Clase 3 - Martes 24/08/2021

La clase pasada vimos:

- Base de funciones de cuadrado no integrable:
    - Base de ondas planas
    - Deltas de Dirac en posición
    - Base mixta y notación general para bases contínuas
- Espacio de estados y vector de estado
- Notación de Dirac: ket y bra

En esta clase veremos:

- Notación de Dirac: el ket
- Producto escalar de kets, el bra
- Operadores lineales: elemento de matriz
- Proyectores
- Conjugación hermítica
- Operadores hermíticos o autoadjuntos

Bases de “estados” que no pertenecen a L^2

$$v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{ipx/\hbar}$$

REPASO

$\{v_p(x)\}$ es una “base” pero:

(1) No es de cuadrado integrable

(2) Indice p es contínuo, $-\infty < p < \infty$

Paralelismo entre una base “contínua” y una discreta

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp\ \bar{\psi}(p)\ v_p(x) \longleftrightarrow \psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i\, u_i(\mathbf{r})$$

$$\bar{\psi}(p) \longleftrightarrow c_i$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp \longleftrightarrow \sum_i$$

Base de deltas de Dirac en la posición

$$\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$$

Paralelismo entre la base de deltas y una base discreta:

$$\{ \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) \} \longleftrightarrow \{ u_i(\mathbf{r}) \}$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3r_0 \ \psi(\mathbf{r}_0) \ \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) \longleftrightarrow \psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i \, u_i(\mathbf{r})$$

$$\psi(\mathbf{r}_0) \longleftrightarrow c_i.$$

$$\int d^3r_0 \longleftrightarrow \sum_i$$

Espacio de estados

REPASO

$$
\begin{tikzcd}
 & c(\alpha) \arrow[d, leftrightarrow] & \\
\bar{\psi}(\mathbf{p}) \arrow[r, leftrightarrow] & \boxed{|\psi\rangle} \arrow[r, leftrightarrow] \arrow[d, leftrightarrow] & c_i,\ i = 1, 2, \ldots, n, \ldots \\
 & \psi(\mathbf{r}_0) &
\end{tikzcd}
$$

Espacio de estados

REPASO

$$|\psi\rangle$$ es el **vector de estado** de la partícula

$$|\psi\rangle \in \mathcal{E}_{\mathbf{r}}$$ **Espacio de estados** de la partícula en el espacio de 3 dimensiones

Nos permitirá generalizar: $$|\psi\rangle \in \mathcal{E}$$

Notación de Dirac

$$|\psi\rangle \in \mathcal{E}_{\mathbf{r}}$$

Espacio de estados de una partícula en el espacio de 3 dimensiones

$$\psi(\mathbf{r}) \in \mathscr{F} \iff |\psi\rangle \in \mathscr{E}_{\mathbf{r}}$$

Ejemplo: $$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) \iff |\psi_{nlm}\rangle = |nlm\rangle$$

Autoestados del Hamiltoniano
del átomo de hidrógeno

Otro ejemplo de espacio de Hilbert: $\mathscr{E}_{\mathbf{x}}: \; |\psi\rangle \iff \psi(x)$

Producto escalar de kets

Producto escalar de dos kets $(|\varphi\rangle, |\psi\rangle)$ $\longrightarrow$ Número complejo

¿Qué numero complejo le asignamos?

Para los kets $|\psi\rangle \in \mathscr{E}_{\mathbf{r}}$ podemos recurrir a la definición de producto escalar

de las funciones de onda: $(|\varphi\rangle, |\psi\rangle) = (\varphi, \psi) = \int d^3r\, \varphi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$

Producto escalar y el "bra":

$$(|\varphi\rangle, |\psi\rangle) = (\varphi, \psi) = \int d^3r\, \varphi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$$

