Capítulo 1

Introducción

Este capítulo es una introducción al formalismo. Recordemos que el curso se basó fuertemente en el libro de Jon Jun Sakurai [bien escrito?]. La mecánica cuántica relativista desemboca en la teoría de campos. Decir quizás que hay que, de alguna manera, olvidar todo lo anterior de la física clásica (hasta nuevo aviso) porque esto conviene pensarlo de otra manera, será más abstracto. Los sistemas, que serán muy sencillos, tendrán propiedades muy particulares, que luego se conectarán con la física clásica en el límite apropiado. La mecánica cuántica relativista añade más información además de corregir la clásica.

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

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

donde acá está metido el magnetón de Bohr

$$\mu_B = -\frac{e\hbar}{2m_ec}.$$

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

$$f_z \propto -\mu_z$$



Figura 1.1

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

Uso átomos de plata que son neutros eléctricamente así no tengo efecto Hall.



Figura 1.2

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

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

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

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 entre sí. 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

Al medir uno la información cuántica del otro se pierde.



Figura 1.3

la idea de que podamos pensar en spín como un ente vectorial en 3D. Mediante una analogía con polarización de luz vemos que es necesario meter al spín es un espacio vectorial de dimensión 2 pero con coeficientes complejos.



Figura 1.4

Estos esquemas de las últimas figuras operan como polarizadores; permiten separar las partículas seleccionando por spin.

1.1.1 Polarización de luz

Consideremos una onda electromagnética en la dirección de \hat{z} , polarización en \hat{x} ,

$$\boldsymbol{E} = E_0 \; \hat{\boldsymbol{x}} \; \mathrm{e}^{i(kz - \omega t)} \qquad \qquad \boldsymbol{E} = E_0 \; \hat{\boldsymbol{y}} \; \mathrm{e}^{i(kz - \omega t)}$$

y la polarización en $\,\hat{y}.$ Si incidimos en un cristal birrefringente con luz polarizada



se tienen dos estados. Este sistema es similar a lo que se vio previamente. A la salida tengo dos estados. Lo que entrará será

$$\mathbf{E} = E_0(\hat{x} + \hat{y}) e^{i(kz - \omega t)}$$

y la analogía me lleva a que polarización de luz en \hat{x} y \hat{y} equivalen a S_z^+ y S_z^- , respectivamente. Repetimos los experimentos, pero ahora con luz.

Matemáticamente el filtro en \hat{x} es un ente que lo que hace es proyectar la luz entrante en \hat{x} .

Los tres casos entonces corresponden a:



No hay efecto neto. Opera como un filtro en $~\hat{x}$ del modo $(\pmb{E}\cdot~\hat{x})~\hat{x}$ y lo que sale es $E_0~\hat{x}~{\rm e}^{i(kz-\omega t)}$

2

En este caso el filtro a $\pi/4$ lo que hace es proyectar en \hat{x}' , \hat{y}'



Se tienen a la salida $E_0(\hat{x} \cdot \hat{x}')\hat{x}$ donde

$$\hat{x}' = \frac{1}{\sqrt{2}} \, \hat{x} + \frac{1}{\sqrt{2}} \, \hat{y}$$
 $\hat{y}' = -\frac{1}{\sqrt{2}} \, \hat{x} + \frac{1}{\sqrt{2}},$

de manera que S_x^+ equivale a \hat{x}' y S_x^i equivale a \hat{y}' .

3

Aquí se ve que filtrar dos veces es incompatible con el electromagnetismo. A la salida se tiene $E_0(\hat{x}'\cdot\hat{x})\hat{x}$, de modo que aparece una componente que no estaba presente.



