

Introducción

1.1 El experimento de Stern-Gerlach

Un horno emite átomos de plata (Ag) neutros con un electrón e en la última órbita que le da el spín al átomo como un todo. Al salir del horno los átomos tienen su spín orientado en cualquier dirección. Ver figura. El momento magnético del átomo que sale del horno es

$$\mu = \frac{e}{m_e c} \mathbf{S}$$

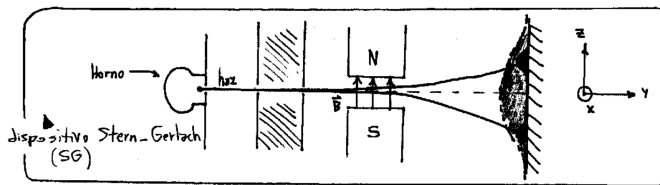


Figura 1.1

La fuerza f_z que le ejerce el campo \mathbf{B} a estos átomos es

$$f_z \propto -\mu_z$$

de modo que el dispositivo SG mide y filtra por $S_z(\mu_z)$. Si el spín es un ente clásico es de esperar un patrón como el sombreado en azul, pero se obtienen dos manchas; con la correspondencia mostrada bajo estas líneas

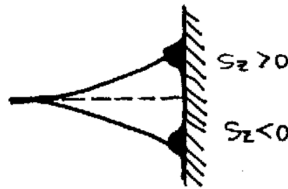


Figura 1.2

Entonces el espín no es un ente *continuo*: está cuantizado y sólo puede tomar dos valores. Llamamos a estos estados

$$(S_z, +) \quad (S_z, -)$$

Luego, un aparato de SG filtra o selecciona ciertos átomos. Podemos combinarlos.

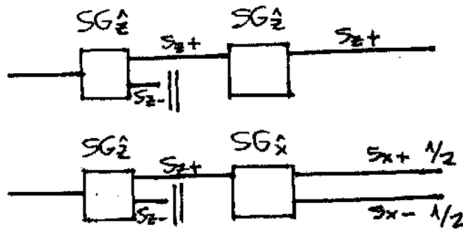


Figura 1.3

Con el dispositivo segundo orientado en \hat{x} obtenemos mitad de átomos en $(S_z, +)$ y mitad en $(S_z, -)$. La única es que en realidad lo que sucede es que $(S_z, +)$ se compone de $(S_x, +)$ y $(S_x, -)$.

Acá abajo sale $(S_z, -)$ pero para que ello sea posible $(S_x, +)$ se debe componer de $(S_z, +)$ y $(S_z, -)$. Pero esto no es posible porque al segundo aparato no entró jamás $(S_z, -)$. Se filtró antes.

Los spines en S_x, S_z son incompatibles. Al seleccionar $(S_z, +)$ en el segundo SG se destruye la información previa sobre S_z . No podemos ya garantizar que S_z sea nula. El tercer experimento da al traste con la idea de que podamos pensar en espín como un ente vectorial en 3D. Mediante una analogía con polarización de luz vemos que es necesario meter al espín en un espacio vectorial de dimensión 2 pero con coeficientes complejos.

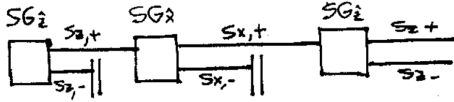


Figura 1.4

1.2 Algebra?

El ket contiene toda la información cuántica del estado. Da el estado físico del sistema.

- $|\alpha\rangle + |\beta\rangle$ la suma de kets es un ket
- $c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c$ con $c \in \mathbb{C}$
- $c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle = |\gamma\rangle$ con $c_1, c_2 \in \mathbb{C}$
- $c|\alpha\rangle, |\alpha\rangle$ representan el mismo estado cuántico

Se define un espacio de *Bra* dual al de "kets" al que se va mediante "dual conjugado"

$$|a\rangle, |a'\rangle \Leftrightarrow \langle a|, \langle a'|$$

$$|a\rangle + |b\rangle \Leftrightarrow \langle a| + \langle b| \quad c|a\rangle \Leftrightarrow c^* \langle a|$$

