

CALCULO DE LOS ELEMENTOS MATRICIALES

$$\langle j | f(\hat{x}) | i \rangle$$

HERNAN ESTRADA
DEPARTAMENTO DE FISICA
UNIVERSIDAD NACIONAL
SANTA FE DE BOGOTA, COLOMBIA

En la mecánica cuántica es de importancia el cálculo de elementos matriciales de la forma $\langle j | f(\hat{x}) | i \rangle$ donde $|i\rangle$ y $|j\rangle$ son vectores que pertenecen a una base completa ortogonal $\{|k\rangle\}$ y $f(\hat{x})$ es un operador que representa un observable. Hay innumerables ejemplos donde es necesario la evaluación de estos elementos matriciales, sin embargo, en muy pocas ocasiones es sencillo calcularlos. En este artículo, haremos uso de un método eficiente desarrollado por el autor empleado con éxito en problemas de investigación que permite su cálculo de manera directa y sin complicaciones. Simplemente tendremos en cuenta algunas propiedades de los operadores que son tema común en los cursos introductorios de la física cuántica.

Es conocido que la ecuación de valores propios para el operador posición \hat{x} es:

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle \quad (1)$$

siendo x el valor propio asociado al vector propio $|x\rangle$. Si realizamos el desarrollo del vector propio $|x\rangle$ en la base finita formada por los N primeros elementos de la base $\{|k\rangle\}$, obtenemos:

$$|x\rangle = \sum_{k=1}^N c_k |k\rangle \quad (2)$$

el coeficiente $c_k = \langle k | x \rangle$ es la componente del desarrollo del vector. Por simplicidad y sin pérdida de generalidad tomamos la base $\{|k\rangle\}$ como la formada por las funciones propias del oscilador armónico unidimensional cuyo hamiltoniano es:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} \mu \omega^2 x^2 \quad (3)$$

(μ representa la masa reducida). Las soluciones para este hamiltoniano son conocidas y sólo anotamos la expresión de las funciones y las energías propias (Schiff):

$$\psi_n(x) = \left(\frac{\kappa}{2^n n! \sqrt{\pi}} \right)^{\frac{1}{2}} \mathfrak{H}_n(\kappa x) e^{-\frac{1}{2}(\kappa x)^2}$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$$

\mathfrak{H}_n son los polinomios de Hermite. El parámetro κ que está relacionado con la frecuencia del oscilador ω , nos sirve para identificar la base empleada.

Si se reemplaza (2) en (1) y se tiene en cuenta la condición de ortogonalidad de los vectores de la base, obtenemos:

$$\sum_{k=1}^N (\langle m | \hat{X} | k \rangle - x \delta_{mk}) c_k = 0 \quad (4)$$

Al resolver este problema de valores propios por métodos numéricos, encontramos los N valores propios x_k ($k=1, 2, \dots, N$), y asociado con cada valor propio, el correspondiente vector propio ortonormalizado $\{c_k\}$ ($k=1, 2, \dots, N$). Esta diagonalización debería dar un espectro continuo si N tiende a infinito, sin embargo como consideramos solo matrices de orden finito, el espectro del operador \hat{X} es discreto. Estos valores discretos se reparten simétricamente alrededor de cero hasta la región del espacio desarrollada por el problema y su densidad aumenta a medida que N crece.

Para calcular $\langle j | f(\hat{X}) | i \rangle$, tenemos en cuenta la relación de clausura de los vectores

$$\hat{1} = \sum |x\rangle \langle x| \quad (5)$$

y

$$f(\hat{X})|x\rangle = f(x)|x\rangle \quad (6)$$

que se puede demostrar facilmente a partir de (2). Al introducir el operador identidad $\hat{1}$ entre $\langle i|$ y $f(\hat{X})$ y entre $f(\hat{X})$ y $|j\rangle$, obtenemos para el elemento matricial de interés:

$$\begin{aligned} \langle i|f(\hat{X})|j\rangle &= \sum \langle i|x\rangle \langle x|f(\hat{X})|x'\rangle \langle x'|j\rangle \\ &= \sum_{\gamma} c_{i,\gamma} f(x_{\gamma}) c_{j,\gamma} \end{aligned} \quad (7)$$

donde el número de vectores propios que se considera en la suma está determinado por el número de términos en la expansión (2), $f(x_{\gamma})$ es el valor del operador evaluado en x_{γ} y c_{γ} es el vector propio correspondiente. Como el desarrollo de x en la base $\{|k\rangle\}$ se corta a partir del N elemento, es de esperar que a medida que N aumente el cálculo del elemento matricial sea mejor.