Entonces

$$\boldsymbol{E} = E_0 \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \ \hat{x} \cos((kz - \omega t)) + \frac{1}{\sqrt{2}} \ \hat{y} \cos((kz - \omega t)) \right) = E_0 \left(\frac{\hat{x} \pm i \ \hat{y}}{\sqrt{2}} \right) \mathrm{e}^{i(kz - \omega t)}$$

de manera que con un cristal birrefringente que separe izquierda-derecha en luz polarizada circular puedeo continuar la equivalencia $S_y^+ \equiv {\rm right} \ {\rm y}$ $S_y^- \equiv {\rm left} \ {\rm y}$ tenemos seis estados pero son solo dos los independientes.

Hacen falta vectores complejos para describir sistemas cuánticos. Ya en este sencillo caso de analogía luz-spin vemos que la descripción completa del problema no puede hacerse en términos de vectores con coeficientes reales. Necesitamos un espacio complejo.

El problema del spin es sencillo porque es discreto y de dos estados. La amplitud de probabilidad será algo como

$$A \sim \hat{i} \cdot \hat{j}$$

donde j es el filtro. Luetgo la probabilidad es

$$P = |A|^2 = (\hat{i} \cdot \hat{j})(\hat{i} \cdot \hat{j})^*.$$

Para operar construiremos un formalismo.

1.1.2 El formalismo

El formalismo para la mecánica cuántica incluirá

- Estados
- Productos entre estados (propiedades matemáticas)
- Operadores, que llevan a observables
- Postulados de la mecánica cuántica

Para el caso del spin se definen

$$S = \frac{1}{2} \qquad \qquad S_z^+, S_z^-$$

y se definen los kets $| \rangle$ que tendrán toda la información. Inventados por P.A.M. Dirac. No son otra cosa que vectores con coeficientes complejos. La base de polarización (estados) será

$$|S_z;+\rangle \qquad |S_z;-\rangle$$

y entonces $|S_x;+\rangle$ es una combinación lineal de 1,2 anteriores. Así

$$\begin{split} |S_x;+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \, |S_z;+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \, |S_z;+\rangle \\ |S_x;-\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} \, |S_z;+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \, |S_z;-\rangle \\ |S_y;+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \, |S_z;+\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} \, |S_z;-\rangle \\ |S_y;-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \, |S_z;+\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} \, |S_z;-\rangle \end{split}$$

aunque probar esto no es ninguna boludez.

1.2 Algebra?

El ket contiene toda la información cuántica del estado. Da el estado físico del sistema. Cumplen las siguientes propiedades

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

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

$$\begin{split} \left|a\right\rangle, \left|a'\right\rangle &\Leftrightarrow \left\langle a\right|, \left\langle a'\right| \\ \left|a\right\rangle + \left|b\right\rangle &\leftrightarrow \left\langle a\right| + \left\langle b\right| \qquad c \left|a\right\rangle \leftrightarrow c^* \left\langle a\right| \\ c_a \left|a\right\rangle + c_b \left|b\right\rangle &\leftrightarrow c_a^* \left\langle a\right| + c_b^* \left\langle b\right| \end{split}$$

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 estándard del álgebra del siguiente modo

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

bra
$$\sim$$
 vector fila $\langle x| = (1\ 0)$

y habiendo definido esta base escribimos, por ejemplo

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

y del mismo modo

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

La trasposición opera como en álgebra, transmutando de ket a bra y viceversa.

$$\hat{x}' = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \qquad (\hat{x}')^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 \ 0)$$

El producto interno tiene las siguientes propiedades:

- 1. $\langle \beta \mid \alpha \rangle = \langle \beta \mid \alpha \rangle^*$ luego $\langle \alpha \mid \alpha \rangle \in \mathbb{R}$
- 2. $\langle \alpha \mid \alpha \rangle \geq 0$ 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

La primera propiedad busca que podamos darle significado probabilístico. El producto $\langle \alpha \, | \, \alpha \rangle$ da la norma al cuadrado.