El producto escalar nos permite definir una **funcional lineal** :

$$|\psi\rangle \xrightarrow{\varphi} \text{número complejo}$$

a partir de cada ket $|\varphi\rangle$, por medio del producto escalar:

$$\varphi(|\psi\rangle) = (|\varphi\rangle, |\psi\rangle) \in \mathbb{C}$$

La llamamos $\langle\varphi|$ ("bra") y entonces escribimos:

$$\varphi(|\psi\rangle) = \langle\varphi|\psi\rangle$$

$$\boxed{\langle\varphi|\psi\rangle = (|\varphi\rangle, |\psi\rangle)}$$

"bra - ket"

Producto escalar y el “bra”:

$$(|\varphi\rangle, |\psi\rangle) = (\varphi, \psi) = \int d^3r\, \varphi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$$

$$\langle\varphi| \in \mathcal{E}^* \text{ , donde } \mathcal{E}^* \text{ es el espacio dual de } \mathcal{E}$$

Las propiedades del producto escalar se transfieren al bra.

La antilinealidad de $(|\varphi\rangle, |\psi\rangle)$ en el primer argumento implica que:

$$\lambda_1|\varphi_1\rangle + \lambda_2|\varphi_2\rangle \longrightarrow \lambda_1^*\langle\varphi_1| + \lambda_2^*\langle\varphi_2|$$

$$\text{La correspondencia ket } \longrightarrow \text{ bra es antilineal}$$

Notación de Dirac

El producto escalar de los kets satisface propiedades idénticas a las que satisfacían las funciones de onda:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \langle \psi | \varphi \rangle^*$$
$$\langle \varphi | \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \rangle = \lambda_1 \langle \varphi | \psi_1 \rangle + \lambda_2 \langle \varphi | \psi_2 \rangle$$
$$\langle \lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2 | \psi \rangle = \lambda_1^* \langle \varphi_1 | \psi \rangle + \lambda_2^* \langle \varphi_2 | \psi \rangle$$
$$\langle \psi | \psi \rangle \text{ real, positive; zero if and only if } | \psi \rangle = 0$$

$$(\varphi, \psi) = (\psi, \varphi)^*$$
$$(\varphi, \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2) = \lambda_1(\varphi, \psi_1) + \lambda_2(\varphi, \psi_2)$$
$$(\lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2, \psi) = \lambda_1^*(\varphi_1, \psi) + \lambda_2^*(\varphi_2, \psi)$$

Kets y bras

B. STATE SPACE. DIRAC NOTATION

1. Introduction
2. "Ket" vectors and "bra" vectors

   a. Elements of $\mathscr{E}$: kets

   b. Elements of the dual space $\mathscr{E}^*$ of $\mathscr{E}$: bras

   c. Correspondence between kets and bras

Operadores Lineales en el espacio de estados

Operadores Lineales en notación de Dirac

$$| \psi \rangle \in \mathscr{E} \xrightarrow{A} | \psi' \rangle \in \mathscr{E}$$

$$| \psi' \rangle = A | \psi \rangle$$

Linealidad: $A(\lambda_1 | \psi_1 \rangle + \lambda_2 | \psi_2 \rangle) = \lambda_1 A | \psi_1 \rangle + \lambda_2 A | \psi_2 \rangle$

Producto de operadores: $(AB) | \psi \rangle = A(B | \psi \rangle)$

Conmutador: $[A, B] = AB - BA$

Operadores Lineales en notación de Dirac

Dados dos kets: $|\varphi\rangle, |\psi\rangle$

El **elemento de matriz** del operador *A* entre ellos es:

$$\langle \varphi | (A | \psi \rangle)$$

Es un número complejo que depende linealmente de $|\psi\rangle$ y antilinealmente de $|\varphi\rangle$

Con funciones de onda escribíamos:

$$\int d^3r\, \varphi^*(\mathbf{r}) \hat{A}\, \psi^*(\mathbf{r})$$

Ejemplo básico de operador

Vimos: $\langle\varphi|\psi\rangle = (|\varphi\rangle, |\psi\rangle) \in \mathbb{C}$

En cambio, $|\psi\rangle\langle\varphi|$ es un operador.

