Matriz no trivial con autovalores de Stern-Gerlach construida a través de la solución para un problema inverso del álgebra matricial

J. D. Bulnes
Grupo de Mecânica Quântica, Informação Quântica e Física Aplicada, Universidade Federal do Amapá, Rod. Juscelino Kubitschek, Km. 2, Jardim Marco Zero, CEP. 68903-419, Macapá, AP, Brasil.

E-mail: bulnes@unifap.br

(Recibido el 27 de Febrero de 2014, aceptado el 15 de Junio de 2014)

Resumen
En este artículo, después de identificar un problema inverso del algebra matricial, construimos una matriz no hermiteana cuyos autovalores coinciden con los del hamiltoniano para el experimento Stern-Gerlach, con partículas moviéndose en el plano vertical.

Palabras clave: Matriz hamiltoniana, efecto Stern-Gerlach, problema inverso.

Abstract
In this article, after identifying an inverse problem in the matrix algebra, we construct a non-hermitian matrix whose eigenvalues are equals to the eigenvalues of the Hamiltonian for the Stern-Gerlach experiment with particles moving in the vertical plane.

Keywords: Hamiltonian matrix, Stern-Gerlach effect, inverse problem.

PACS: 02.10.Yn, 02.30.Zz, 03.65.Aa, **ISSN 1870-9095**

I. INTRODUCCIÓN

La identificación (en los años 1920) de que el álgebra matricial ofrece un conjunto de conceptos y herramientas matemáticas adecuadas para modelar varias propiedades y aspectos esenciales de los fenómenos que se manifiestan a escala microscópica, a través de la llamada 'mecánica matricial', esencialmente desarrollada por Heisenberg, fue muy importante para el establecimiento del modelo mecánico cuántico.

Como sabemos, en la mecánica cuántica a un determinado sistema microscópico le corresponde un operador autoadjunto, directamente relacionado con la energía del sistema, el hamiltoniano (cuántico), cuyos autovalores corresponden, precisamente, a las energías accesibles a ese sistema. En algunos casos simples, el espectro energético para un sistema cuántico es encontrado a través del uso del 'principio aditivo de la energía[1]' y no a través de la solución del correspondiente problema de autovalores y autovectores. La afirmación anterior llega a ser más evidente en el caso del hamiltoniano de Stern–Gerlach, en que el uso de tal principio constituye un recurso con el que se evita abordar el problema de la determinación de las autofunciones analíticas correspondientes, las que están completamente ausentes en los libros [1, 2, 3, 4, 5, 6].

Por otro lado, el problema que acaba de ser mencionado en el párrafo anterior es uno, entre muchos, que son de interés en el álgebra matricial: Determinar los autovalores y autovectores de una matriz conocida. Si interpretamos el problema anterior como un *problema directo* entonces, de manera inmediata, podemos identificar el correspondiente *problema inverso*: Determinar la matriz (inicialmente desconocida) que, por exigencia, presente autovalores previamente definidos[2]. Un caso particular del problema inverso anterior es el siguiente: Construir dos matrices, A y B, de manera que los autovalores de una de ellas sean los correspondientes a los de la otra disminuidos (o incrementados) en una cantidad previamente definida.

En este artículo, habiendo identificado el problema inverso y el caso particular mencionados, así como sus soluciones, procedemos a incorporarlos en un contexto mecánico cuántico con el propósito de construir una matriz no hermiteana que presente los autovalores completos del hamiltoniano de Stern–Gerlach. De esa manera, mostramos que no solamente las matrices hamiltonianas se relacionan

[1] En virtud del cual a cada término en el hamitoniano (para una interacción específica) corresponde un sumando (una energía) en los autovalores, aparte del término de energía cinética.

[2] La solución para este problema se presenta de manera esquemática en el Apéndice I, en la parte final de este trabajo.

con la energía de un sistema cuántico, lo que, en principio, no podía ser descartado; sin embargo, no se conocían ejemplos específicos de esa situación.

El artículo es presentado en el siguiente orden: En la sub-sección A de la sección I presentamos las expresiones matemáticas que definen los autovalores completos de Stern–Gerlach (es decir, dependientes del gradiente del campo magnético) encontrados en [7]. En la sección II presentamos la solución al caso particular del problema inverso que ha sido definido. En la sección III, trabajando con el 'hamiltoniano reducido' de Stern–Gerlach y dentro de un contexto mecánico cuántico, incorporamos la solución encontrada en la sección II. En la sección IV calculamos las autofunciones analíticas de la matriz no hermiteana encontrada en la sección III. Finalmente, presentamos nuestras conclusiones y un apéndice.

