Clase 4 - Viernes 27/08/2021

La clase pasada vimos:

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

En esta clase veremos:

- Representaciones en el espacio de estados
- Kets, bras, operadores
- Cambio de representación
- Ecuación de autovalores
- Cálculo de autovalores y autovectores
- Ejemplo:sistema 2x2

Espacio de estados y notación de Dirac

REPASO

"bra - ket" $\langle\varphi|\psi\rangle = (|\varphi\rangle, |\psi\rangle)$

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

Proyector: $P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ $\qquad P_q = \sum_{i=1}^{q} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$

Elemento de matriz: $\langle\varphi|A|\psi\rangle = (\langle\varphi|A)|\psi\rangle = \langle\varphi|(A|\psi\rangle)$

Operador adjunto:

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

REPASO

Conjugación hermítica en la notación de Dirac

$$A \longrightarrow A^\dagger$$

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

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

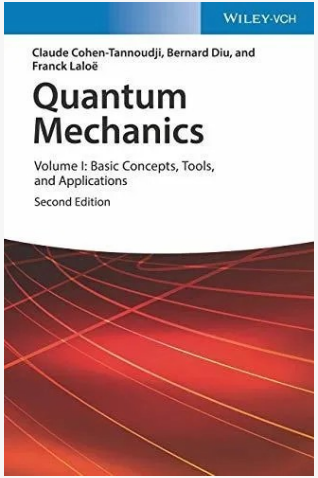
$$\text{invertir orden}$$

Representaciones en el espacio de estados

OUTLINE OF CHAPTER II

C. REPRESENTATIONS IN THE STATE SPACE

1. Introduction
   - *a.* Definition of a representation
   - *b.* Aim of § C
2. Relations characteristic of an orthonormal basis
   - *a.* Orthonormalization relation
   - *b.* Closure relation
3. Representation of kets and bras
   - *a.* Representation of kets
   - *b.* Representation of bras
4. Representation of operators
   - *a.* Representation of A by a "square" matrix
   - *b.* Matrix representation of the ket $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$
   - *c.* Expression for the number $\langle\varphi|A|\psi\rangle$
   - *d.* Matrix representation of the adjoint $A^\dagger$ of A
5. Change of representations
   - *a.* Statement of the problem
   - *b.* Transformation of the components of a ket
   - *c.* Transformation of the components of a bra
   - *d.* Transformation of the matrix elements of an operator



Representaciones en el espacio de estados

Elegir una base

Representación $\longleftrightarrow$ base ortonormal de $\mathcal{E}$

$$|\psi\rangle \to \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_n \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle u_n|\psi\rangle \end{bmatrix} \qquad \hat{A} \to \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & & \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \langle u_1|A|u_1\rangle & \langle u_1|A|u_2\rangle & \cdots \\ \langle u_2|A|u_1\rangle & \langle u_2|A|u_2\rangle & \cdots \\ \vdots & & \end{bmatrix}$$

La base satisface: ortonormalidad y clausura:

Representación discreta $\{|u_i\rangle\}$ | Continua $\{|w_\alpha\rangle\}$

$$\langle u_i|u_j\rangle = \delta_{ij} \qquad \langle w_\alpha|w_{\alpha'}\rangle = \delta(\alpha-\alpha')$$

$$\sum_i |u_i\rangle\langle u_i| = \mathbb{1} \qquad \int d\alpha\, |w_\alpha\rangle\langle w_\alpha| = \mathbb{1}$$

Representaciones en el espacio de estados

Con la relación de clausura se expande fácilmente:

$$|\psi\rangle = \mathbb{1}\,|\psi\rangle = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle$$

discreto

$$= \sum_i c_i\,|u_i\rangle$$

$$|\psi\rangle = \int d\alpha\; \underbrace{c(\alpha)}_{\to\ \langle w_\alpha|\psi\rangle}\,|w_\alpha\rangle$$

continuo

Representaciones en el espacio de estados

Representación de bras:

$$\langle \psi | = \langle \psi | \mathbb{1} = \langle \psi | \sum_i |u_i\rangle\langle u_i|$$

$$= \sum_i \langle \psi | u_i \rangle \langle u_i |$$

$$= \sum_i c_i^* \langle u_i |$$

Representaciones en el espacio de estados

Para hacer el producto escalar $\langle\varphi|\psi\rangle$ disponemos:

$$\begin{pmatrix} \langle\varphi|u_1\rangle & \langle\varphi|u_2\rangle & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

matriz fila y matriz columna

$$= \sum_i \langle\varphi|u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle = \langle\varphi|\overbrace{\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|}^{\mathbb{1}}|\psi\rangle$$