Para verificarlo, apliquémoslo a otro ket: $|\chi\rangle$

$$|\psi\rangle\langle\varphi|\chi\rangle = \langle\varphi|\chi\rangle|\psi\rangle$$ es un ket

Vemos que el orden de kets, bras y operadores tiene significado en la notación de Dirac.

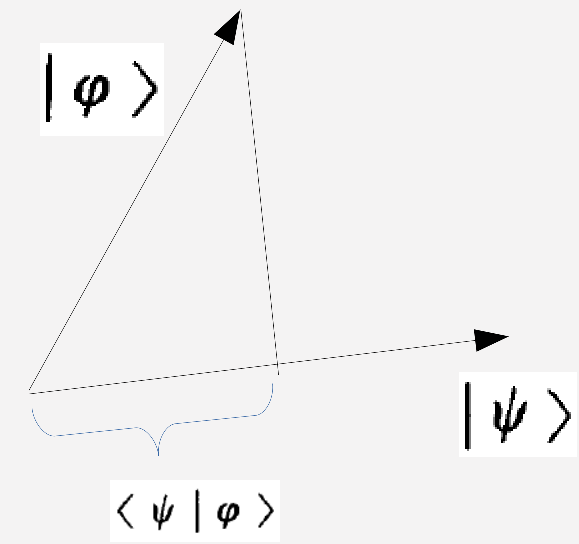
Operador proyector

Sea: $|\psi\rangle$ con: $\langle\psi|\psi\rangle = 1$

¿Cómo actúa: $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$

$$\Rightarrow \quad P_\psi|\varphi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle$$

// $|\psi\rangle$



Notar que: $P_\psi^2 = P_\psi P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|\psi\rangle\langle\psi| = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi$

Es un **proyector**

Proyector sobre un subespacio

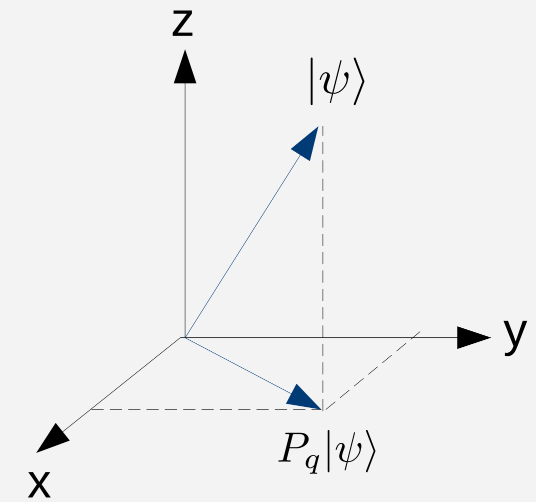
Sea un conjunto de kets normalizados: $|\varphi_1\rangle, |\varphi_2\rangle, \ldots, |\varphi_q\rangle$

Ortogonales entre sí: $\langle\varphi_i|\varphi_j\rangle = \delta_{ij}$

Esos estados generan un subespacio: $\mathscr{E}_q$

Consideramos: $P_q = \sum_{i=1}^{q} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$

$$\Rightarrow \quad P_q|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{q} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|\psi\rangle$$



Se puede verificar que: $P_q^2 = P_q$ (hacerlo usando la ortonormalidad)

Conjugación hermítica

Operador aplicado a un bra

Hasta ahora vimos: $A|\psi\rangle \longrightarrow \text{da un ket}$

También podemos definir la acción de A sobre un bra: $\langle\varphi|\ A$

Nos da **un nuevo bra**, que actúa sobre un ket arbitrario así:

$$(\langle\varphi|A)|\psi\rangle = \langle\varphi|(A|\psi\rangle)$$

Es el elemento de matriz de A entre los dos estados, lo escribimos obviando el parentesis:

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = (\langle\varphi|A)|\psi\rangle = \langle\varphi|(A|\psi\rangle)$$

Operador aplicado a un bra: linealidad

Sea $\langle \chi | = \lambda_1 \langle \varphi_1 | + \lambda_2 \langle \varphi_2 |$ Combinación lineal de bras