EJEMPLO 2.1 Veamos que el estado de spin S_x^+ está normalizado

Para ello escribimos su expresión en términos de los estados S_z y aplicamos dual conjugado. Luego,

$$\begin{split} \left\langle S_x; + \mid S_x; + \right\rangle &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle S_z; + \right| + \frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle S_z; - \right| \right) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \left| S_z; + \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left| S_z; - \right\rangle \right) \\ \left\langle S_x, + \mid S_x, + \right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle S_z; + \mid S_z; + \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle S_z; + \mid S_z; - \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle S_z; - \mid S_z; + \right\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle S_z; - \mid S_z; - \right\rangle = 1 \end{split}$$

Recordemos que en la formulación de mecánica cuántica que se utilizó en anteriores cursos, F4, se tenían funciones de onda que se pueden ver como una notación relacionada con kets y bras a través del producto interno.

$$\langle \beta \, | \, \alpha \rangle = \int d^3 x \, \phi_{\beta}^*(\boldsymbol{x}) \, \phi_{\alpha}(\boldsymbol{x})$$

1.2.1 Operadores

A cada observable lo representaremos por un operador. Hay operaradores que no vienen de observables.

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

un operador sobre un ket da otro ket y sobre un bra da otro bra. Notemos que en este último caso opera a izquierda. Por el momento se trabajará con operadores lineales.

La transformación entre operadores se da con

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

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

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

En mecánica cuántica todos los observables serán representados por operadores hermíticos.

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
- $(XY)^{\dagger} = Y^{\dagger}X^{\dagger}$
- $\hat{0} |\alpha\rangle = 0$ $\forall |\alpha\rangle$; $\hat{0} \equiv \text{operador nulo}$
- $\bullet \ \hat{X}(c_1\left|\alpha\right>+c_2\left|\beta\right>)=c_1\hat{X}\left|\alpha\right>+c_2\hat{X}\left|\beta\right>$

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

1.2.2 Sandwichs

Coloquialmente encerrar un operador operando sobre un ket (bra) con un bra (ket). Se obtiene un escalar

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

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

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

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.

Las mediciones se pensarán como proyectar sobre autoestados.

1.2.3 Producto externo

Es un nuevo tipo de producto entre vectores.

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

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 que

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

es un nuevo operador, 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 $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$, de manera que aplicar dos veces un proyector no cambia nada. 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,

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

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.

EJEMPLO 2.2 Traspuesto de un producto externo

Queremos ver que si $X=|\beta\rangle\langle\alpha|$, entonces $X^{\dagger}=|\alpha\rangle\langle\beta|$. Hacemos operar sobre estados arbitrarios, y sabiendo que valen

$$\left\langle a\,|\,X\,|\,b\right\rangle = \left\langle b\,|\,X^{\dagger}\,|\,a\right\rangle^{*} \qquad \qquad \left\langle a\,|\,X\,|\,b\right\rangle^{*} = \left\langle b\,|\,X^{\dagger}\,|\,a\right\rangle$$

se tiene, reemplazando la definición de X,

$$\left\langle a\left|\left(\left|eta
ight
angle \left\langle lpha
ight|
ight)\left|b
ight
angle ^{st}=\left\langle b\left|\left(\left|eta
ight
angle \left\langle lpha
ight|
ight)^{\dagger}\left|a
ight
angle$$

$$\left\langle a \mid \beta \right\rangle^* \left\langle \alpha \mid b \right\rangle^* = \left\langle \beta \mid a \right\rangle \left\langle b \mid \alpha \right\rangle = \left\langle b \mid \alpha \right\rangle \left\langle \beta \mid a \right\rangle = \left\langle b \mid (|\beta\rangle \left\langle \alpha |) \mid a \right\rangle$$

y comparando este último resultado con el de la línea anterior, vemos que se verifica

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

EJEMPLO 2.3 Ejemplo sencillo 2D

Consideramos versores en el plano, vectores columna,

$$\hat{X} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \qquad \hat{Y} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

que en sus versiones dagueadas pasan a ser vectores fila

$$\hat{X}^\dagger = (1\ 0) \qquad \qquad \hat{Y}^\dagger = (0\ 1)$$

Luego, los productos que podemos hacer corresponden a las operaciones matriciales de vector por vector, resultando en número o matriz dependiendo del orden