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

ir así, de atrás para adelante

Representaciones en el espacio de estados

Operadores: matrices cuadradas

$$\langle u_i | A | u_j \rangle = A_{ij} \qquad \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & \\ \vdots & & & \end{pmatrix}$$

- Elemento de matriz de AB

$$(AB)_{ij} = \langle u_i | AB | u_j \rangle = \langle u_i | A \sum_k | u_k \rangle\langle u_k | B | u_j \rangle$$

$$= \sum_k \langle u_i | A | u_k \rangle \langle u_k | B | u_j \rangle = \sum_k A_{ik} B_{kj}$$

Elemento de matriz de un operador

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i \, |u_i\rangle$$

$$|\varphi\rangle = \sum_i b_i \, |u_i\rangle$$

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle = \langle\varphi| \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| A \sum_j |u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle$$

$$= \sum_{ij} b_i^* \, A_{ij} \, c_j$$

$$= \begin{pmatrix} b_1^* & b_2^* & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & \\ \vdots & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Representaciones en el espacio de estados

$$\text{Aplicar A a } |\psi\rangle \quad : \quad |\psi'\rangle = A|\psi\rangle$$

$$|\psi\rangle = \sum_j c_j |u_j\rangle \qquad\qquad |\psi'\rangle = \sum_i c'_i |u_i\rangle$$

$$c'_i = \langle u_i|\psi'\rangle = \langle u_i|A|\psi\rangle = \langle u_i|A \sum_j c_j |u_j\rangle = \sum_j c_j \langle u_i|A|u_j\rangle$$

$$c'_i = \sum_j A_{ij} c_j \quad \longleftrightarrow \quad |\psi'\rangle = A|\psi\rangle$$

Representaciones en el espacio de estados

Operadores

$$A = \sum_i |u_i\rangle\langle u_i| A \sum_j |u_j\rangle\langle u_j|$$

$$= \sum_{ij} \langle u_i|A|u_j\rangle \; |u_i\rangle\langle u_j| = \sum_{ij} A_{ij} \; |u_i\rangle\langle u_j|$$

Representaciones en el espacio de estados

Notar:

$$|\psi\rangle\langle\psi| = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* & c_3^* & \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 c_1^* & c_1 c_2^* & c_1 c_3^* & \cdots \\ c_2 c_1^* & c_2 c_2^* & \cdots & \\ \cdots & & & \end{pmatrix}$$

operador

$$|u_i\rangle\langle u_j| = \begin{array}{cc} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & & & \\ 0 & 0 & 1 & \\ \vdots & & & \end{pmatrix} & \begin{array}{c} \\ \\ \leftarrow i \\ \\ \end{array} \\ \begin{array}{cccc} & & \uparrow & \\ & & j & \end{array} & \end{array}$$

Representaciones en el espacio de estados

Operador adjunto : elemento de matriz

$$(A^{+})_{ij} = \langle u_i | A^{+} | u_j \rangle = \langle u_j | A | u_i \rangle^{*} = A^{*}_{ji}$$

Operador Hermítico : $A^{+} = A$

$$A^{*}_{ji} = (A^{+})_{ij} = A_{ij} \Rightarrow A_{ij} = A^{*}_{ji}$$

Notar : $A^{*}_{ii} = A_{ii} \Rightarrow A_{ii} \in \mathbb{R}$

Cambio de representación

Sean bases $\{|u_i>\}$ y $\{|t_k>\}$

$$\begin{cases} S_{ik} = \langle u_i | t_k \rangle \\ \langle t_k | u_i \rangle = S^*_{ik} = (S^\dagger)_{ki} \end{cases}$$

Expandimos $|\psi\rangle$ en las dos bases:

$$|\psi\rangle = \Big(\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\Big)|\psi\rangle = \sum_i \langle u_i|\psi\rangle\,|u_i\rangle$$

$$|\psi\rangle = \Big(\sum_k |t_k\rangle\langle t_k|\Big)|\psi\rangle = \sum_k \langle t_k|\psi\rangle\,|t_k\rangle$$

Cómo se relacionan $<u_i|\psi>$ con $<t_k|\psi>$?

