

Representación de estados

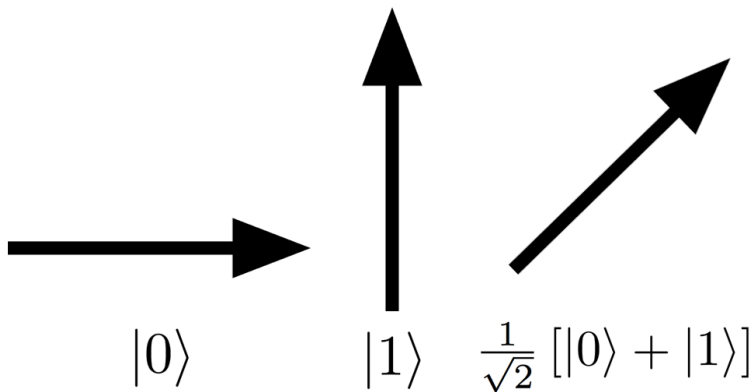


Figure: Representación de los estados de polarización de un fotón

Representación de estados

Max Born, el fundador principal de la interpretación de probabilidad, condensó magistralmente la idea básica en 1926:

"El movimiento de las partículas se ajusta a las leyes de probabilidad, pero la probabilidad misma se propaga de acuerdo con la ley de causalidad."

Amplitud de probabilidad y probabilidad

Amplitud de probabilidad = $\psi(x, y, z, t)$ y la probabilidad es $\psi^* \psi$ la probabilidad de encontrar la partícula en alguna parte debe ser igual a 1.

Representación de estados: Matrices

Denotamos el conjunto de $n \times m$ matrices complejas por $\mathbf{M}_{n,m}(\mathbb{C})$ de la siguiente forma:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2m} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3m} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nm} \end{bmatrix} \quad (9)$$

Representación de estados: Algebra matricial

$$(A + B)_{ij} = A_{ij} + B_{ij} \quad (10)$$

Y para el valor constante se cumple:

$$c(A)_{ij} = cA_{ij} \quad (11)$$

Como ejemplos tenemos:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} + b_{11} & a_{12} + b_{12} & a_{13} + b_{13} \\ a_{21} + b_{21} & a_{22} + b_{22} & a_{23} + b_{23} \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$c \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} ca_{11} & ca_{12} & ca_{13} \\ ca_{21} & ca_{22} & ca_{23} \end{bmatrix} \quad (13)$$

Representación de estados: Conjugada transpuesta de una matriz

$$(A^*)_{ij} = (A_{ij})^* \quad (14)$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{bmatrix}^* = \begin{bmatrix} a_{11}^* & a_{12}^* & a_{13}^* \\ a_{21}^* & a_{22}^* & a_{23}^* \end{bmatrix} \quad (15)$$

$$(A^T)_{ij} = A_{ji} \quad (16)$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{bmatrix}^T = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} \\ a_{12} & a_{22} \\ a_{13} & a_{23} \end{bmatrix} \quad (17)$$

Representación de estados: Transpuesta

Estas matrices tienen las siguientes propiedades:

$$\begin{aligned}(\mathbf{M}^T)^T &= \mathbf{M} \\ (\mathbf{M} + \mathbf{N})^T &= \mathbf{M}^T + \mathbf{N}^T \\ (\mathbf{MN})^T &= \mathbf{N}^T \mathbf{M}^T \\ (k\mathbf{M})^T &= k\mathbf{M}^T\end{aligned}\tag{18}$$

Si $\mathbf{M}^T = \mathbf{M}$ entonces \mathbf{M} se denomina matriz simétrica. Si $\mathbf{M}^T = -\mathbf{M}$ entonces \mathbf{M} se denomina matriz antisimétrica.

Representación de estados: Matriz traspuesta conjugada: $A^\dagger = (A^*)^T$

$$(A^\dagger)_{ij} = (A_{ji})^* \quad (19)$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{bmatrix}^\dagger = \begin{bmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* \\ a_{12}^* & a_{22}^* \\ a_{13}^* & a_{23}^* \end{bmatrix} \quad (20)$$

Representación de estados: Historia

Origen del algebra de Matrices

Gauss en *Disquisitiones Arithmeticae* (1801) creo algo denominado combinación de sustituciones lo cual es equivalente a la multiplicación de matrices.