Actúa sobre un ket así: $\langle \chi | \psi \rangle = \lambda_1 \langle \varphi_1 | \psi \rangle + \lambda_2 \langle \varphi_2 | \psi \rangle$

$$
\begin{aligned}
(\langle \chi | A) | \psi \rangle &= \langle \chi | (A | \psi \rangle) \\
&= \lambda_1 \langle \varphi_1 | (A | \psi \rangle) + \lambda_2 \langle \varphi_2 | (A | \psi \rangle) \\
&= \lambda_1 (\langle \varphi_1 | A) | \psi \rangle + \lambda_2 (\langle \varphi_2 | A) | \psi \rangle
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\Rightarrow \quad \langle \chi | A &= (\lambda_1 \langle \varphi_1 | + \lambda_2 \langle \varphi_2 |) A \\
&= \lambda_1 \langle \varphi_1 | A + \lambda_2 \langle \varphi_2 | A
\end{aligned}
$$

Respeta linealidad

Conjugación hermítica

Operador aplicado a un bra: el orden es importante

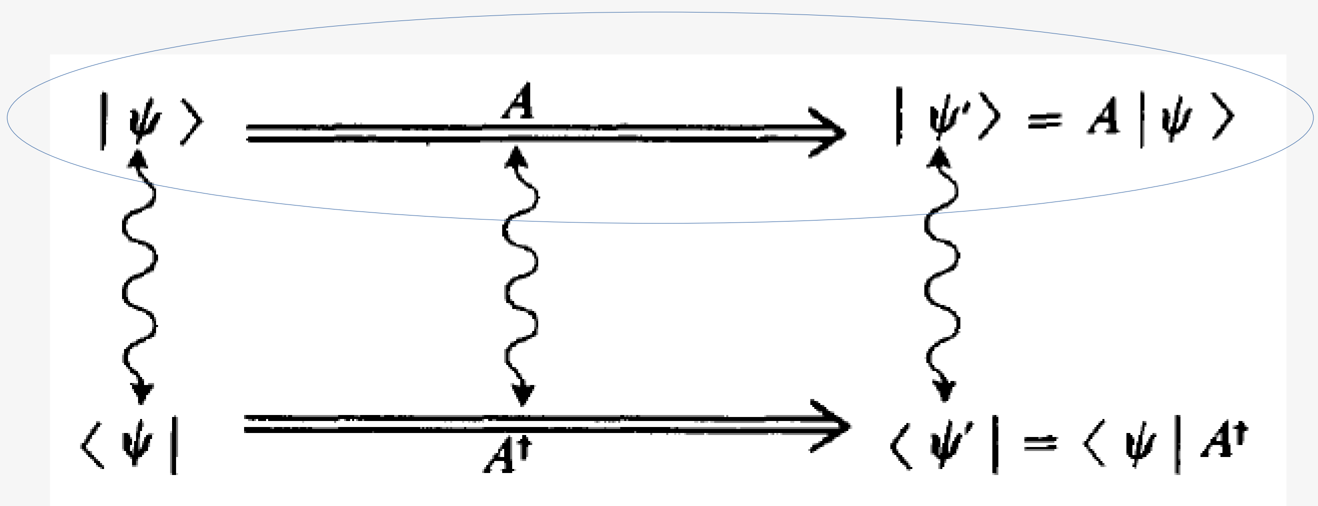
$$\langle \varphi | A \neq A \langle \varphi |$$

$$\left.\begin{matrix} \langle \varphi | A \\ A \langle \varphi | \end{matrix}\right\} | \psi \rangle \left\{\begin{matrix} \langle \varphi | A | \psi \rangle & \quad \text{número} \\ A \langle \varphi | \psi \rangle & \quad \text{operador} \end{matrix}\right.$$