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

donde instamos al lector a que note la diferencia de dimensión en los resultados. En la notación de Dirac estos versores serían $|x\rangle$, $|y\rangle$ y sus correspondientes bras. Luego,

$$\langle x | x \rangle = \langle y | y \rangle = 1,$$
 $\langle x | y \rangle = \langle y | x \rangle = 0$

y las matrices serían los provectores

$$P_x \equiv \left| x \right\rangle \left\langle x \right|, \qquad \qquad P_y \equiv \left| y \right\rangle \left\langle y \right|.$$

Para un estado arbitrario $|\alpha\rangle = \alpha_x |x\rangle + \alpha_y |y\rangle$, si uso el proyector P_x se tendrá

$$P_x |\alpha\rangle = (|x\rangle \langle x|)(\alpha_x |x\rangle + \alpha_y |y\rangle)$$

$$P_{x}\left|\alpha\right\rangle = \alpha_{x}\left|x\right\rangle\left\langle x\left|\,x\right\rangle + \alpha_{y}\left|x\right\rangle\left\langle x\left|\,y\right\rangle = \alpha_{x}\left|x\right\rangle.$$

Del mismo modo se obtiene $P_y | \alpha \rangle = \alpha_y | y \rangle$. Si sumo ambos proyectores obtengo la identidad

$$\left(P_x+P_y\right)|\alpha\rangle\equiv I\left|\alpha\right\rangle=|\alpha\rangle\,,$$

y vemos que la identidad no hace nada.

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 spín 1/2 sólo tiene dos estados: up y down.

Hay otro producto más, entre dos bras o dos kets, que se llama producto tensorial y se representa como

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

que es un producto entre kets de espacios de Hilbert diferentes; el resultado no es ni un bra ni un ket. Digamos que es una notación.

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

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,

$$\{|i\rangle\}$$
 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, dado un ket

$$|\phi\rangle = a|1\rangle + b|2\rangle + c|3\rangle$$

se lo normaliza con

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\langle \phi \, | \, \phi \rangle} \, |\phi\rangle$$

lo que significa que

$$|\psi\rangle = a'|1\rangle + b'|2\rangle + c'|3\rangle$$
 $|a'|^2 + |b'|^2 + |c'|^2 = 1$

Si tenemos un ket normalizados, $|\phi\rangle=a\,|1\rangle+b\,|2\rangle$ y su bra $\langle\phi|=a^*\,\langle1|+b^*\,\langle2|,$ entonces

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

$$a^* a \langle 1 \mid 1 \rangle + b^* a \langle 2 \mid 1 \rangle + a^* b \langle 1 \mid 2 \rangle + b^* b \langle 2 \mid 2 \rangle = |a|^2 + |b|^2 = 1$$

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

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

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.

Lo siguiente debiera ser amparado por un título como "propiedades de operadores hermíticos".

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

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

de manera que

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

Me gusta más la otra forma, que es meter otro a'' así

$$\langle a'' \mid A \mid a' \rangle = a' \langle a'' \mid a' \rangle \qquad \qquad \langle a'' \mid A^{\dagger} \mid a' \rangle = a''^* \langle a'' \mid a' \rangle$$

de manera que como

$$(a' - a''^*) \langle a'' \mid a' \rangle = 0,$$

si $|a'\rangle = |a\rangle$ entonces $a' = a'^*$ y los autovalores son reales. En cambio si $|a'\rangle \neq |a''\rangle$ se tiene $a'\neq a''$ entonces $\langle a''|a'\rangle = 0$ y los autoestados del operador son perpendiculares. Ya está abajo esto.