Algebras de Clifford

Fue alrededor de 1843), cuando Hamilton descubrió los cuaterniones que llevaron al descubrimiento de otros sistemas hipercomplejos y luego, cinco años más tarde, el matemático inglés James Joseph Sylvester introdujo el término matriz (que en latín significa útero); fue otro matemático inglés, William Clifford, quien combinó tanto la teoría de Grassmann como la teoría de los sistemas hipercomplejos en lo que ahora se conoce como álgebras de Clifford.

Heisenberg, Max Born, Jordan, Pauli

Fue Heisenberg quien utilizó la multiplicación de matrices, en su gran artículo que se considera parte de la base de la mecánica cuántica matricial. Esto fue en 1925, poco después de eso, Max Born y Jordan reconocieron que estas operaciones eran multiplicación de matrices, uno de ellos tenía un curso sobre "números hipercomplejos" como estudiante y conocía este tipo de operaciones matemáticas.

Representación de estados: Vector Fila y Vector Columna

Vector Fila

$$[a_1 \quad a_2 \quad a_3 \quad \dots \quad a_n] \quad (21)$$

Vector columna:

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ b_1 \\ b_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ b_n \end{bmatrix} \quad (22)$$

Representación de estados: Multiplicación de matrices

$$\begin{bmatrix} a_1 & a_2 & a_3 & \dots & a_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 + \dots + a_n b_n = \sum_{i=1}^n a_i b_i \quad (23)$$

Representación de estados: Propiedades de la multiplicación de matrices

- Propiedad asociativa: $(\mathbf{AB})\mathbf{C} = \mathbf{A}(\mathbf{BC}) = \mathbf{ABC}$
- Propiedad distributiva:
 $\mathbf{A}(\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{AB} + \mathbf{AC} = (\mathbf{A} + \mathbf{B})\mathbf{C} = \mathbf{AC} + \mathbf{BC}$
- Multiplicación por un escalar: $\lambda(\mathbf{AB}) = \mathbf{A}(\lambda\mathbf{B}) = (\mathbf{AB})\lambda$
- Complejo conjugado: $(\mathbf{AB})^* = \mathbf{A}^*\mathbf{B}^*$
- Transpuesta: $(\mathbf{AB})^T = \mathbf{B}^T\mathbf{A}^T$
- Transpuesta conjugada: $(\mathbf{AB})^\dagger = \mathbf{B}^\dagger\mathbf{A}^\dagger$

La multiplicación de matrices no es conmutativa, esto es, $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$.

Representación de estados: Brackets: notación de Dirac

La notación de Dirac, es la notación estándar para describir los estados cuánticos en la teoría de la mecánica cuántica. Dirac escribió los libros "Quantum Theory of the Electron (1928)" y "The Principles of Quantum Mechanics (1930; 3ª ed. 1947)" en este último usa la notación de la cual hablaremos.

Representación de estados: Brackets: notación de Dirac

La idea básica es que un ket es un vector. $|\cdot\rangle = \text{vector}$. Si se tienen N vectores base $|i\rangle, i = 1, 2, 3 \dots N$ entonces cualquier vector $|v\rangle$ puede escribirse en términos de la base como:

$$|v\rangle = \sum_i v_i |i\rangle \quad (24)$$

El vector representado por el $|v\rangle$ puede escribirse en términos del vector columna:

$$|v\rangle = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ v_N \end{bmatrix} \quad (25)$$

Representación de estados: Brackets: notación de Dirac

la ecuación anterior es análoga a la usual notación vectorial en 3 dimensiones dada por $\vec{a} = a_x \hat{i} + a_y \hat{j} + a_z \hat{k}$ que de forma vectorial puede escribirse como:

$$\vec{a} = \begin{bmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{bmatrix} \quad (26)$$

Representación de estados: Brackets: notación de Dirac

Bra

Un "*bra*" es el componente dual de un vector, cuando se escribe en términos completos como bracket produce un número complejo. $\langle .|. \rangle \in \mathbb{C}$. El "*bra*" es el adjunto del vector, así:

$$\langle a| = (|a\rangle)^\dagger \quad (27)$$

Hermítico conjugado de un ket

Si usamos la notación de *kets* en términos de vector columna, entonces el adjunto puede verse como el transpuesto complejo, esta operación se llama el *Hermítico conjugado*.

$$\vec{a} = \begin{bmatrix} a_x \\ a_y \\ a_z \end{bmatrix} = [a_x^* \quad a_y^* \quad a_z^*] \quad (28)$$

Representación de estados: Producto interno en notación de Dirac

En la notación de Dirac el producto interno o producto escalar, escrito como $\langle .|. \rangle$ es la amplitud de probabilidad.