Se define también un producto interno según

$$(\langle\alpha|)(|\beta\rangle) \equiv \langle\alpha|\beta\rangle$$

que no es otra cosa que un número complejo. Se puede hacer entonces una equivalencia con los vectores estándar del álgebra del siguiente modo

$$\text{ket} \sim \text{vector columna} \quad |x\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{bra} \sim \text{vector fila} \quad \langle x| = (1 \ 0)$$

y habiendo definido esta base escribimos, por ejemplo

$$|a\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} |x\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |y\rangle$$

$$\langle a|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \ 1) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

y del mismo modo

$$\left(\frac{1}{\sqrt{2}} \langle x| + \frac{1}{\sqrt{2}} \langle y| \right) (|x\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

1.2.1 Propiedades

1. $\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle^*$ luego $\langle \alpha | \alpha \rangle \in \mathbb{R}$
2. $\langle \alpha | \alpha \rangle \geq 0$ métrica definida positiva
3. $\langle \alpha | \beta \rangle = \langle \beta | \alpha \rangle = 0 \Leftrightarrow |\alpha\rangle \perp |\beta\rangle$
4. $\langle \tilde{\alpha} | \tilde{\alpha} \rangle = 1$ con $|\tilde{\alpha}\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle \alpha | \alpha \rangle}} |\alpha\rangle$ todo ket no nulo es normalizable

1.2.2 Operadores

A cada observable lo representaremos por un operador. hay operadores que no vienen de observables.

$$\hat{A}|\alpha\rangle = |\gamma\rangle \quad \langle \alpha | \hat{A} = \langle \gamma |$$

un operador sobre un ket da otro ket y sobre un bra da otro bra. Notemos que en este último caso opera a izquierda. La transformación entre operadores se da con

$$\hat{X}|a\rangle \Leftrightarrow \langle a | \hat{X}^\dagger$$

donde \dagger (daga) significa el traspuesto conjugado; cambia el sentido hacia donde actúa el operador y conjuga. Se da que si

$$\hat{X} = \hat{X}^\dagger \Rightarrow \hat{X} \text{ es hermítico}$$

Se dan

- $\hat{X}\hat{Y} \neq \hat{Y}\hat{X}$ no conmutativo
- $\hat{X}(\hat{Y}\hat{Z}) = (\hat{X}\hat{Y})\hat{Z} = \hat{X}\hat{Y}\hat{Z}$ asociativo
- $(XY)^\dagger = Y^\dagger X^\dagger$
- $\hat{0}|\alpha\rangle = 0 \quad \forall |\alpha\rangle ; \hat{0} \equiv \text{operador nulo}$
- $\hat{X}(c_1|\alpha\rangle + c_2|\beta\rangle) = c_1\hat{X}|\alpha\rangle + c_2\hat{X}|\beta\rangle$

de modo que en cuántica los observables se representan mediante operadores hermíticos.

1.2.3 sandwiches

$$\langle \beta | X | \alpha \rangle = (\langle \beta |)(X | \alpha \rangle) = \langle \beta | \gamma \rangle = \langle \gamma | \beta \rangle^* = (\langle \alpha | X | \beta \rangle)^*$$

donde usamos que $|\gamma\rangle$ es un ket y por dual conjugado $\langle \gamma | = \langle \alpha | \hat{X}^\dagger$ y extraemos como conclusión

$$\langle \beta | X | \alpha \rangle = (\langle \alpha | X | \beta \rangle)^*$$

y de manera equivalente

$$\langle \beta | X | \alpha \rangle = (\langle \beta | X^\dagger)(|\alpha\rangle) = \langle \Gamma | \alpha \rangle = \langle \alpha | \Gamma \rangle^* = (\langle \alpha | X^\dagger | \beta \rangle)^*$$

donde usamos que $\langle \Gamma |$ es un bra y por dual conjugado $|\Gamma\rangle = \hat{X} |\beta\rangle$. El formalismo parece ser consistente. El operador opera sobre un ket/bra y multiplica al otro.

