Física Teórica 2 - Guía 2: Formalismo

Vladimir Daniel Rodríguez Chariarse

7 de abril de 2021

1. Breve resumen: dimensión finita

En este parte se listan definiciones y resultados sobre el formalismo de la Mecánica Cuántica. En este caso, el espacio de estados es un espacio vectorial complejo de dimensión finita D, con un producto interno hermitiano donde:

- Los vectores de estado o *kets* se describen en una base ortonormal $\{|v\rangle_k\}, k = 1, ..D$

$$|\psi\rangle = \sum_k c_k |v_k\rangle := \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ . \\ . \\ . \\ c_D \end{pmatrix}$$

- El producto escalar es hermitiano: lineal en el segundo vector y antilineal en el primero.

$$(|\phi\rangle, \lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle) = \lambda_1 (|\phi\rangle, |\psi\rangle_2) + \lambda_2 (|\phi\rangle, \psi_2)$$
$$(\lambda_1 |\phi_1\rangle + \lambda_2 |\phi_2\rangle, |\psi\rangle) = \lambda_1^* (|\phi_1\rangle, |\psi\rangle) + \lambda_2^* (|\phi_2\rangle, |\psi\rangle)$$

- A cada vector en dicho espacio *ket* $|\phi\rangle$ le corresponde un *bra* $\langle\phi|$, tal que:

$$\langle\phi| (|\psi\rangle) = (|\phi\rangle, |\psi\rangle) \equiv \langle\phi|\psi\rangle$$

por lo que $\langle\phi|$ es una funcional lineal sobre el espacio vectorial, y por consiguiente los *bra* forman un espacio vectorial en sí mismo denominado espacio dual, cuya base es $\{\langle v_k|\}, k = 1, ..D$.

$$|\phi\rangle = \sum_k d_k |v_k\rangle := \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ ... \\ d_D \end{pmatrix}$$
$$\langle\phi| = \sum_k d_k \langle v_k| := (d_1^*, d_2^*, ..., d_D^*)$$

- Como la base es ortonormal: $c_k = \langle v_k|\psi\rangle$, $d_k = \langle v_k|\phi\rangle$ y el producto escalar (*braket*) de dos vectores obedece al producto de dos matrices de $1 \times D$ por $D \times 1$, dando un número complejo:

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_k d_k^* c_k := \sum_k d_k \langle v_k| := (d_1^*, d_2^*, ..., d_D^*) \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ ... \\ c_D \end{pmatrix}$$

- Un vector genérico $|\psi\rangle$ se escribe entonces como

$$|\psi\rangle = \sum_k |v_k\rangle \langle v_k|\psi\rangle = \underbrace{\sum_k (|v_k\rangle\langle v_k|)}_{\mathbb{I}} |\psi\rangle$$

  donde el vector es una suma de sus componentes sobre los vectores de la base e identificamos la relación de completitud:

$$\mathbb{I} = \sum_k |v_k\rangle\langle v_k|$$

  siendo $\mathbb{I}$ el operador Identidad. Empezamos a usar la llamada notación de Dirac, que permite agrupar o desagrupar *ketbras* del tipo $|v_k\rangle\langle v_k|$.

- Mas allá del operador identidad se pueden tener diferentes operadores lineales definidos en el espacio vectorial: En forma genérica

$$A\left(\lambda_1 |\psi_1\rangle + \lambda_2 |\psi_2\rangle\right) = \lambda_1 A |\psi_1\rangle + \lambda_2 A |\psi_2\rangle$$

- El operador mas simple es un *ketbra* $|\alpha\rangle\langle\beta|$: actúa sobre un vector $|\psi\rangle$ y dá un vector paralelo a $|\alpha\rangle$:

$$|\alpha\rangle\langle\beta| \left(|\psi\rangle\right) = |\alpha\rangle \underbrace{\langle\beta|\psi\rangle}_{\mathbb{C}}$$

- El operador A se puede expresar de diversas formas equivalentes en una base $\{v_k\}$:

$$A = \sum_{ij} A_{ij} |v_i\rangle\langle v_j| := \begin{pmatrix} . & ... & . \\ . & A_{ij} & . \\ . & ... & . \end{pmatrix}$$

  donde se puede verificar que los elementos de matriz de la fila i, columna j de A en esa base son:

$$A_{ij} = \langle v_i| A |v_j\rangle$$

- La acción del operador A sobre un estado $|\psi\rangle$

$$A|\psi\rangle = (\sum_{ij} A_{ij} |v_i\rangle\langle v_j|) |\psi\rangle) = \sum_i (\sum_j A_{ij} c_j) |v_i\rangle := \begin{pmatrix} \sum_j A_{1j} c_j \\ \sum_j A_{2j} c_j. \\ . \\ \sum_j A_{Dj} c_j \end{pmatrix}$$

satisface la multiplicación de una matriz (operador) por un vector (vector columna) para dar lugar a otro vector columna.