Conjugación hermítica

Operador adjunto

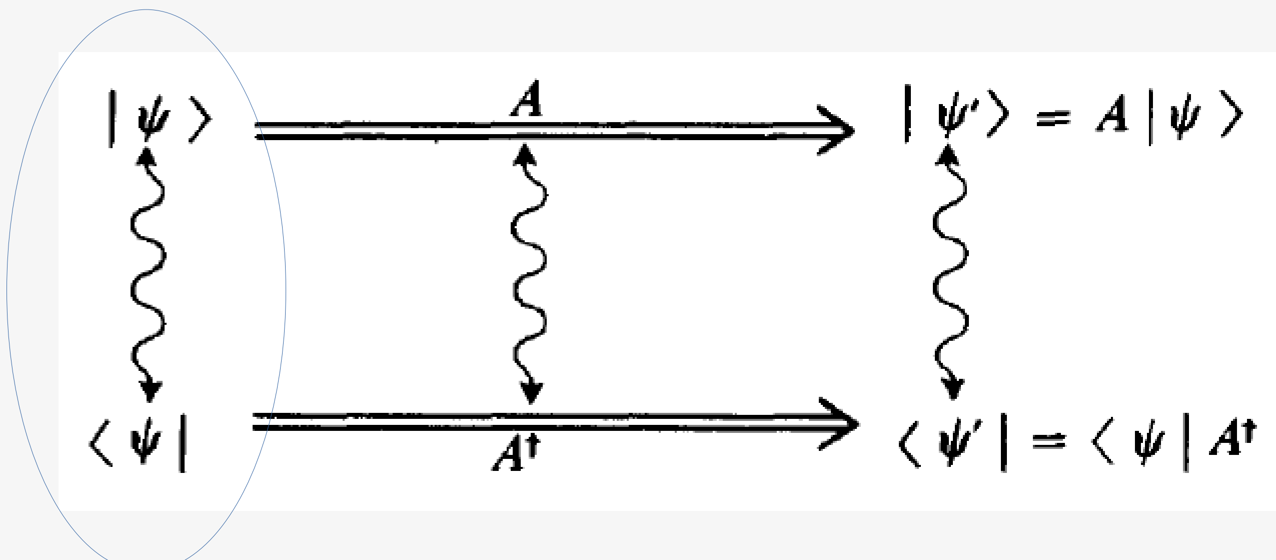
$$\boxed{A \longrightarrow A^\dagger}$$



Conjugación hermítica

Operador adjunto

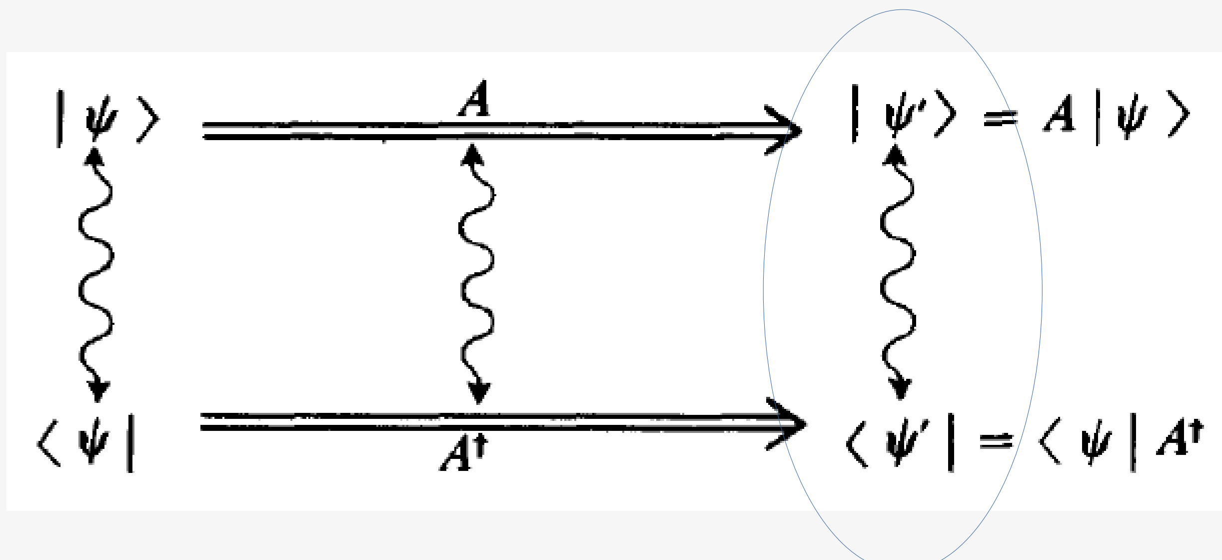
$$\boxed{A \longrightarrow A^\dagger}$$



Conjugación hermítica

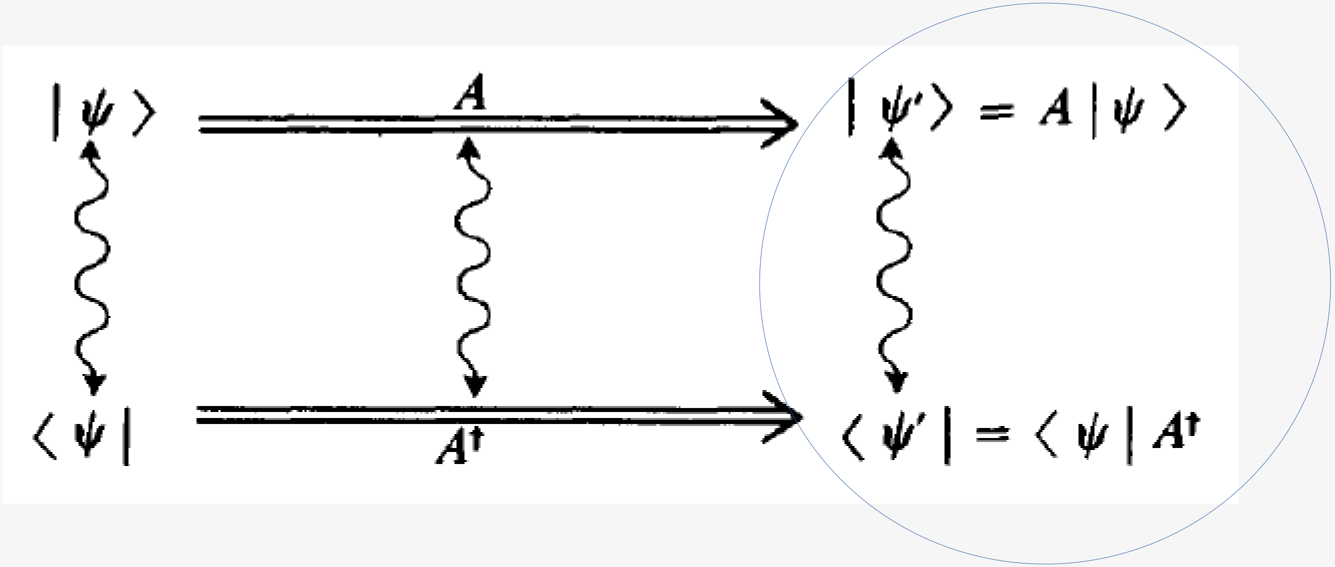