1.2.4 Producto externo

$$|\beta\rangle \langle \alpha| \equiv (|\beta\rangle)(\langle \alpha|)$$

$$(|\beta\rangle \langle \alpha|) |\gamma\rangle = |\beta\rangle \langle \alpha | \gamma \rangle = \langle \alpha | \gamma \rangle |\beta\rangle,$$

de modo que es un operador pues al aplicar sobre un ket obtengo otro ket (notemos que $\langle \alpha | \gamma \rangle$ es un escalar). Podemos pensar en que

$$\Lambda_\alpha \equiv |\alpha\rangle \langle \alpha|$$

es el proyector, que actúa rotando un $|\gamma\rangle$ en la dirección de $|\beta\rangle$. Notemos

$$\Lambda_\alpha^2 = |\alpha\rangle \langle \alpha| |\alpha\rangle \langle \alpha| = |\alpha\rangle \langle \alpha| = \Lambda_\alpha$$

puesto que $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$. El proyector Λ_α sobre un ket $|\beta\rangle$ selecciona la parte de $|\beta\rangle$ en la dirección de $|\alpha\rangle$. Nos dice cuanto de $|\beta\rangle$ está en la dirección de $|\alpha\rangle$. Luego,

$$\sum_i^N \Lambda_i = \sum_i^N |i\rangle \langle i| = \mathbb{1}$$

la suma de todos los proyectores del espacio en el que estamos es la identidad de ese espacio. Decimos que $|i\rangle$ es un conjunto completo. Se verifica además

$$(|\beta\rangle \langle \alpha|)^\dagger = |\alpha\rangle \langle \beta|$$

Algunas cuentitas de ejemplo en dos dimensiones,

$$\begin{aligned}\hat{X} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & \hat{Y} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \hat{X}^\dagger &= (1 \ 0) & \hat{Y}^\dagger &= (0 \ 1) \\ \hat{X}^\dagger \hat{X} &= (1 \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 & \hat{X} \hat{X}^\dagger &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (1 \ 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},\end{aligned}$$

donde instamos al lector a que note la diferencia de dimensión en los resultados.

Los kets $|\alpha\rangle$ *viven* en un espacio vectorial de Hilbert con dimensión N , donde N lo dicta el número de posibles estados de cada sistema físico. Una partícula de spin $1/2$ sólo tiene dos estados: up y down. Hay otro producto más, que se llama producto tensorial y se representa como

$$|\alpha\rangle \otimes |\beta\rangle$$

que es un producto entre kets de espacios de Hilbert diferentes.

$$\langle\alpha|\beta\rangle^* \equiv DC\{|\beta\rangle\}DC\{\langle\alpha|\}$$

1.3 Bases

Dado un sistema físico representado por un espacio vectorial \mathcal{H} de dimensión N existirá una base (también de dimensión N) que será un conjunto de estados tal que cualquier estado de ese sistema físico puede representarse como combinación lineal de ese conjunto,

$$\{|i\rangle\} \text{ base} \Rightarrow |\alpha\rangle = \sum_i^N c_i |i\rangle$$

siendo $|\alpha\rangle$ un estado cualquiera. Es práctico utilizar bases ortonormales,

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

que es la delta de Kronecker.

Así, los kets se definen normalizados.

$$|\psi\rangle = a|1\rangle + b|2\rangle + c|3\rangle + d|4\rangle \quad |a|^2 + |b|^2 + |c|^2 + |d|^2 = 1$$

sea $|\phi\rangle = a|1\rangle + b|2\rangle$, $\langle\phi| = a^*\langle 1| + b^*\langle 2|$ entonces

$$\langle\phi|\phi\rangle = (a^*\langle 1| + b^*\langle 2|)(a|1\rangle + b|2\rangle) = a^*a\langle 1|1\rangle + b^*a\langle 2|1\rangle + a^*b\langle 1|2\rangle + b^*b\langle 2|2\rangle = |a|^2 + |b|^2 = 1$$

1.3.1 Autokets y autovalores

Si $\hat{A}|a\rangle = c|a\rangle$ entonces $|a\rangle$ es autoket de \hat{A} con autovalor c . Se suelen etiquetar los autoestados $|a'\rangle, |a''\rangle$ de modo que

$$\hat{A}|a'\rangle = a'|a'\rangle$$

lo cual lleva al problema espectral

$$(\hat{A} - a'\mathbb{1})|a'\rangle = 0$$

entonces los operadores tendrán representación matricial, que cambiará según la base utilizada. Vamos viendo que en general sólo se sabe cómo opera un operador sobre kets. La operación sobre los bras la obtenemos usando dual conjugado.