- Si el operador es diagonal en una base $\{|a_j\rangle\}$,$A_{ij} = a_i\delta_{ij}$, y se tiene la descomposición espectral del operador

$$A = \sum_j a_j |a_j\rangle\langle a_j|$$

- Se define operador adjunto de A a un operador $A^\dagger$que cumple que para todo par de estados:

$$(|\phi\rangle, A|\psi\rangle) = \left((A^\dagger |\phi\rangle, |\psi\rangle\right)$$

los elementos de matriz de este operador cumplen $A^\dagger_{ij} = A^*_{ji}$, que es la matriz transpuesta conjugada de A. Si $A = A^\dagger$, el operador es hermítico, es diagonalizable y sus autovalores son reales.

2. Problema 1

Suponga que $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ es una base ortonormal de un espacio de Hilbert de dimensión 3.

(a) Considere $|\alpha\rangle = \frac{|1\rangle - i|2\rangle}{\sqrt{2}}$ y $|\beta\rangle = \frac{i|1\rangle + |2\rangle}{\sqrt{2}}$. ¿Cuánto vale $\langle\alpha|\beta\rangle$? ¿Son ortogonales?

(b) Escriba la representación matricial en la base $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ de los kets $|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$; de los bra $\langle\alpha|$ y $\langle\beta|$; y de los operadores $|\alpha\rangle\langle\alpha|$, $|\beta\rangle\langle\beta|$, $|\alpha\rangle\langle\beta|$ y $|\beta\rangle\langle\alpha|$.

(c) Considere los tres estados $\{|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle\}$ dados por

$$|a\rangle = \frac{1}{2}\left(|1\rangle + \sqrt{2}\,|2\rangle + |3\rangle\right), \quad |b\rangle = \frac{1}{2}\left(|1\rangle - \sqrt{2}\,|2\rangle + |3\rangle\right), \quad |c\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle - |3\rangle\right).$$

Muestre que $\{|a\rangle, |b\rangle, |c\rangle\}$ forman una base ortonormal y luego escriba $|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$ en esta base.

(d) Repita las partes que involucran $|\beta\rangle$ en los ítems anteriores si ahora $|\beta\rangle = \frac{|1\rangle + i|2\rangle}{\sqrt{2}}$.

(a)

$$|\alpha\rangle = \frac{|1\rangle - i\,|2\rangle}{\sqrt{2}} := \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\-i\\0\end{pmatrix} \qquad |\beta\rangle = \frac{i\,|1\rangle + |2\rangle}{\sqrt{2}} := \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}i\\1\\0\end{pmatrix}$$

de donde

$$\langle\alpha| = \frac{\langle 1| - i\,\langle 2|}{\sqrt{2}} := \frac{1}{\sqrt{2}}(1, i, 0) \quad\Longrightarrow\quad \langle\alpha|\beta\rangle = \frac{1}{2}(i + i + 0) = i \neq 0$$

por lo que no son ortogonales. Como el solapamiento es un número de módulo 1, entonces $P(\alpha|\beta) = |\,\langle\alpha|\beta\rangle\,|^2 = 1$ por lo que $|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$ son el mismos estado:los vectores difieren en una fase. En efecto podemos verificar que:

$$|\beta\rangle = i\,|\alpha\rangle$$

(b) La representación matricial del operador $|\alpha\rangle\,\langle\alpha|$ se puede hacer de dos maneras:

- Usando la propiedad distributiva:

$$|\alpha\rangle\,\langle\alpha| = \frac{1}{2}(|1\rangle\langle 1| + i\,|1\rangle\langle 2| - i\,|2\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2|) := \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

- Usando la multiplicación de un vector columna ($|\alpha\rangle$:=matriz de 3×1) por un vector fila ($\langle\alpha|$:=matriz de 1×3), que da una matriz de 3×3, esto es un operador:

$$|\alpha\rangle\langle\alpha| := \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}(1, i, 0) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

El cálculo de los operadores es similar, pero en este caso usaremos la relación $|\beta\rangle = i\,|\alpha\rangle$:

$$|\beta\rangle\langle\alpha| = (i\,|\alpha\rangle)\,\langle\alpha| = i\,|\alpha\rangle\langle\alpha| := \frac{i}{2}\begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$|\alpha\rangle\langle\beta| = |\beta\rangle\langle\alpha|^\dagger = -i\,|\alpha\rangle\langle\alpha| := -\frac{i}{2}\begin{pmatrix} 1 & i & 0 \\ -i & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$|\beta\rangle\langle\beta| = (i\,|\alpha\rangle)(-i\,|\alpha\rangle) = |\alpha\rangle\langle\alpha|$$

La última ecuación es interesante y dice que el proyector no depende de la fase del vector.