A. Autoenergías completas de Stern–Gerlach

Con relación al efecto Stern–Gerlach, para el caso de partículas eléctricamente neutras de espín ½ moviéndose inicialmente a lo largo de la dirección X y posteriormente, cuando ingresan a la región donde actúa el campo magnético, de manera que sus trayectorias se encuentran en el plano vertical $Y=0$, fue mostrado en [7] que el gradiente intenso del campo magnético no solamente produce la separación espacial de las partículas del haz inicial, sino que también contribuye a las energías de las partículas haciendo con que los niveles energéticos se desplacen (con relación a los niveles energéticos que aparecen en la literatura); otro asunto que tampoco es discutido en los textos de mecánica cuántica [1, 2, 3, 4, 5, 6].

Los autovalores del 'hamitoniano reducido' de Stern–Gerlach (correspondiente a una partícula descrita en el párrafo anterior) encontrados en [7] son los siguientes,

$$E_1=\frac{p_x^2}{2m}+\mu_B B_0-\xi_0\left(\frac{\mu_B^2\alpha^2\hbar^2}{2m}\right)^{(1/3)}. \tag{1}$$

$$E_2=\frac{p_x^2}{2m}-\mu_B B_0-\xi_0\left(\frac{\mu_B^2\alpha^2\hbar^2}{2m}\right)^{(1/3)}. \tag{2}$$

Donde ξ_0 es el primer máximo de la función de Airy, α corresponde a la magnitud del gradiente del campo magnético y los demás parámetros son definidos de la manera usual. Notar que, en (1) y (2), el término que contiene el gradiente es dimensionalmente correcto; es decir, tiene unidades de energía, algo que no fue destacado debidamente en [7]. La presencia de $\hbar$ en los términos correspondientes en (1) y (2) hace que los mismos sean pequeñísimos, inclusive para un gradiente muy intenso. Las expresiones anteriores, que son exactas, ponen en evidencia la contribución explícita (de la magnitud) del gradiente del campo magnético a las energías en el efecto Stern–Gerlach; resultados que fueron destacados recientemente [8].

II. LA SOLUCION AL CASO PARTICULAR DEL PROBLEMA INVERSO

Formalicemos matemáticamente el problema matricial definido en la sección I: dada una matriz A, con autovalores a_k, construir una matriz B, del mismo tamaño que A, de manera que sus autovalores sean los de A disminuidos (o aumentados) en una misma constante q; es decir, si,

$$A\vec{x}_k=a_k\vec{x}_k \tag{3}$$

se quiere construir una matriz M tal que,

$$(A+M)\vec{y}_s=B\vec{y}_s=b_s\vec{y}_s\,. \tag{4}$$

Con $b_s=a_s\pm q$. A continuación vamos a considerar el caso $b_s=a_s-q$. Para resolver el problema propuesto es suficiente asumir que $M=-qI$, donde I es la matriz identidad; en ese caso, tenemos,

$$(A-qI)\vec{y}_s=b_s\vec{y}_s \quad\rightarrow\quad A\vec{y}_s=(b_s+q)\vec{y}_s \tag{5}$$

Los números b_s+q son, de acuerdo con (5), autovalores de la matriz A, independientemente de que ella sea hermiteana o no; de esta manera, podemos escribir, $b_s=a_s-q$ para los autovalores de la matriz B.

III. LA SOLUCION AL PROBLEMA INVERSO Y UNA MATRIZ CON AUTOVALORES DE STERN-GERLACH

En esta sección adaptamos la solución encontrada en la sección II a un contexto cuántico; particularmente, a uno relacionado con la matemática del efecto Stern–Gerlach, lo que permitirá construir una matriz no hermiteana cuyos autovalores sean los dados en (1) y (2).

Consideremos el 'hamiltoniano reducido' de Stern–Gerlach; esto es,

$$H_{red}=\frac{1}{2m}\left(\hat{P}_x^2+\hat{P}_z^2\right)I+\mu_B\left(B_0+\alpha z\right)\sigma_3 \tag{6}$$

donde I es la matriz identidad y σ_3 es la tercera matriz de Pauli. Los autovalores de la hamiltoniana (6) están dados en (1) y (2), como se mostró en [7].

