2/6/2016

Ecuación de autovalores

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

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \qquad \text{Ec. de autovalores}$$

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

λ →
- no degenerado : autovector único (a menos de un factor)
- degenerado : $|\psi^i\rangle$, $i = 1, \dots, g$ ↳ grado o orden de la degeneración

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

Notar: en caso degenerado:

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

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

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

$$\text{si} \quad P_\psi|\varphi\rangle = \lambda|\varphi\rangle$$
$$= |\psi\rangle\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle\,|\psi\rangle$$

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

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

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

Cálculo de autovalores y autovectores

Sea operador A.

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

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

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

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

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

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

$\uparrow$ matriz de $N \times N$

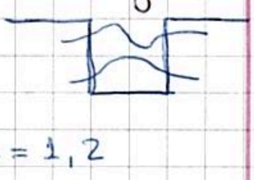
N: tamaño de la base

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

λ $\rightarrow$ raíces simples

λ $\rightarrow$ raíces múltiples: Para operador Hermítico, el número de autovectores = grado de la raíz

$\Rightarrow$ forman base en espacio de dimensión N



Ejemplo

Sea $H_0 = \begin{pmatrix} E_1 & 0 \\ 0 & E_2 \end{pmatrix}$ $\quad H_0|\varphi_i\rangle = E_i|\varphi_i\rangle \quad i = 1, 2$

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

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

8/6/16

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:

$$\langle\varphi_1|H|\varphi_1\rangle = \langle\varphi_1|H_0 + H_d|\varphi_1\rangle = \langle\varphi_1|H_0|\varphi_1\rangle + \underbrace{\langle\varphi_1|H_d|\varphi_1\rangle}_{\substack{=0 \\ \text{por paridad}}} = E_1$$

$$\langle\varphi_2|H|\varphi_2\rangle = E_2 + \underbrace{\langle\varphi_2|H_d|\varphi_2\rangle}_{0} = \tilde{E}_2$$

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

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

$$H = \begin{pmatrix} E_1 & h_{12} \\ h_{12}^* & \tilde{E}_2 \end{pmatrix}$$

Hallar las nuevas autoenergías

$$\det(H - \lambda I) = 0 = \begin{vmatrix} E_1 - \lambda & h_{12} \\ h_{12}^* & \tilde{E}_2 - \lambda \end{vmatrix} = (E_1 - \lambda)(\tilde{E}_2 - \lambda) - |h_{12}|^2$$

$$= E_1\tilde{E}_2 - \lambda(E_1 + \tilde{E}_2) + \lambda^2 - |h_{12}|^2 = 0$$

$$\Rightarrow \lambda = \frac{E_1 + \tilde{E}_2}{2} \pm \frac{\sqrt{(E_1 + \tilde{E}_2)^2 - 4(E_1\tilde{E}_2 - |h_{12}|^2)}}{2}$$

$$= \frac{E_1 + \tilde{E}_2}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{E_1^2 - \tilde{E}_2^2 + 2E_1\tilde{E}_2 - 4E_1\tilde{E}_2 + 4|h_{12}|^2}$$

$$= \frac{E_1 + \tilde{E}_2}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_1 - \tilde{E}_2)^2 + 4|h_{12}|^2}$$

Si $h_{12} = 0 \Rightarrow \lambda = \frac{E_1 + \tilde{E}_2}{2} \pm \frac{1}{2}|E_1 - \tilde{E}_2| = \frac{E_1 + \tilde{E}_2}{2} \pm \frac{1}{2}(\tilde{E}_2 - E_1)$

$$= \begin{cases} \tilde{E}_2 = E_2 & \text{(con el +)} \\ E_1 & \text{(con el −)} \end{cases}$$