3. Problema 2

Operador de Proyección. Dado un vector $|\alpha\rangle$ de un espacio de Hilbert de dimensión D, definimos el operador $P_\alpha = |\alpha\rangle\langle\alpha|$.

(a) Mostrar que P_α es una *proyección ortogonal*, es decir que satisface: (i) $P_\alpha^2 = P_\alpha$, (ii) $P_\alpha^\dagger = P_\alpha$.

(b) Sea $\{|1\rangle, \ldots, |D\rangle\}$ una base ortonormal. Escribir la representación matricial de P_α en esta base.

(c) Repita el ítem anterior para el caso particular en que $|\alpha\rangle$ coincide con un elemento de la base, por ejemplo $|\alpha\rangle = |1\rangle$. Deduzca que los autovalores de un proyector ortogonal son todos ceros salvo en el caso del vector sobre el cual proyecta, cuyo autovalor es uno.

(d) Considere ahora un operador hermítico A y sean $\{a_i\}$ sus autovalores y $\{|a_i\rangle\}$ la respectiva base ortonormal de autoestados (por simplicidad asumimos que no hay degeneración). Para un j fijo, muestre que $P_j = \prod_{i\neq j} \frac{(A-a_i)}{(a_j-a_i)}$ es el proyector sobre el autoestado de autovalor a_j. Calcule los proyectores: $P_\pm$ para un sistema de spin1/2 con $A = \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}$.

(e) Calcule nuevamente los autoestados de $A = \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}$, usando los operadores de proyección $P_\pm$ del ítem anterior.

(a) $P_\alpha^2 = P_\alpha P_\alpha = |\alpha\rangle \underbrace{\langle\alpha|\alpha\rangle}_{1} \langle\alpha| = |\alpha\rangle\langle\alpha| = P_\alpha$.

$P_\alpha^\dagger = (|\alpha\rangle\langle\alpha|)^\dagger = |\alpha\rangle\langle\alpha| = P_\alpha$.

(b) En esa base el elemento de matriz de P_α es

$$\langle i| P_\alpha |j\rangle = \langle i|\alpha\rangle \langle\alpha|j\rangle$$

por lo que:

$$\langle i| P_\alpha |j\rangle := \begin{pmatrix} . & . & \cdots & . & . \\ . & . & \cdots & . & . \\ . & . & .\ \langle i|\alpha\rangle \langle\alpha|j\rangle\ . & . & . \\ . & . & \cdots & . & . \\ . & . & \cdots & . & . \end{pmatrix}$$

(c) Si $|\alpha\rangle = |k\rangle$, entonces el único elemento de matriz no nulo será cuando $i = k = j$:

$$\langle k| P_{|k\rangle} |k\rangle = \langle k|k\rangle \langle k|k\rangle = 1$$

La matriz será diagonal, pero todos los autovalores serán nulos excepto el $k$ésimo que será 1. Como los autovalores de la matriz son una propiedad de la misma, esto vale para cualquier proyector.

(d) Aplicamos P_j sobre un estado general desarrollado en la base $\{|a_k\rangle\}$, $|\psi\rangle = \sum_k |a_k\rangle \langle a_k|\psi\rangle$

$$P_j |\psi\rangle = \prod_{i\neq j} \frac{(A - a_i)}{(a_j - a_i)} \sum_k |a_k\rangle \langle a_k|\psi\rangle = \sum_k \prod_{i\neq j} \frac{(a_k - a_i)}{(a_j - a_i)} |a_k\rangle \langle a_k|\psi\rangle$$

cada productoria es no nula sólamente si $k = j$, pues en este caso no hay factor nulo pue el caso i_j está excluido. El valor de esta productoria es es 1. Por consiguiente:

$$P_j |\psi\rangle = |a_j\rangle \langle a_j|\psi\rangle$$

que es la proyección de $|\psi\rangle$ sobre el autoestado $|a\rangle_j$, de autovalor a_j. Podemos aplicar nuevamente P_j y obtendremos lo mismo por lo que $P_j^2 = P_j$.