En el caso particular considerado, la representación del operador \hat{X} en la base del oscilador armónico es una matriz tridiagonal. (ver: Flügge o Campos)

Para ilustrar la eficiencia del método, se compara en la tabla I los resultados obtenidos para diferentes valores de N con el resultado analítico para el caso del operador $f(\hat{X}) = e^{-x^2}$:

$$\langle n|e^{-x^2}|m\rangle = \sqrt{\frac{(n-1)!(m-1)!}{2^{n+m-1}}} \sum_{l=0,2,\dots}^{n-1} \frac{(-\frac{1}{2})^{\frac{n+m-2-l}{2}} \kappa^l}{l! (\frac{m-l-1}{2})! (\frac{n-l-1}{2})!} \quad (m < n) \quad (8)$$

$$\langle n|e^{-x^2}|m\rangle = 0 \quad n \text{ par (impar), } m \text{ impar (par)}$$

La comparación de los elementos matriciales obtenidos por este método son idénticos en ± 1 a la sexta cifra significativa con el valor exacto, lo cual

nos asegura una buena eficiencia del procedimiento expuesto.

TABLA I

N	n=1, m=1	n=1, m=19	n=10, m=10	n=20, m=20
10	0.70709095	0.25556947
20	0.70710678	-4.51924537(-4)	0.13321783	0.17954524
30	0.70710678	-5.94721620(-4)	0.13114929	9.86630875(-2)
40	0.70710678	-5.94774788(-4)	0.13114750	9.09776596(-2)
50	0.70710678	-5.94774797(-4)	0.13114750	9.09236442(-2)
exacto	0.70710678	-5.94774798(-4)	0.13114750	9.09235510(-2)

En el "programa" de bloques en el apéndice se indica la manera como se desarrolla el método de computo para el cálculo de $\langle i | f(\hat{X}) | j \rangle$.

REFERENCIAS

Schiff L, **Quantum Mechanics** (McGraw-Hill, New York 1968)

Flügge S.. **Practical Quantum Mechanics** (Springer Verlag New York Heidelberg, Berlin. 1974)

Press W. H, Flannery B. P, Teukolsky S. A, Vetterling W. T, **Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing.** (Cambridge University Press, N. Y. 1988)

Campos D., **Teoría de Sistemas Cuánticos** (Universidad Nacional, Bogotá 1989)

APENDICE

C PROGRAMA PARA CALCULAR EL ELEMENTO MATRICIAL $\langle i|f(x)|j \rangle$

C
C *PARAMETER (N=numero de elementos que se consideran en la expansion (2))*

DIMENSION Q(N,N),EWQ(N),EWE(N,N)

C Q(N,N) ES LA MATRIZ TRIDIAGONAL QUE REPRESENTA EL OPERADOR

C R EN LA BASE DEL OSCILADOR C ARMONICO TRIDIMENSIONAL

C EWQ(N) ES UN VECTOR QUE CONTIENE LOS VALORES PROPIOS DE R

C EWE(N,N) ES UN MATRIZ CUYAS COLUMNAS REPRESENTAN LOS
C VECTORES PROPIOS.

C LA J-ESIMA COLUMNA ES EL VECTOR PROPIO NORMALIZADO

C CORRESPONDIENTE AL J-ESIMO ELEMENTO DEL VECTOR EWQ.

C -----

C CALCULO DE LOS VALORES PROPIOS Y VECTORES PROPIOS DEL OPERADOR R
C EN LA BASE DEL OSCILADOR ARMONICO.

C EL CALCULO DEL PROBLEMA DE VALORES PROPIOS SE REALIZA MEDIANTE
C LA SUBROUTINA EIGEN. UNA DESCRIPCION DE ESTOS PROCEDIMIENTO SE PUEDE
C HALLAR EN EL LIBRO "NUMERICAL RECIPES"

C

DO 1 I=1,N

DO 1 J=1,N

Q(N,N)=0.

1 *CONTINUE*

DO 3 I=1,N-1

*Q(I,I+1)=SQRT(2.*I)*

Q(I+1,I)=Q(I,I+1)

3 *CONTINUE*

CALL EIGEN (Q,EWQ,EWE,N,.....)

C -----

C CALCULO DEL ELEMENTO MATRICIAL

C $A=\langle J|F(R)|I \rangle$

SUM=0.

DO 5 K=1,N

SUM=SUM+EWE(I,K)*F(EWQ(K))*EWE(J,K)

5 CONTINUE

A=SUM

RETURN

END

FUNCTION F(R)

C EN ESTE SUBPROGRAMA SE DEFINE LA FUNCION F(R)

F=OPERADOR F(R)

RETURN

END