Física Teórica 2

Pablo I. Tamborenea

Clase 3, 22/08/2023

Producto escalar en componentes

Tomemos dos kets $|\varphi\rangle$ y $|\psi\rangle$ que se expanden en la base $\{|u_i\rangle\}$:

$$|\varphi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \qquad\qquad |\psi\rangle = \sum_j d_j |u_j\rangle \tag{1}$$

Calculemos su producto escalar:

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\big(\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|\big)|\psi\rangle = \sum_i \langle\varphi|u_i\rangle\langle u_i|\psi\rangle = \sum_i c_i^* d_i \tag{2}$$

$$= \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* & c_3^* & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle\varphi|u_1\rangle & \langle\varphi|u_2\rangle & \langle\varphi|u_3\rangle & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \langle u_3|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{3}$$

El bra es el adjunto o conjugado Hermítico del ket. Se pasa de la columna a la fila y se conjugan los coeficientes.

Elemento de matriz de un operador: $\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle$

Sea un operador A y tomemos dos kets $|\varphi\rangle$ y $|\psi\rangle$. Calculamos el elemento de matriz o "sandwich" del operador A:

$$\begin{aligned} \langle\varphi|A|\psi\rangle &= \langle\varphi|\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|A|\sum_j |u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle = \sum_{ij} \langle\varphi|u_i\rangle\langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|\psi\rangle & (4)\\ &= \sum_{ij} c_i^* A_{ij} d_j & (5) \end{aligned}$$

$$= \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* & c_3^* & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \cdots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \cdots \\ \vdots & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{6}$$

Desafío: Expresar en componentes el operador de transición $|\varphi\rangle\langle\psi|$.

Valor medio del operador: $\langle\varphi|\hat{A}|\varphi\rangle$

Sea A y ahora tomemos un solo ket, $|\varphi\rangle$. Hacemos el "sandwich" de A con ese ket:

$$\begin{aligned}
\langle\varphi|A|\varphi\rangle &= \langle\varphi|\sum_i |u_i\rangle\langle u_i|A|\sum_j |u_j\rangle\langle u_j|\varphi\rangle = \sum_{ij}\langle\varphi|u_i\rangle\langle u_i|A|u_j\rangle\langle u_j|\varphi\rangle && (7)\\
&= \sum_{ij} c_i^* A_{ij} c_j && (8)
\end{aligned}$$

$$= \begin{pmatrix} c_1^* & c_2^* & c_3^* & \cdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \cdots \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \cdots \\ \vdots & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ c_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \tag{9}$$

Esto nos da el valor medio del operador A cuando el estado del sistema es $|\varphi\rangle$. Por ejemplo, podemos pensar en el valor del operador posición $\hat{X}$ cuando la función de onda es un dado $\varphi(x)$:

$$\begin{aligned}
\langle\varphi|\hat{X}|\varphi\rangle &= \int dx\, \varphi(x)^* \hat{X}\varphi(x) && (10)\\
&= \int dx\, \varphi(x)^* x\varphi(x) && (11)\\
&= \int dx\, |\varphi(x)|^2 x && (12)
\end{aligned}$$

Operador adjunto

Calculemos el **complejo conjugado** del elemento de matriz $\langle\varphi|A|\psi\rangle$.

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle^* = \sum_{ij} c_i A_{ij}^* d_j^* = \sum_{ij} c_j A_{ji}^* d_i^* = \sum_{ij} d_i^* A_{ji}^* c_j \tag{13}$$

Aparecen los elementos de matriz en la base A_{ji}^*. Estos son los elementos de matriz del operador adjunto de A, que denotamos $A^\dagger$:

$$\langle\varphi|A|\psi\rangle^* = \langle\psi|A^\dagger|\varphi\rangle \tag{14}$$

En particular, tenemos que $(A^\dagger)_{ij} = A_{ji}^*$. Por ejemplo

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \longrightarrow A^\dagger = \begin{pmatrix} A_{11}^* & A_{21}^* \\ A_{12}^* & A_{22}^* \end{pmatrix} \tag{15}$$