Representaciones en el espacio de estados

Cómo se relacionan $\langle u_i | \psi \rangle$ con $\langle t_k | \psi \rangle$?

$$\langle u_i | \psi \rangle = \langle u_i | \sum_k |t_k\rangle\langle t_k| \, |\psi\rangle$$

$$= \sum_k \langle u_i | t_k \rangle \langle t_k | \psi \rangle$$

$$= \sum_k S_{ik} \langle t_k | \psi \rangle$$

$$S_{ik} = \langle u_i | t_k \rangle$$

$$\langle t_k | u_i \rangle = S_{ik}^* = (S^\dagger)_{ki}$$

Representaciones en el espacio de estados

Y la transformación inversa:

$$\langle t_k|\psi\rangle = \langle t_k|\,\mathbb{1}\,|\psi\rangle =$$

$$= \langle t_k|\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\;|\psi\rangle$$

$$= \sum_i \langle t_k|u_i\rangle\,\langle u_i|\psi\rangle$$

$$= \sum_i (S^{\dagger})_{ki}\langle u_i|\psi\rangle$$

$$S_{ik} = \langle u_i|t_k\rangle$$

$$\langle t_k|u_i\rangle = S^*_{ik} = (S^{\dagger})_{ki}$$

Representaciones en el espacio de estados

S es una matriz unitaria:

$$S^{\dagger} S = S S^{\dagger} = \mathbb{I}$$

Es decir: $S^{\dagger} = S^{-1}$

Verificarlo:

$$(S^{\dagger} S)_{k\ell} = \sum_i S^{\dagger}_{ki} S_{i\ell} = \sum_i S^*_{ik} S_{i\ell} = \sum_i \langle u_i | t_k \rangle^* \langle u_i | t_\ell \rangle =$$

$$= \sum_i \langle t_k | u_i \rangle \langle u_i | t_\ell \rangle$$

$$= \langle t_k | t_\ell \rangle$$

$$= \delta_{k\ell}$$

Representaciones en el espacio de estados

Transformación de elementos de matriz de un operador

$$\langle t_k | A | t_l \rangle \overset{?}{\longleftrightarrow} \langle u_i | A | u_j \rangle$$

Demostrar:

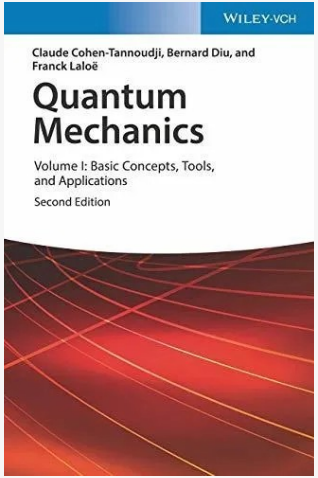
$$A_{kl} = \sum_{i,j} S^{+}_{ki} A_{ij} S_{jl}$$

$$A_{ij} = \sum_{k,l} S_{ik} A_{kl} S^{+}_{lj}$$

Ecuación de autovalores

Ecuación de autovalores

OUTLINE OF CHAPTER II



Ecuación de autovalores

Def.: $|\psi\rangle$ es autovector del operador A con autovalor λ si:

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$ Ec. de autovalores

↳ todos los λ : $\{\lambda\}$ = espectro de A

λ → no degenerado : autovector único (a menos de un factor)

λ → degenerado : $|\psi^i\rangle$, $i = 1, \ldots, g$

↳ g grado o orden de la degeneración

$\{|\psi^i\rangle\}$ son l.i.

$$A|\psi^i\rangle = \lambda|\psi^i\rangle$$

Ecuación de autovalores

Notar: en caso degenerado:

si $|\varphi\rangle = \sum_{i=1}^{g} c_i |\psi^i\rangle \Rightarrow A|\varphi\rangle = \sum c_i A|\psi^i\rangle$

$$= \lambda \sum c_i |\psi^i\rangle$$

$$= \lambda |\varphi\rangle$$

Tenemos un $\mathcal{E}_\lambda$ = auto-subespacio

Ecuación de autovalores

Ejemplo : $A = |\psi\rangle\langle\psi| = P_\psi$ (proyector sobre $|\psi\rangle$)

si $\quad P_\psi |\varphi\rangle = \lambda |\varphi\rangle$

$$= |\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle\, |\psi\rangle$$

si $|\varphi\rangle = |\psi\rangle \Rightarrow |\varphi\rangle$ es autovector con $\lambda = 1$

si $|\varphi\rangle \perp |\psi\rangle$ $\left(\langle\varphi|\psi\rangle = 0\right) \Rightarrow |\varphi\rangle$ autovector con $\lambda = 0$

si $\langle\varphi|\psi\rangle \neq 0, 1 \Rightarrow$ no es autovector

Ecuación de autovalores

Cálculo de autovalores y autovectores

Sea operador A.