Si $|h_{12}| << E_2 - E_1$

$$\lambda = \frac{E_1 + \tilde{E}_2}{2} \pm \frac{\tilde{E}_2 - E_1}{2} \sqrt{1 + \Bigg(\underbrace{\frac{2|h_{12}|}{\tilde{E}_2 - E_1}}_{\varepsilon}\Bigg)^2}$$

$$f(\varepsilon) = \sqrt{1+\varepsilon^2} \simeq 1 + \left.\frac{df}{d\varepsilon}\right|_{\varepsilon=0} \varepsilon + \frac{1}{2} \left.\frac{d^2 f}{d\varepsilon^2}\right|_{\varepsilon=0} \varepsilon^2$$

$$\frac{df}{d\varepsilon} = \frac{1}{2}\left(1+\varepsilon^2\right)^{-1/2} 2\varepsilon = \frac{\varepsilon}{\sqrt{1+\varepsilon^2}}$$

$$\frac{d^2 f}{d\varepsilon^2} = (1+\varepsilon^2)^{-1/2} + \varepsilon\left(-\frac{1}{2}\right)(1+\varepsilon^2)^{-3/2} 2\varepsilon = (1+\varepsilon^2)^{-1/2} - (1+\varepsilon^2)^{-3/2}\varepsilon^2$$

$$= \frac{1+\varepsilon^2-\varepsilon^2}{(1+\varepsilon^2)^{3/2}} = \frac{1}{(1+\varepsilon^2)^{3/2}}$$

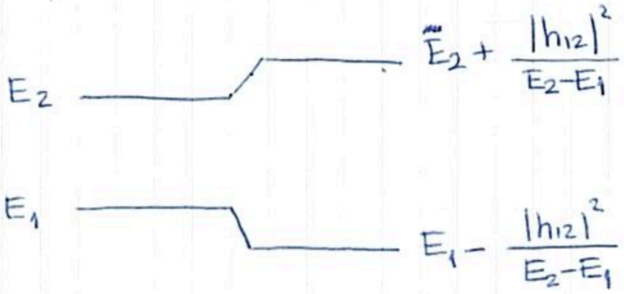
$$\Rightarrow \lambda = \frac{E_1 + \tilde{E}_2}{2} \pm \frac{\tilde{E}_2 - E_1}{2}\left(1 + \frac{1}{2}\varepsilon^2\right)$$

$$= \frac{E_1 + \tilde{E}_2}{2} \pm \frac{\tilde{E}_2 - E_1}{2}\left(1 + \frac{1}{2}\frac{4|h_{12}|^2}{(E_2 - E_1)^2}\right)$$

$$= \frac{E_1 + \tilde{E}_2}{2} \pm \left(\frac{\tilde{E}_2 - E_1}{2} + \frac{|h_{12}|^2}{E_2 - E_1}\right)$$

$$\lambda_+ = \tilde{E}_2 + |h_{12}|^2 / E_2 - E_1$$

$$\lambda_- = E_1 - \frac{|h_{12}|^2}{E_2 - E_1}$$



$$\tilde{E}_2 = E_2 + \langle \varphi_2 | H_d | \varphi_2 \rangle = E_2 + \langle \varphi_2 | -q x E | \varphi_2 \rangle$$

$$= E_2 - qx \underbrace{\langle \varphi_2 | x | \varphi_2 \rangle}_{0 \text{ si } |\varphi_2|^2 \text{ es par}}$$

8/6/16

Autovalores y autovectores de operadores Hermíticos

Sea A Hermítico: $A = A^+$. Sea $A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$

Teo: $\lambda \in \mathbb{R}$

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \Rightarrow \langle\psi|A|\psi\rangle = \lambda\langle\psi|\psi\rangle$$

Pero $\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|A^+|\psi\rangle^* = \langle\psi|A|\psi\rangle^* \in \mathbb{R}$

Como también $\langle\psi|\psi\rangle \in \mathbb{R} \Rightarrow \lambda \in \mathbb{R}$ ///

Teo: $\begin{cases} A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \\ A|\varphi\rangle = \mu|\varphi\rangle \end{cases}$ si $\lambda \neq \mu \Rightarrow |\psi\rangle \perp |\varphi\rangle$

Como A es Hermítico, $A|\varphi\rangle = \mu|\varphi\rangle \Rightarrow$

$$\langle\varphi|A^+ = \langle\varphi|\mu^* \Rightarrow \langle\varphi|A = \mu\langle\varphi|$$

Entonces: $A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \Rightarrow \underbrace{\langle\varphi|A|\psi\rangle}_{\mu\langle\varphi|\psi\rangle} = \lambda\langle\varphi|\psi\rangle$

$\Rightarrow (\mu - \lambda)\langle\varphi|\psi\rangle = 0$

Como $\mu \neq \lambda \Rightarrow \langle\varphi|\psi\rangle = 0 \Rightarrow |\varphi\rangle \perp |\psi\rangle$ ///.