Caso de dimensión 2: spin1/2 En lugar de usar $\boldsymbol{S} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}$ con autovalores $\pm\frac{\hbar}{2}$ usaremos el operador $A = \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}$ con autovalores ± 1, y con los mismos autovectores que $\boldsymbol{S} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}$.

$$P_+ = \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}} - (-1))}{(+1 - (-1))} = \frac{1}{2}(\mathbb{I} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}})$$

del mismo modo:

$$P_- = \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}} - (+1))}{(-1 - (+1))} = \frac{1}{2}(\mathbb{I} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}})$$

por lo que:

$$\boxed{P_\pm = \frac{1}{2}(\mathbb{I} \pm \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}})}$$

(e) Aplicaremos el proyector $P_\pm$ a un vector cualquiera, si el vector resultante es no nulo entonces obtenemos un vector paralelo a $|\pm, \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}\rangle$, faltando sólo normalizarlo.

Necesitaremos calcula (usamos la base de autoestados de S_z):

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}} |+\rangle =$$
$$(n_x\sigma_x + n_y\sigma_y + n_z\sigma_z) |+\rangle = (n_x + in_y) |-\rangle + n_z |+\rangle$$

usando esto en la obtenemos:

$$P_\pm |+\rangle = \frac{1}{2}(\mathbb{I} \pm \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}) |+\rangle = \frac{1}{2} ((1 \pm n_z) |+\rangle \pm (n_x + in_y))$$

Usando la parametrización del Problema de la Guía 1:

$$1 + n_z = 1 + \cos\beta = 2\cos^2(\beta/2)$$
$$1 - n_z = 1 - \cos\beta = 2\sin^2(\beta/2)$$
$$n_x + in_y = \sin\beta e^{i\alpha} = 2\sin(\beta/2)\cos(\beta/2)e^{i\alpha}$$

por lo que los estados normalizados son:

$$\boxed{|+, \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}\rangle = \cos(\beta/2) |+\rangle + \sin(\beta/2)e^{i\alpha} |-\rangle}$$

$$\boxed{|-, \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{n}}\rangle = \sin(\beta/2) |+\rangle - \cos(\beta/2)e^{i\alpha} |-\rangle}$$

4. Problema 3(I)

Considere un espacio de Hilbert de dimensión 3 y sea $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ una base ortonormal. Para cada uno de los siguientes operadores

(I) $M_1 = 2\,|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| + 2i\,|2\rangle\langle 3| - 2i\,|3\rangle\langle 2| + 4\,|3\rangle\langle 3|$,

(II) $M_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$, en la base $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$,

(III) $M_3\,|1\rangle = |1\rangle - 2i\,|3\rangle$, $M_3\,|2\rangle = |2\rangle$, $M_3\,|3\rangle = 2i\,|1\rangle + |3\rangle$;

(a) determine si el operador es hermítico.

(b) escriba la descomposición del operador como combinación lineal de operadores $\{|i\rangle\langle j|\}_{i,j=1,2,3}$.

(c) obtenga la representación matricial del operador en la base $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$.

(d) escriba la acción del operador sobre cada elemento de la base $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$.

(e) obtenga la descomposición espectral del operador.

(I) (a) $M_1^\dagger = 2\,|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| - 2i\,|3\rangle\langle 2| + 2i\,|2\rangle\langle 3| + 4\,|3\rangle\langle 3| = M_1$, es hermítico.

(b)

(c)

$$M_1 = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2i \\ 0 & -2i & 4 \end{pmatrix}$$

(d)

$$M_1\,|1\rangle = 2\,|1\rangle \qquad M_1\,|2\rangle = |2\rangle - 2i\,|3\rangle \qquad M_1\,|3\rangle = 2i\,|2\rangle + 4\,|3\rangle$$

los resultados son los vectores columnas de la matriz del operador.

(e) Para hallar la descomposición espectral necesitamos hallar la base que diagonaliza el operador M_1. Vemos que la matriz de M_1 es diagonal por bloques, y que $|v_1\rangle = |1\rangle$ es autovector con autovalor $\lambda_1 = 2$. Falta determinar los autovalores y autovectores en un subespacio generado por$\{|2\rangle, |3\rangle\}$. La matriz en dicho subespacio es:

$$N = \begin{pmatrix} 1 & 2i \\ -2i & 4 \end{pmatrix}$$

La ecuación de autovalores $|N - \lambda\mathbb{I}| = 0$ nos da $\lambda_2 = 0$ y $\lambda_3 = 5$. Los correspondientes autovectores normalizados son: $|v_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}(2\,|2\rangle +$

$i\,|3\rangle)$ y $|v_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}(|2\rangle - 2i\,|3\rangle)$. Observamos que los autovectores forman una base ortonormal.
Luego la descomposición espectral de M_1 es:

$$\begin{aligned} M_1 &= \sum_j \lambda_j \,|v_j\rangle\!\langle v_j| \\ &= 2\,|v_1\rangle\!\langle v_1| + 5\,|v_3\rangle\!\langle v_3| \end{aligned}$$

Si se expande cada autovector en la base original, se obtiene la matriz del ítem (c).