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \implies \langle u_i|A|\psi\rangle = \lambda\langle u_i|\psi\rangle$$

$$\implies \langle u_i|A\sum_j |u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle = \lambda\langle u_i|\psi\rangle$$

$$\sum_j \langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle = \lambda\langle u_i|\psi\rangle$$

$$\iff \sum_j A_{ij}\, c_j = \lambda\, c_i \qquad \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots \\ \vdots & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \lambda\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\implies \sum_j \left(A_{ij} - \lambda\delta_{ij}\right) c_j = 0$$

Ecuación de autovalores

Tiene solución $\Longleftrightarrow$ $\det(A - \lambda I) = 0$

matriz de $N \times N$

N: tamaño de la base

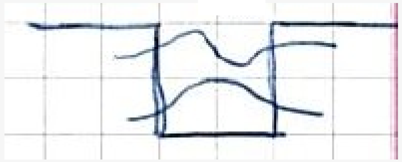
$\Rightarrow$ Polinomio característico en λ de orden N $\Rightarrow$ N raíces, complejas en general.

λ → raíces simples
λ → raíces múltiples

Ecuación de autovalores

Ejemplo

Sea $H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$



$$H_0 |\varphi_i\rangle = E_i |\varphi_i\rangle \qquad i = 1, 2$$

Se agrega un campo eléctrico $\vec{E}$ y la partícula tiene carga q.

$H_d = -qEx$ $\qquad (\vec{E} = E\hat{x})$

Ecuación de autovalores

La matriz del Hamilt. total es ahora ($H = H_0 + H_d$)
en la base de autoestados de H_0 $\{|\varphi_i\rangle\}$

$$\bar{\bar{H}} = \begin{pmatrix} \langle\varphi_1|H|\varphi_1\rangle & \langle\varphi_1|H|\varphi_2\rangle \\ \langle\varphi_2|H|\varphi_1\rangle & \langle\varphi_2|H|\varphi_2\rangle \end{pmatrix}$$

veamos:

$$\langle\varphi_1|H|\varphi_1\rangle = \langle\varphi_1|H_0 + H_d|\varphi_1\rangle = \langle\varphi_1|H_0|\varphi_1\rangle + \underbrace{\langle\varphi_1|H_d|\varphi_1\rangle}_{=0} = E_0$$

por paridad

$$\langle\varphi_2|H|\varphi_2\rangle = E_2 + \underbrace{\langle\varphi_2|H_d|\varphi_2\rangle}_{0} = E_2$$

$$\langle\varphi_1|H|\varphi_2\rangle = \underbrace{\langle\varphi_1|H_0|\varphi_2\rangle}_{=0} + \langle\varphi_1|H_d|\varphi_2\rangle = h_{12}$$

$$h_{21} = \langle\varphi_2|H|\varphi_1\rangle = \langle\varphi_1|H^+|\varphi_2\rangle^* = \langle\varphi_1|H|\varphi_2\rangle^* = h_{12}{}^*$$

Ecuación de autovalores

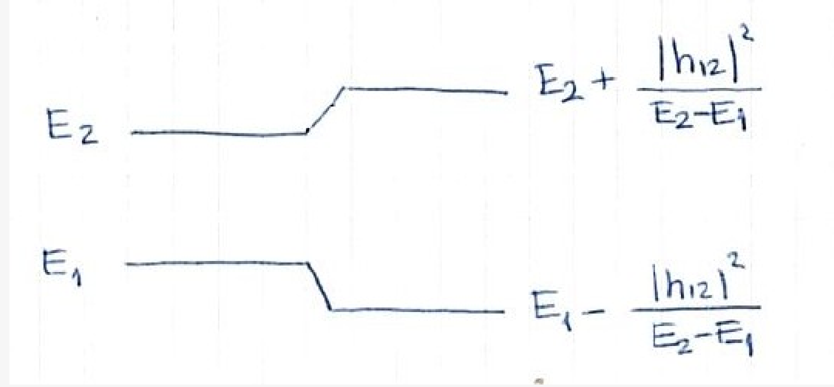
Hallar las nuevas autoenergías

$$\det(H - \lambda I) = 0 = \begin{vmatrix} E_1 - \lambda & h_{12} \\ h_{12}^* & E_2 - \lambda \end{vmatrix} = (E_1 - \lambda)(E_2 - \lambda) - |h_{12}|^2$$

$$= E_1 E_2 - \lambda (E_1 + E_2) + \lambda^2 - |h_{12}|^2$$

$$= 0$$

Si $|h_{12}| \ll E_2 - E_1$



Resumen de la Clase 4

En esta clase vimos:

- Representaciones en el espacio de estados
- Kets, bras, operadores
- Cambio de representación
- Ecuación de autovalores
- Cálculo de autovalores y autovectores
- Ejemplo: sistema 2x2