El número complejo $\langle u|v \rangle$ se denomina producto interno de $|u\rangle, |v\rangle \in \mathbb{C}^n$. Si

$$|u\rangle = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \quad (29)$$

Representación de estados

$$|v\rangle = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \quad (30)$$

El producto interno lo definimos como:

$$\langle u|v\rangle = \begin{bmatrix} a_1^* & a_2^* & a_3^* & \cdot & \cdot & a_n^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = \sum_{i=1}^n a_i^* b_i \quad (31)$$

Representación de estados

- $\langle u|v\rangle = (\langle u|v\rangle)^\dagger = \overline{\langle v|u\rangle}$
- $\langle u|u\rangle = \sum_{i=1}^n |a_i|^2$ es un número real (esta propiedad se probó anteriormente).
- $\langle u|u\rangle \geq 0$ y $\langle u|u\rangle = 0$ si y sólo si $|u\rangle = 0$

Cualquier vector arbitrario puede escribirse como una superposición lineal de estados bases:

$$v = \sum_i \alpha_i e_i \quad (32)$$

Superposición lineal de estados base

$$v = \sum_i \alpha_i e_i \quad (33)$$

Los coeficientes se pueden determinar usando el producto interno:

$$\langle e_k | v \rangle = \langle e_k | \sum_i \alpha_i e_i \rangle = \sum_i \alpha_i \langle e_k | e_i \rangle = \alpha_k \quad (34)$$

Linealidad en el bra, no linealidad en el ket

Un elemento interesante de este producto interno, dado por $\langle u|v\rangle = \langle v|u\rangle^*$ tenemos linealidad en el bra $\langle u|$ así:

$$\langle u|c_1 v_1 + c_2 v_2\rangle = c_1 \langle u|v_1\rangle + c_2 \langle u|v_2\rangle \quad (35)$$

Esta ecuación se cumple para cualquier tipo de constantes complejas c_1, c_2 .

Tenemos no linealidad en el ket $|v\rangle$, probemos:

$$\langle c_1 u_1 + c_2 u_2|v\rangle = c_1^* \langle u_1|v\rangle + c_2^* \langle u_2|v\rangle \quad (36)$$

Ortogonalidad y Norma de vectores

Dos vectores para los cuales se cumple $\langle u|v\rangle = 0$ son ortogonales. La norma se definirá como $|v|^2 = \langle v|v\rangle$ y la desigualdad de Schwarz para cualquier par de vectores se escribirá como: $|\langle u|v\rangle| \leq |u||v|$. Si tomamos la ecuación anterior y escribimos un término extra a la derecha, tendremos:

$$\langle \alpha_1 a_1 + \alpha_2 a_2 | b \rangle = \alpha_1^* \langle a_1 | b \rangle + \alpha_2^* \langle a_2 | b \rangle = (\alpha_1^* \langle a_1 | + \alpha_2^* \langle a_2 |) | b \rangle \quad (37)$$

De aquí obtenemos una regla simple que nos permite pasar de los kets a los bra y lo contrario, así:

$$|v\rangle = \alpha_1 |a_1\rangle + \alpha_2 |a_2\rangle \leftrightarrow \langle v| = \alpha_1^* \langle a_1| + \alpha_2^* \langle a_2| \quad (38)$$

Vectores base

Tomemos los ket base $|e_i\rangle = \text{ket } i$, de decir, llamemos los vectores base sólo como $\text{ket } i$, la condición de ortonormalidad de la base la podemos escribir como $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$, entonces un vector v se puede expandir en la base $\text{ket } i$ como:

$$|v\rangle = \sum_i |i\rangle \alpha_i \quad (39)$$

Pero como se vio en una ecuación anterior,
 $\langle e_k|v\rangle = \langle e_k|\sum_i \alpha_i e_i\rangle = \sum_i \alpha_i \langle e_k|e_i\rangle = \alpha_k$, es decir, $\alpha_k = \langle k|v\rangle$
entonces obtenemos el resultado final:

$$|v\rangle = \sum_i |i\rangle \langle i|v\rangle \quad (40)$$