Definición de observable

Sean autoestados y autovalores de A: $\{a_n, |\psi_n^i\rangle, i = 1, \dots g_n\}$

degeneración de a_n

Siempre $\langle\psi_n^i|\psi_m^j\rangle = 0$ si $n \neq m$

Además, para dado n se puede pedir:

$$\langle\psi_n^i|\psi_n^j\rangle = \delta_{ij}$$

8/6/16

En síntesis, $\langle \varphi_n^i | \varphi_m^j \rangle = \delta_{nm} \delta_{ij}$

Expresa ortonormalidad de los autovectores de A.

Def: A es un observable si sus autovectores forman una base:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{i=1}^{g_n} |\varphi_n^i\rangle\langle\varphi_n^i| = \mathbb{1}$$

Para espectro continuo:

$$\sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |\varphi_n^i\rangle\langle\varphi_n^i| + \int_{\nu_1}^{\nu_2} d\nu \, |\varphi_\nu\rangle\langle\varphi_\nu| = \mathbb{1}$$

$$\langle \varphi_n^i | \varphi_m^j \rangle = \delta_{nm} \delta_{ij}$$

Dar ejemplo de base continua con degeneración

$$\langle \varphi_\nu | \varphi_{\nu'} \rangle = \delta(\nu - \nu') \qquad \text{(Delta de Dirac)}$$

$$\langle \varphi_n^i | \varphi_\nu \rangle = 0$$

Ejemplo: proyector: Teorema: El proyector es observable

$P_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ es hermítico. $\lambda \nearrow 1, \; |\psi\rangle$; $\lambda \searrow 0, \;$ kets $\perp |\psi\rangle$

Sea $|\varphi\rangle$ arbitrario.

$$|\varphi\rangle = \mathbb{1}|\varphi\rangle + P_\psi|\varphi\rangle - P_\psi|\varphi\rangle = P_\psi|\varphi\rangle + (\mathbb{1} - P_\psi)|\varphi\rangle$$

Vemos que $P_\psi|\varphi\rangle$ es autoestado de P_ψ con $\lambda = 1$:

$$P_\psi (P_\psi|\varphi\rangle) = P_\psi^2|\varphi\rangle = P_\psi|\varphi\rangle$$

También $(\mathbb{1} - P_\psi)|\varphi\rangle$ es autoestado de P_ψ, pero con $\lambda = 0$:

$$P_\psi \left((\mathbb{1} - P_\psi)|\varphi\rangle \right) = (P_\psi - P_\psi^2)|\varphi\rangle = (P_\psi - P_\psi)|\varphi\rangle = 0$$

Conclusión: el ket arbitrario $|\psi\rangle$ puede ser expandido en autoestados de $P_\psi \Rightarrow P_\psi$ es observable.

Conjunto de observables que conmutan

Teorema I

$$\left.\begin{array}{l} \text{Si } [A,B]=0 \\ A|\psi\rangle = a|\psi\rangle \end{array}\right\} \Rightarrow A\left(B|\psi\rangle\right) = a\,B|\psi\rangle$$

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle \Rightarrow \underset{\substack{\parallel \\ A\,B|\psi\rangle}}{BA|\psi\rangle} = a\,B|\psi\rangle \quad \checkmark$$

(i) Si a es no degenerado $\Rightarrow B|\psi\rangle \,//\, |\psi\rangle$ (es el único autovector)

(ii) Si a es degenerado $\Rightarrow$ autosubespacio $\mathcal{E}_a$ $(\dim(\mathcal{E}_a)>1)$

y vemos que $B|\psi\rangle \in \mathcal{E}_a$.

O sea: "cada autosubespacio de A es globalmente invariante frente a la acción de B".