En el siguiente gráfico visualizamos la relación entre un dado operador y su operador adjunto:

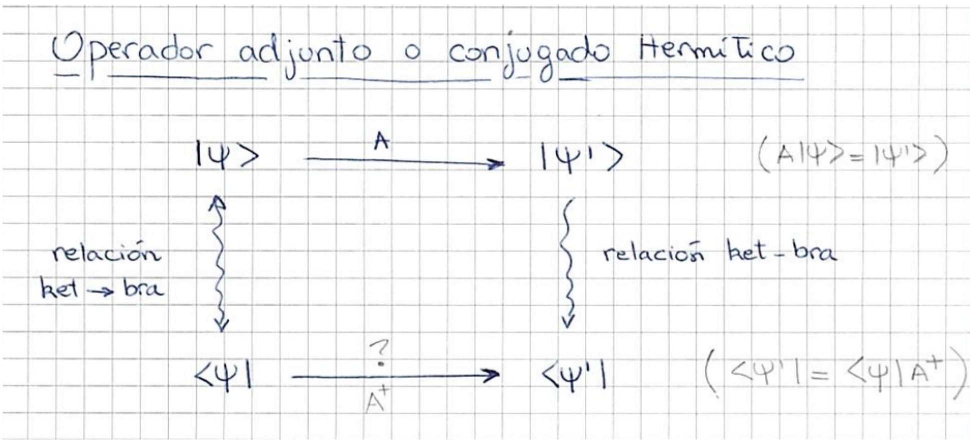

Figure 1: El operador $A^\dagger$ se define por $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle \Longleftrightarrow \langle\psi'| = \langle\psi|A^\dagger$

Conjugación Hermítica de una expresión

Receta: vemos que para hacer el complejo conjugado de una expresión, invertimos el orden de los elementos y hacemos la conjugación hermítica de los elementos:

$$|\psi\rangle \longrightarrow \langle\psi| \tag{16}$$

$$A \longrightarrow A^\dagger \tag{17}$$

$$\lambda \longrightarrow \lambda^* \tag{18}$$

Operadores Hermíticos

Los operadores que satifacen:

$$A^\dagger = A \tag{19}$$

se denominan operadores Hermíticos o auto-adjuntos (son iguales a su adjunto). Tenemos

$$A^*_{ji} = (A^\dagger)_{ij} = A^\dagger_{ij} \tag{20}$$

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

Cambio de base o representación

Al cambiar de base, digamos de $\{|u_i\rangle\}$ a $\{|v_j\rangle\}$, los coeficientes de los kets y los operadores cambian de acuerdo a las fórmulas de cambio de base del álgebra lineal. Esto se hace de manera bastante cómoda y conveniente en la notación de Dirac. Queda como ejercicio, se puede ver en el libro o en el apunte Herramientas Matemáticas 2.

Autovalores y autoestados de operadores

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

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \tag{21}$$

Esta es la *ecuación de autovalores* del operador A. El conjunto de valores que toma λ, $\{\lambda\}$, constituye el espectro de A.

Un dado autovalor λ puede ser:

- No-degenerado: autovector asociado único
- Degenerado: $|\psi^i\rangle, i = 1, \ldots, g$
  g es el grado u orden de la degeneración.
  Los $|\psi^i\rangle$ son linealmente independientes, forman subespacio de dimensión g.

Teorema: Los autovalores de un operador Hermítico son reales

Sea A Hermítico (o sea $A = A^\dagger$). Si tenemos $A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$,
veamos que: $\lambda \in \mathbb{R}$

Demostración

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \Rightarrow \langle\psi|A|\psi\rangle = \lambda\langle\psi|\psi\rangle \tag{22}$$

Pero, dado que A es Hermítico:

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|A^\dagger|\psi\rangle^* = \langle\psi|A|\psi\rangle^* \in \mathbb{R} \tag{23}$$

Como también $\langle\psi|\psi\rangle \in \mathbb{R}$, entonces $\lambda \in \mathbb{R}$. ///

Fin de la clase 3