *imágenes por resonancia magnética* aparece una ecuación diferencial con coeficientes complejos del tipo

$$\vec{x}' = -iA(t)\vec{x} \qquad \text{con} \quad A(t) = v_0\sigma_3 + v_1 \begin{pmatrix} 0 & e^{i\omega t} \\ e^{-i\omega t} & 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Aquí v_0 y v_1 son constantes reales no nulas dependientes de un campo magnético externo variable al que se somete a la muestra y ω es su frecuencia de oscilación.

I) Comprueba que no se cumple la condición del problema anterior $A(t_1)A(t_2) = A(t_2)A(t_1)$ para todo $t_1, t_2 \in \mathbb{R}$.

II) Lleva a cabo el cambio de base dependiente del tiempo $\vec{x} = \exp(it\omega\sigma_3/2)\vec{y}$ para obtener una ecuación del tipo $\vec{y}' = -i\widetilde{A}\vec{y}$ con $\widetilde{A}$ una matriz hermítica constante.

III) Halla los autovalores de $-i\widetilde{A}$ y a partir de ellos explica por qué las soluciones $\vec{x}$ son oscilatorias y acotadas en el tiempo.

*IV) Da una fórmula explícita que resuelva la ecuación $\vec{x}' = -iA(t)\vec{x}$. Indicación: Aquí el reto es encontrar una fórmula para $\exp(-iH)$ con H cualquier matriz 2×2 simétrica real de traza cero. Piensa primero en el caso $\det(H) = -1$ y nota que hay cierta periodicidad en H^k.

Comentarios: Las imágenes por resonancia magnética han revolucionado la práctica médica y su existencia es un gran triunfo de la física, la ingeniería y las matemáticas. Se basan en la resonancia del espín de los protones en los núcleos de los átomos de hidrógeno que están en las moléculas de agua. Con un campo magnético inmenso se consigue alinear los espines y después con un campo variable más débil se hace que entren en resonancia. Estudiando tal resonancia y la manera en la que se amortigua cuando el campo variable cesa se obtiene información acerca del tipo de tejidos. El instrumento matemático fundamental es el análisis de Fourier que permite separar las señales que llegan simultáneamente de una infinidad de protones oscilando.

5) La exponencial de operadores se utiliza a menudo en física para establecer una relación entre grupos de transformaciones y espacios vectoriales. En estos últimos se cumple la propiedad conmutativa y en los primeros en general no y de ahí que la exponencial no se comporte en general como su análogo en una variable. Esta diferencia se mide en diferentes ámbitos con el *conmutador* que para dos matrices (o aplicaciones lineales) se define como $[A, B] = AB - BA$.

I) Da un ejemplo que muestre que $\exp(A)\exp(B) = \exp(A + B)$ no es cierto en general para matrices cuadradas A y B.

II) Muestra que si dos matrices diagonalizan en una misma base entonces conmutan y se tiene $\exp(A)\exp(B) = \exp(A+B)$.

III) Demuestra que si A y B son matrices cuadradas, definiendo $M(t) = \exp(tA)B\exp(-tA)$ se tiene $M'(0) = [A,B]$ y en general $M'(t) = \exp(tA)[A,B]\exp(-tA)$.

IV) La posición X y el momento P en física cuántica son operadores autoadjuntos en espacios de dimensión infinita que satisfacen $[X,P] = i\hbar\,\mathrm{Id}$. Procediendo con ellos formalmente, como si fueran matrices, prueba que para $\lambda \in \mathbb{R}$ se tiene $\exp(i\lambda P/\hbar)X\exp(-i\lambda P/\hbar) = X + \lambda\mathrm{Id}$, esto significa que trasladar en el espacio se puede ver como un cambio de base que depende del momento, con $C = \exp(-i\lambda P/\hbar)$. Indicación: Aplica el apartado anterior a $M(\lambda)$ dada por el primer miembro y nota que $M(0) = X$.

*V) Demuestra que si $[A,B] = \lambda\,\mathrm{Id}$ con $\lambda \in \mathbb{C}$ entonces $\exp(A)\exp(B) = e^{\lambda/2}\exp(A+B)$. Indicación: Considera $N(t) = \exp\big(t(A+B)\big)\exp(-tB)$, comprueba que satisface la ecuación diferencial $N'(t) = N(t)(A + \lambda t\,\mathrm{Id})$ con $N(0) = \mathrm{Id}$ y comprueba que $N(t) = e^{-\lambda t^2/2}\exp(tA)$ es su solución.

Comentarios: La relación del último apartado es un caso muy particular de la famosa *fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff* que afirma $\exp(A)\exp(B) = \exp(C)$ donde C se reduce a $A+B$ si A y B conmutan mientras que en el caso general C tiene una intrincada expresión en términos de conmutadores. Las leyes de conservación y las relaciones de incertidumbre en física se expresan por medio de conmutadores. Por ejemplo, la fórmula $[X,P] = i\hbar\,\mathrm{Id}$ de este problema y uno anterior representa la relación de incertidumbre de Heisenberg y $[\frac{1}{2m}P^2 + V(r)\,\mathrm{Id}, L] = 0$ con $V(r)$ un potencial radial representa la conservación del momento angular L para una partícula cuántica de masa m bajo tal potencial.