Teorema II

$$\left.\begin{array}{l} \text{Si } [A,B]=0 \\ A|\psi_1\rangle = a_1|\psi_1\rangle \\ A|\psi_2\rangle = a_2|\psi_2\rangle \\ \quad a_1 \neq a_2 \end{array}\right\} \Rightarrow \langle\psi_1|B|\psi_2\rangle = 0$$

Dem: $B|\psi_2\rangle$ es autovector de A con autovalor a_2

10/6/16

~~Conjunto de observables que conmutan~~

$\Rightarrow \quad B|\psi_2\rangle \perp |\psi_1\rangle$

↳ demostrado para operadores hermíticos

$\Rightarrow \langle\psi_1|B|\psi_2\rangle = 0 \quad ///$

Otra demostración: $\quad [A, B] = 0 \Rightarrow \langle\psi_1|[A,B]|\psi_2\rangle = 0$

$\Rightarrow \langle\psi_1|AB - BA|\psi_2\rangle = 0 \Rightarrow \langle\psi_1|AB|\psi_2\rangle - \langle\psi_1|BA|\psi_2\rangle = 0$

$\cancel{\Rightarrow a_1 \langle\psi_1|B|\psi_2\rangle = a_2 \langle\psi_1|B|\psi_2\rangle}$

$$\left.\begin{array}{l} \Rightarrow (a_1 - a_2)\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle = 0 \\ \text{como } a_1 \neq a_2 \end{array}\right\} \Rightarrow \langle\psi_1|B|\psi_2\rangle = 0$$

Teorema III:

Si $[A, B] = 0 \Rightarrow$ se puede construir una base ortonormal

Sean A, B observables con autovectores comunes de A y B.

Como A es observable, existe base $\{|u_n^i\rangle\}$

$A|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle \qquad n = 1, 2, \ldots \quad i = 1, 2, \ldots, g_n$

La matriz de B en $\{|u_n^i\rangle\}$ es block-diagonal:

	$\mathcal{E}_1$	$\mathcal{E}_2$	$\mathcal{E}_3$	...
$\mathcal{E}_1$		0	0	0
$\mathcal{E}_2$	0		0	0
$\mathcal{E}_3$	0			0
⋮	0			

tamaño $g_n \times g_n$

Autosubespacios: $\mathcal{E}_n$

asociados a a_n

- Si a_n es no-degenerado el autovector $|u_n\rangle$ es común a A y B. Lo incluímos en la base común.

- Si a_n es degenerado $(g_n > 1)$.

Cualquier vector en $\mathcal{E}_n$ es autovector de A con autoval. a_n

$$\text{en } \mathcal{E}_n : \quad \bar{\bar{A}} = a_n I_{g_n \cdot g_n}$$

La matriz de B en $\mathcal{E}_n$, $\beta_{ij}^{(n)} = \langle u_n^i | B | u_n^j \rangle$

es hermítica $\Rightarrow$ diagonalizable $\Rightarrow \{ |v_n^i\rangle, \; i = 1, \dots, g_n \}$

con $\langle v_n^i | B | v_n^j \rangle = \delta_{ij} \, \beta_i^{(n)}$

y $B | v_n^i \rangle = \beta_i^{(n)} | v_n^i \rangle$

Los $|v_n^i\rangle$ se pueden escribir en Términos de los $|u_n^j\rangle$

"en cada autosubespacio de A $(\mathcal{E}_n)$ es posible elegir una base común de A y B"

(y viceversa ...)

Haciendo esto $\forall n$ obtenemos la base común de Todo el espacio de Hilbert.

<u>Degeneración restante</u>

Los autovectores comunes de A y B

$$A | u_{n,p}^i \rangle = a_n | u_{n,p}^i \rangle$$

$$B | u_{n,p}^i \rangle = b_p | u_{n,p}^i \rangle$$

pueden ser Todavía degenerados con degeneración $g_{n,p}$

<u>Inverso de teorema III</u>

Si existe base común de A y B $\Longrightarrow [A, B] = 0$ Demostrar, fácil

10/6/16

Conjunto completo de observables que conmutan (C.C.O.C)

Un conjunto de observables A, B, C, ... forma un CCOC si

(i) A, B, C, ... conmutan de a pares

(ii) si especificar los autovalores de todos los operadores determina un único autovector común.

(Alternativa:
A, B, C, ... es un CCOC si existe una única base de autovectores comunes)

Notación:

$\{A, B, C\} \to$ autovalores: $\{a_n, b_p, c_r\} \to$

autovector: $|a_n\, b_p\, c_r\rangle$