Dentro del contexto que estamos considerando, vamos a definir la matriz A como aquella que resulta de tomar $\alpha=0$ en (6); es decir,

$$A = \frac{1}{2m}\left(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_z^2\right)I + \mu_B B_0 \sigma_3 \tag{7}$$

matriz que, en consecuencia, tendrá como autovalores,

$$a_1 = \frac{p_x^2}{2m} + \mu_B B_0 \,. \tag{8}$$

$$a_2 = \frac{p_x^2}{2m} - \mu_B B_0 \,. \tag{9}$$

Que se obtienen de (1) y (2) haciendo, aquí también, $\alpha = 0$. Los autovalores (8) y (9) están de acuerdo con la física del efecto Stern-Gerlach: la componente homogénea del campo magnético B_0 produce la separación energética de las partículas, pero no su separación espacial. A continuación, identificamos el número (arbitrario) q, en (5), con la expresión $\xi_0\left(\frac{\mu_B^2\alpha^2\hbar^2}{2m}\right)^{(1/3)}$, de esa manera la matriz B queda definida así,

$$B = A - qI = \begin{pmatrix} H_{1,1} & 0 \\ 0 & H_{2,2} \end{pmatrix}. \tag{10}$$

Siendo,

$$H_{1.1} = \frac{1}{2m}\left(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_z^2\right) + \mu_B B_0 - \xi_0\left(\frac{\mu_B^2\alpha^2\hbar^2}{2m}\right)^{(1/3)}. \tag{11}$$

$$H_{2,2} = \frac{1}{2m}\left(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_z^2\right) - \mu_B B_0 - \xi_0\left(\frac{\mu_B^2\alpha^2\hbar^2}{2m}\right)^{(1/3)} \tag{12}$$

De manera explícita podemos escribir,

$$B = \frac{1}{2m}\left(\hat{P}_x^2 + \hat{P}_z^2\right)I + \mu_B B_0 \sigma_3 - \xi_0\left(\frac{\mu_B^2\alpha^2\hbar^2}{2m}\right)^{1/3} I \,. \tag{13}$$

Que, de acuerdo con la sección II, tiene como autovalores,

$$E_1 = a_1 - q \tag{14}$$

$$E_2 = a_2 - q \tag{15}$$

Observe que el resultado (14) es el mismo que el dado en (1); similarmente, el (15) es el mismo que el dado en (2).

De esta manera hemos construido una matriz, la B, que presenta los mismos autovalores que los del 'hamiltoniano reducido' Stern-Gerlach, (6). Puede apreciarse directamente que la matriz (13) no depende de la variable z, contrariamente a lo que se observa en el hamiltoniano (6); que presenta una dependencia (de la magnitud) del gradiente del campo magnético que es proporcional a la potencia 2/3, a diferencia de la contribución lineal en (6) y que no se trata de una matriz hermiteana, sino diagonal.

El tercer sumando en (13), que tienen unidades de energía, puede ser interpretado como el correspondiente a la interacción entre el momento magnético y el gradiente del campo magnético; así, surge la pregunta: La matriz B podría considerarse como una hamiltoniana Stern-Gerlach? Para intentar responder esta pregunta será conveniente calcular antes las autofunciones de B, lo que será realizado en la siguiente sección.

IV. CÁLCULO DE LAS AUTOFUNCIONES DE *B* CON AUTOVALORES PREDEFINIDOS

En esta sección obtenemos las autofunciones exactas de la matriz (13); entonces, resolvamos el problema,

$$B\varphi = E\varphi \,. \tag{16}$$

Usando la matriz (13). Las ecuaciones diferenciales que se obtienen están desacopladas,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\phi_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi_1}{\partial z^2}\right) + \left[\mu_B B_0 - \xi_0\left(\frac{\mu_B^2\alpha^2\hbar^2}{2m}\right)^{(1/3)}\right]\phi_1 = E\phi_1 \tag{17}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\phi_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\phi_2}{\partial z^2}\right) - \left[\mu_B B_0 + \xi_0\left(\frac{\mu_B^2\alpha^2\hbar^2}{2m}\right)^{(1/3)}\right]\phi_2 = E\phi_2 \,. \tag{18}$$

Vamos a buscar una solución con la forma,

$$\phi_1(x,z) = \exp\{ip_x x/\hbar\}.Q(z)\,. \tag{19}$$

Pues de esa manera, conseguiremos que el autovalor correspondiente sea el dado en (14). Sustituyendo (19) en (17) encontramos la ecuación,

$$Q''(z) - \eta Q(z) = 0\,. \tag{20}$$

Donde el coeficiente η está definido de la siguiente manera,

$$\eta = \frac{2m}{\hbar^2}\left(\frac{p_x^2}{2m} + \mu_B B_0 - \xi_0\left(\frac{\mu_B^2\alpha^2\hbar^2}{2m}\right)^{(1/3)} - E\right). \tag{21}$$

Entonces, exigiendo, de acuerdo con lo discutido en la sección II y la adaptación presentada en la sección III, que el valor de E esté dado por (14), resulta que $\eta = 0$; en consecuencia, encontramos que $Q(z) = \kappa z + \lambda$, con lo cual tenemos que

$$\phi_1(x,z) = (\kappa z + \lambda).\exp\{ip_x x/\hbar\} \tag{22}$$

es la autofunción de B que está asociada con el autovalor (14). Procediendo similarmente encontramos que,

$$\phi_2(x,z) = (-\kappa z + \lambda).\exp\{ip_x x/\hbar\} \qquad (23)$$

es la autofunción asociada con el autovalor (15). Notar que las funciones (22) y (23) no son de cuadrado integrable y no son linealmente independientes; es decir, la matriz B no tiene asociada una base propia.