Operador adjunto

$$\boxed{A \longrightarrow A^\dagger}$$



Operador adjunto

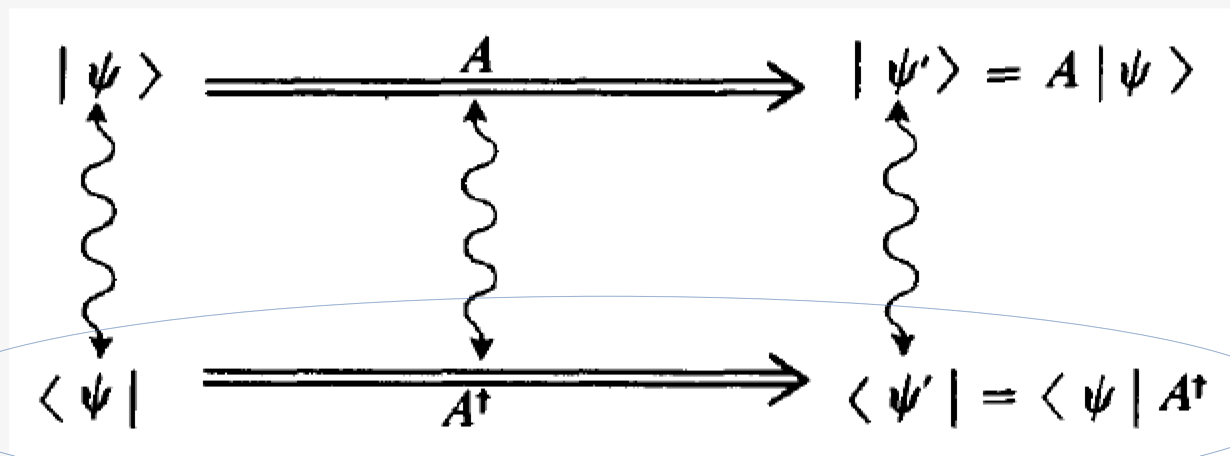
$$\boxed{A \longrightarrow A^\dagger}$$



Conjugación hermítica

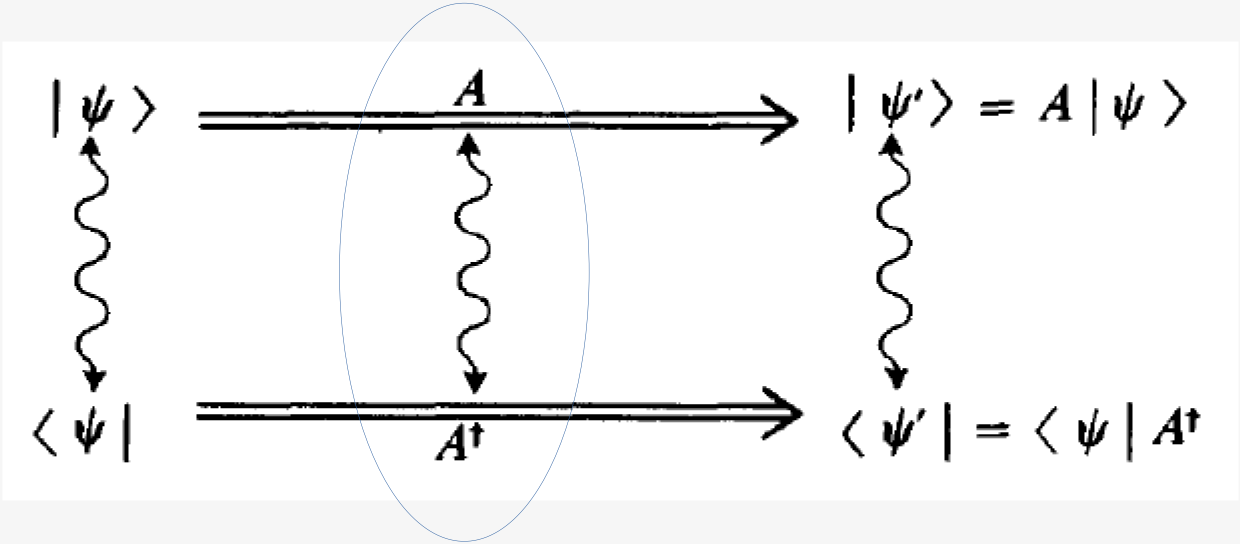
Operador adjunto

$$\boxed{A \longrightarrow A^\dagger}$$



Operador adjunto

$$\boxed{A \longrightarrow A^\dagger}$$



Conjugación hermítica

$$\left| \psi' \right\rangle = A \left| \psi \right\rangle \Longleftrightarrow \left\langle \psi' \right| = \left\langle \psi \right| A^\dagger$$

Operador adjunto

Linealidad

$$\lambda_1 \left\langle \psi_1 \right| + \lambda_2 \left\langle \psi_2 \right|$$