Deducimos entonces que

1. Los autovalores de un operador hermítico son reales y los autokets correspondientes a diferentes autovalores son ortogonales.
2. Los autokets de un operador son base completa del espacio de kets.

Como ejemplo de A citemos

$$a'|a'\rangle = A|a'\rangle \quad \text{DC} \quad \langle a'|A^\dagger = \langle a'|A = \langle a'|a'^*$$

de manera que

$$\begin{aligned} \langle a'|A|a'\rangle &= (\langle a'|)(A|a'\rangle) = a' \\ (\langle a'|A|a'\rangle)^* &= (\langle a'|)(A|a'\rangle)^* = (\langle a'|A^\dagger)(|a'\rangle) \\ &= \langle a'|A|a'\rangle = a' \quad \Rightarrow \quad a' = a'^*. \end{aligned}$$

Para el caso de B se postula así. Si esto vale entonces

$$|\alpha\rangle = \sum_i^N |a_i\rangle \langle a_i|\alpha\rangle = \sum_i^N c_i |a_i\rangle = \mathbb{1}|\alpha\rangle$$

pues

$$\langle \alpha|\alpha\rangle = \sum_{i,j}^N \langle a_j|c_j^*c_i|a_i\rangle = \sum_i^N |c_i|^2 = 1$$

y además

$$A|a'\rangle = a'|a'\rangle \quad A|a''\rangle = a''|a''\rangle \Rightarrow A(|a'\rangle - |a''\rangle) = a'|a'\rangle - a''|a''\rangle$$

$$\langle a'' | A | a' \rangle = a' \langle a'' | a' \rangle \quad \langle a' | A | a'' \rangle = a'' \langle a' | a'' \rangle$$

y ahora conjugando

$$\langle a'' | A | a' \rangle^* = a' \langle a'' | a' \rangle^* \quad \langle a'' | A | a' \rangle = a'' \langle a'' | a' \rangle$$

donde usamos que $a''^* = a''$ y restando

$$(a' - a'') \langle a'' | a' \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle a'' | a' \rangle = 0 \quad \text{si} \quad a' \neq a''$$

Si la base es completa entonces es $\sum \Lambda = 1$.

1.3.2 Operadores y matrices

Un operador se puede representar matricialmente como

$$X = \sum_{a'}^N \sum_{a''}^N |a''\rangle \langle a'' | X | a'\rangle \langle a' | = \sum_{a'}^N \sum_{a''}^N (\langle a'' | X | a'\rangle) |a''\rangle \langle a' |$$

donde hemos explotado el hecho de que en el medio aparece un escalar (?), siendo

$$X_{ij} = \langle a_i | X | a_j \rangle$$

un elemento de matriz. Y notemos que $|a''\rangle \langle a' |$ es un ente de $N \times N$. Si la base es de dimensión 3 se tendrá por ejemplo,

$$X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & x_{13} \\ x_{21} & x_{22} & x_{23} \\ x_{31} & x_{32} & x_{33} \end{pmatrix}$$

de manera que existe una identificación entre cosas del álgebra básica y este mundo de operadores y estados. Si X es hermítico por ejemplo, entonces su matriz es simétrica conjugada.

$$\langle a_i | X | a_j \rangle^* = (\langle a_j | X^\dagger | a_i \rangle) = \langle a_j | X | a_i \rangle$$

y entonces

$$\langle a_j | X | a_i \rangle^* = \langle a_i | X | a_j \rangle$$

de modo que

$$X_{ji}^* = X_{ij} \quad X_{ij}^{t*} = X_{ij} \quad X_{ij}^\dagger = X_{ij}$$

y vemos bien el significado de *daguear*. En este caso la matriz tiene traza real y seis elementos independientes

$$X = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & X_{13} \\ X_{12}^* & X_{22} & X_{23} \\ X_{13}^* & X_{23}^* & X_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & X_{13} \\ X_{21} & X_{22} & X_{23} \\ X_{31} & X_{32} & X_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_{11}^* & X_{21}^* & X_{31}^* \\ X_{12}^* & X_{22}^* & X_{32}^* \\ X_{13}^* & X_{23}^* & X_{33}^* \end{pmatrix}$$