V. CONCLUSIONES

Hemos identificado el siguiente problema del álgebra matricial: Construir dos matrices de manera que los autovalores de una de ellas sean los de la otra disminuidos en una cantidad definida anticipadamente. Ese problema y su solución fueron adaptados al contexto matemático del modelo cuántico para el efecto Stern-Gerlach, lo que hizo posible construir una matriz no hermiteana, en (13), cuyos autovalores coinciden con los del 'hamiltoniano reducido' de Stern-Gerlach, dados en (1) y (2). Ese resultado muestra, como primera conclusión, que no solamente las matrices hamiltonianas (que son hermiteanas) están relacionadas con las energías del efecto Stern-Gerlach.

La matriz construida en (13) es diagonal, pero esa no es la razón por la que ella no podría ser considera como una 'hamiltoniana'. A este propósito recordemos el caso del hamiltoniano hiperfino para un núcleo con momento magnético μ en un campo magnético $\vec{B} = B_0\vec{k}$, apuntando en la dirección Z (solamente presentamos la parte del hamiltoniano correspondiente a la interacción magnética),

$$H = -\hat{\mu}.\vec{B} = -\gamma_n \hbar B_0 I_3 \qquad (24)$$

donde $I_3 = (1/2)\sigma_3$. La matriz (24) tampoco es hermiteana, sino diagonal, pero, a diferencia de la matriz B, ella tiene asociada una base propia. Es evidente, a partir de los resultados mostrados en la sección IV, que las autofunciones de B no son de cuadrado integrable y no son linealmente independientes. De ello se concluye que no podríamos considerar a la matriz B como un 'observable (no estándar) de energía' porque a través de ella sería formalmente imposible escribir algunos estados que son admitidos por el modelo cuántico, como aquellos que *no* tienen una energía definida (que se escriben como una combinación lineal de los elementos de la base propia del operador de energía). Concluimos que la matriz B es una 'falsa hamiltoniana'.

REFERENCIAS

[1] Feynman, R., Leighton, R, Sands, M., *Mecánica Cuántica*, *Física* Vol. III (Addison-Wesley Iberoamericana, Wilmington, 1971).
[2] Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., Laloë, F., *Quantum Mechanics*, Vol. I (Hermann & Wiley, Paris, 1977).
[3] Ballentine, L., *Quantum Mechanics: A Modern Development*, (Word Scientific, Singapore, 1998).
[4] Sakurai, J. J., *Modern Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, Reading, 1994)
[5] Merzbacher, E., *Quantum Mechanics* (Wiley, New York, 1970).
[6] Landau, L. D., Lifshitz, E. M., *Quantum Mechanics, Non-relativistic Theory*, (Pergamon, Bristol, 1965).
[7] Díaz Bulnes, J., Oliveira, I. S., *Construction of Exact Solutions for the Stern-Gerlach Effect*, Brazilian Journal of Physics **31**, 488 (2001).
[8] Hsu, C. Bailey., Berrondo, Manuel, Van Huele, Jean-François S., *Stern-Gerlach dynamics with quantum propagators*, Phys. Rev. A **83**, 012109 (2011).

Apéndice A

El problema de construir una matriz que, por exigencia, tenga asociados autovalores previamente definidos es resuelto de manera simple. Denominemos por A la matriz 2×2 que, por ahora, es desconocida. La exigencia que asegura la existencia de una solución no trivial para el problema (*directo*) de autovalores y autovectores de la matriz A; es decir,

$$\det(A - \lambda I) = 0 \qquad (25)$$

donde λ es un autovalor, asegura también la solución al problema *inverso* que estamos considerando, siendo que en (25) deben considerarse conocidos los autovalores y desconocida la matriz. Posteriormente, considerando la situación en que despejamos, a partir de (25), el elemento (1,1) de A, que denotamos por a, él aparecerá escrito en términos del autovalor y de los demás elementos de la matriz, entonces debe exigirse una condición que asegure que la constancia de a. Si consideramos el caso no degenerado, debe exigirse la igualdad de las expresiones que definen el valor de a para cada uno de los autovalores λ, con lo cual se obtendrá una ecuación algébrica de segundo grado para otro elemento de la matriz. Los valores de cada uno de los elementos de A se obtienen a través de cálculos algébricos simples.