Combinación lineal de bras

$$\lambda_1^* \left| \psi_1 \right\rangle + \lambda_2^* \left| \psi_2 \right\rangle$$

Ket correspondiente

$$\lambda_1^* A \left| \psi_1 \right\rangle + \lambda_2^* A \left| \psi_2 \right\rangle = \lambda_1^* \left| \psi'_1 \right\rangle + \lambda_2^* \left| \psi'_2 \right\rangle$$

Acción de A sobre el ket

$$\downarrow$$

$$\lambda_1 \left\langle \psi'_1 \right| + \lambda_2 \left\langle \psi'_2 \right| = \lambda_1 \left\langle \psi_1 \right| A^\dagger + \lambda_2 \left\langle \psi_2 \right| A^\dagger$$

$$(\lambda_1 \left\langle \psi_1 \right| + \lambda_2 \left\langle \psi_2 \right|) A^\dagger = \lambda_1 \left\langle \psi_1 \right| A^\dagger + \lambda_2 \left\langle \psi_2 \right| A^\dagger$$

Conjugación hermítica

$$\boxed{|\psi'\rangle = A|\psi\rangle \Longleftrightarrow \langle\psi'| = \langle\psi|A^\dagger}$$

Operador adjunto

- $A^\dagger$ es lineal

$$(\lambda_1\langle\psi_1| + \lambda_2\langle\psi_2|)A^\dagger = \lambda_1\langle\psi_1|A^\dagger + \lambda_2\langle\psi_2|A^\dagger$$

- Elementos de matriz

$$\left.\begin{array}{r} \langle\psi'|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi'\rangle^* \\ |\psi'\rangle = A|\psi\rangle \\ \langle\psi'| = \langle\psi|A^\dagger \end{array}\right\} \Longrightarrow \langle\psi|A^\dagger|\varphi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle^*$$

Propiedades del operador adjunto

$$(A^\dagger)^\dagger = A$$

$$(\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger$$

$$(A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$$

Demostrarlas

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

notar el cambio de orden

$$(|u\rangle\langle v|)^\dagger = |v\rangle\langle u|$$

Usando

$$|\psi'\rangle = A|\psi\rangle \Longleftrightarrow \langle\psi'| = \langle\psi|A^\dagger$$

$$\langle\psi|A^\dagger|\varphi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle^*$$

Conjugación hermítica en la notación de Dirac

$$A \longrightarrow A^\dagger$$

$$|\psi\rangle \longrightarrow \langle\psi|$$

$$\lambda \longrightarrow \lambda^*$$

$$\text{invertir orden}$$

Ejemplo

$$\lambda \langle u | A | v \rangle | w \rangle \langle \psi | \longleftrightarrow | \psi \rangle \langle w | \langle v | A^\dagger | u \rangle \lambda^*$$

$$\lambda | u \rangle \langle v | w \rangle \longleftrightarrow \langle w | v \rangle \langle u | \lambda^*$$

Operadores hermíticos o autoadjuntos

$$A = A^{\dagger}$$

Los operadores hermíticos juegan un rol fundamental en la mecánica cuántica porque representan a las cantidades físicas

$$\langle \psi | A | \varphi \rangle = \langle \varphi | A | \psi \rangle^{*}$$

$$P_{\psi}^{\dagger} = | \psi \rangle \langle \psi | = P_{\psi}$$

The product of two Hermitian operators A and B is Hermitian only if $[A, B] = 0$. Indeed, if $A = A^{\dagger}$ and $B = B^{\dagger}$, it can be shown using (B-55) that $(AB)^{\dagger} = B^{\dagger}A^{\dagger} = BA$, which is equal to AB only if $[A, B] = 0$.

Resumen de la Clase 3

En esta clase vimos:

- Notación de Dirac: el ket
- Producto escalar de kets, el bra
- Operadores lineales: elemento de matriz
- Proyectores
- Conjugación hermítica
- Operadores hermíticos o autoadjuntos