1.3.3 Combinación lineal de autoestados

Un estado $|\alpha\rangle$ se puede escribir en función de la base $|a_i\rangle$ de esta forma

$$|\alpha\rangle = \sum_{i=1}^N |a_i\rangle \langle a_i | \alpha \rangle = \sum_{i=1}^N (\langle a_i | \alpha \rangle) |a_i\rangle$$

y entonces

$$\langle a_i | \alpha \rangle = \sum_{j=1}^N c_j \underbrace{\langle a_i | a_j \rangle}_{\delta_{ij}} = c_i$$

1.3.4 Cambio de base

Para cambiar de base metemos un uno ($\mathbb{1}$) escrito como suma de proyectores,

$$X |b_j\rangle = \sum_{i=1}^N |a_i\rangle \langle a_i | X |b_j\rangle = \sum_{i=1}^N C_{ij} |a_i\rangle$$

siendo C_{ij} la matriz del cambio de base. Se puede escribir

$$|b_j\rangle = \sum_{i=1}^N |a_i\rangle \langle a_i | b_j \rangle$$

y se ve que $\langle a_i | b_j \rangle$ son los elementos de la matriz que cambia de base.

1.3.5 Representación diagonal

Un operador tiene representación diagonal cuando está representado en la base de sus autokets

$$A = \sum_i^N \sum_j^N |a_i\rangle \langle a_i | A | a_j \rangle \langle a_j | = \sum_i^N \sum_j^N a_j |a_i\rangle \langle a_i | a_j \rangle \langle a_j | = \sum_{i,j}^N \delta_{ij} a_j |a_i\rangle \langle a_j | = \sum_i^N a_i \mathbb{1}$$

$$A = \begin{pmatrix} a_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_2 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & a_n \end{pmatrix}$$

y a_1, a_2, \dots, a_n son sus autovalores. Es destacable que es conveniente utilizar como bases los autoestados de ciertos operadores.

1.3.6 Representaciones canónicas

Podemos representar una base como vectores canónicos

$$|a_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ N \end{pmatrix} \quad |a_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ N \end{pmatrix} \quad |a_n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}$$

luego

$$|\alpha\rangle = \sum_i |a_i\rangle \langle a_i | \alpha \rangle = \langle a_1 | \alpha \rangle \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ N \end{pmatrix} + \langle a_2 | \alpha \rangle \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ N \end{pmatrix} + \dots + \langle a_n | \alpha \rangle \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} \langle a_1 | \alpha \rangle \\ \langle a_2 | \alpha \rangle \\ \vdots \\ \langle a_n | \alpha \rangle \end{pmatrix}$$

y por DC se tiene

$$\langle \alpha | = (\langle \alpha | a_1 \rangle \langle \alpha | a_2 \rangle \dots \langle \alpha | a_n \rangle)$$

y

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = 1 = \left(\overbrace{\quad}^{1 \times N} \right) \left(\overbrace{\quad}^{N \times 1} \right) = \square$$

que es un escalar.

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \beta | a_i \rangle \langle a_i | \alpha \rangle = \sum_i^N \langle \beta | \underbrace{|a_i\rangle \langle a_i|}_{\Lambda_{a_i}} | \alpha \rangle = \square$$

otra vez un escalar.

$$\langle a_i | \gamma \rangle = \langle a_i | X | \alpha \rangle = \sum_{a_j} \langle a_i | X | a_j \rangle \langle a_j | \alpha \rangle$$

$$\begin{pmatrix} \langle a_1 | \gamma \rangle \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & \dots \\ X_{21} & X_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle a_1 | \alpha \rangle \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$X = \sum_i^N \sum_j^N |a_i\rangle \langle a_i | X | a_j\rangle \langle a_j| = \sum_i^N \sum_j^N \langle a_i | X | a_j\rangle |a_i\rangle \langle a_j|$$

y esto último es una matriz. Aquí el \hat{X} es una matriz y $\langle a_i | \hat{X} | a_j\rangle \equiv X_{ij}$ son sus elementillos (escalares).