

Valores y vectores propios

Se dice que un vector dado es un vector propio de un operador A si la siguiente ecuación se cumple, donde λ es un número complejo:

$$A|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle$$

El número λ se denomina valor propio del operador A . Un problema común en la mecánica cuántica es el siguiente: dado un operador, encuentre sus autovalores y autovectores. El primer paso en este proceso es encontrar los valores propios usando lo que se conoce como la ecuación característica.

Ecuación característica

La ecuación característica para un operador A se encuentra resolviendo la siguiente ecuación

$$\det|A - \lambda I| = 0$$

donde λ es una variable desconocida, I es la matriz identidad y \det denota el determinante de la matriz $A - \lambda I$. Los valores de λ que son las soluciones de esta ecuación son los valores propios del operador A . El determinante de una matriz de 2×2 esta dado por:

$$\det|A| = \det \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = ad - bc$$

Ejercicio

Encuentre los valores propios de un operador A

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}$$

Solución:

Ejercicios propuestos

1. Revisar y seguir el procedimiento del ejemplo 3.6, pág: 50.
2. Considere un sistema cuántico descrito por un operador E

$$E = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & -2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

encuentra los valores y vectores propios de E utilizando la ecuación característica.

Ayuda: Para calcular el determinante de una matriz 3×3 de la forma más sencilla, puedes utilizar la regla de Sarrus. Dada una matriz A de la forma:

$$A = \begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{bmatrix}$$

El determinante de A se calcula de la siguiente manera:

$$\det(A) = (aei + bfg + cdh) - (ceg + afh + bdi)$$

Descomposición espectral

Un operador A perteneciente a algún espacio vectorial que es normal y tiene una diagonal de representación matricial con respecto a alguna base de ese espacio vectorial. Este resultado es conocido como el teorema de la descomposición espectral. Supongamos que un operador A satisface el teorema de descomposición espectral para alguna base $|u_i\rangle$. Esto significa que podemos escribir el operador de la forma

$$A = \sum_{i=1}^n a_i |u_i\rangle \langle u_i|$$

donde a_i son los valores propios del operador. En la base del cálculo, la Z es el operador diagonal.

Ejemplo 3.7 libro guía

Usando el teorema de descomposición espectral, escriba en esa representación el operador A .

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 1 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Solución (parcial):

Traza de un operador

Si un operador está en una representación matricial, la traza del operador es la suma de los elementos diagonales. Por ejemplo,

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad Tr(A) = a + d$$
$$B = \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix}, \quad Tr(B) = a + e + i$$

Si un operador se escribe como un producto externo, tomamos la traza sumando los productos internos con los vectores base. Si etiquetamos una base $|u_i\rangle$, entonces,

$$Tr(A) = \sum_{i=1}^n \langle u_i | A | u_i \rangle$$

Propiedades importantes de la traza

- La traza es cíclica, es decir $Tr(ABC) = Tr(CAB) = Tr(BCA)$.
- La traza de un producto exterior es el producto interior $Tr(|\phi\rangle \langle \psi|) = \langle \phi | \psi \rangle$.
- Por lo anterior se sigue que $Tr(A |\psi\rangle \langle \phi|) = \langle \phi | A | \psi \rangle$.
- La traza es independiente de la base. Si $|u_i\rangle$ y $|v_i\rangle$ son dos bases en un espacio de Hilbert. Entonces $Tr(A) = \sum \langle u_i | A | u_i \rangle = \sum \langle v_i | A | v_i \rangle$.
- La traza de un operador es igual a la suma de sus valores propios. Si los valores propios de A son λ_i , entonces $Tr(A) = \sum_{i=1}^n \lambda_i$.
- La traza es lineal, es decir $Tr(\alpha A) = \alpha Tr(A)$, $Tr(A + B) = Tr(A) + Tr(B)$.

Ejercicios

- Revisar y seguir el procedimiento de los ejemplos 3.8, 3.9, pág: 54.
- Demuestre que la traza de una matriz es igual a la suma de sus valores propios para:

$$X = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\pi/4} \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 3 & 4 \\ 1 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Solución:

- Revisar la prueba realizada en el ejemplo 3.11, pág 57.

Valor de un operador

El valor esperado de un operador es el valor medio o promedio de ese operador con respecto a un estado cuántico dado. En decir, si se prepara muchas veces un estado cuántico $|\psi\rangle$, y medimos un operador A , ¿cuál es el promedio de los resultados de la medición? Este es el valor esperado y lo escribimos como

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

Ejercicios

- Revisar y seguir los ejemplos 3.12, 3.13 pág 57 - 59.
- Considere un sistema cuántico descrito por un estado cuántico $|\psi\rangle$ en un espacio de Hilbert y un operador hermitico O . Calcula el promedio del operador O con respecto al estado $|\psi\rangle$, es decir, $\langle O \rangle$.

Solución:

Funciones de operadores

La función de un operador se puede encontrar calculando su expansión de Taylor:

$$f(A) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n A^n$$

Algo que se ve con frecuencia es un operador en el argumento de una función exponencial, lo que significa e^{aA} . Podemos ver cómo actúa esta función escribiendo su expansión de Taylor:

$$e^{aA} = I + aA + \frac{a^2}{2!}A^2 + \cdots + \frac{a^n}{n!}A^n + \cdots$$

Si un operador A es normal y su expansión espectral esta dada por $A = \sum_i a_i |u_i\rangle \langle u_i|$, entonces

$$f(A) = \sum_i f(a_i) |u_i\rangle \langle u_i|$$

Si H es un operador Hermitico, entonces

$$U = e^{i\varepsilon H}$$

donde ε es un escalar de un operador unitario. Si el operador Hermitico $H = \sum_i \phi_i |u_i\rangle \langle u_i|$, podemos usar la descomposición espectral de los pasos anteriores y escribir

$$U = e^{i\varepsilon H} = \sum_i e^{i\varepsilon \phi_i} |u_i\rangle \langle u_i|$$

reescribiendo y tomando solo los dos primeros términos, obtenemos la transformación unitaria infinitesimal

$$U = I + i$$

El operador H se llama generador de la transformación. Si la representación matricial de un operador se escribe en una base tal que la matriz es diagonal, entonces podemos usar la definición anterior. Así la base computacional básica es

$$Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Usando la notación anterior

$$e^Z = \begin{pmatrix} e & 0 \\ 0 & 1/e \end{pmatrix}$$

Clase 11: teórica/practica (qiskit)

- Transformaciones unitarias.
- Operadores de proyección
- Operadores positivos
- Álgebra del conmutador

Clase 12: teórica/interactiva (vídeo)

- Principio de incertidumbre de Heisenberg.
- Descomposición polar y valores singulares.
- Postulados de la mecánica cuántica.