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

$$\left|\alpha\right\rangle = \sum_{i}^{N}\left|a_{i}\right\rangle\left\langle a_{i}\right|\left|\alpha\right\rangle = \sum_{i}^{N}c_{i}\left|a_{i}\right\rangle = \mathbb{1}\left|\alpha\right\rangle$$

pues

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

y además

$$A\left|a'\right\rangle = a'\left|a'\right\rangle \qquad A\left|a''\right\rangle = a''\left|a''\right\rangle \Rightarrow A(\left|a'\right\rangle - \left|a''\right\rangle) = a'\left|a'\right\rangle - a''\left|a''\right\rangle$$

$$\langle a'' \mid A \mid a' \rangle = a' \langle a'' \mid a' \rangle$$
 $\langle a' \mid A \mid a'' \rangle = a'' \langle a' \mid a'' \rangle$

y ahora conjugando

$$\langle a'' \mid A \mid a' \rangle^* = a' \langle a'' \mid a' \rangle^* \qquad \langle a'' \mid A \mid a' \rangle = a'' \langle a'' \mid a' \rangle$$

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

$$(a' - a'') \langle a'' | a' \rangle = 0$$
 $\Rightarrow \langle a'' | a' \rangle = 0$ si $a' \neq a''$

O sea, hemos probado que los autovectores correspondientes a diferentes autovalores son ortogonales.

1.3.2 Combinación lineal de autoestados

Podemos escribir

$$\langle a'' \mid a' \rangle = \delta_{a'a''}$$

que es la delta de Kronecker. Postulo que forman una base completa, y que un estado $|\alpha\rangle$ se puede escribir en función de la base $|a_i\rangle$ de esta forma

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} C_{a'} |a'\rangle$$
.

Ahora quisiéramos ver quién es el coeficiente $C_{a'}$. Para ello multiplicamos por un bra arbitrario

$$\langle a_j | \alpha \rangle = \sum_{i=1}^{N} C_i \underbrace{\langle a_j | a_i \rangle}_{\delta_{ij}} = C_j,$$

de modo que es

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

o bien, en términos del operador Λ [?],

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

de modo que si la base es completa debe ser

$$\sum_{i=1}^{N} |a_i\rangle \left\langle a_i | \equiv \mathbb{1}.\right.$$

Todos estos resultados surgen de suponer que los autoestados son una base completa. Es análogo a la proyección de un vector en un sistema coordenado: $V = \sum_i (V \cdot \hat{e}_i) \hat{e}_i$.

Asimismo, considerando la normalización de estados

$$\left\langle \alpha \,|\, \alpha \right\rangle = 1 = \left\langle \alpha |\sum_{a'} |a'\rangle \left\langle a' \,|\, \alpha \right\rangle = \sum_{a'} \left\langle \alpha \,|\, a'\right\rangle \left\langle a' \,|\, \alpha \right\rangle$$

o bien

$$\langle \alpha \, | \, \alpha \rangle = 1 = \sum_{a'} C_{a'}^* C_{a'} = \sum_{a'} |C_{a'}|^2.$$

1.3.3 Operadores y matrices

Un operador se puede representar matricialmente como

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

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

$$X_{ij} = \left\langle a_i \, \middle| \, X \, \middle| \, a_j \right\rangle$$

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.

$$\left\langle a_{i}\left|X\right|a_{j}\right\rangle ^{*}=\left(\left\langle a_{j}\right|X^{\dagger}\right)\left(\left|a_{i}\right\rangle \right)=\left\langle a_{j}\left|X\right|a_{i}\right\rangle$$

y entonces

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

de modo que

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

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

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

La traza será

$$\operatorname{tr} (A) = \sum_{i=1}^{N} \langle a_i | A | a_i \rangle.$$

1.3.4 Cambio de base

Para cambiar de base metemos un uno (1) escrito como suma de proyectores,

$$X\left|b_{j}\right\rangle = \mathbb{1}\left|X\left|b_{j}\right\rangle = \sum_{i=1}^{N}\left|a_{i}\right\rangle\left\langle a_{i}\left|X\right|b_{j}\right\rangle = \sum_{i=1}^{N}C_{ij}\left|a_{i}\right\rangle$$

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

$$\left|b_{j}\right\rangle = \sum_{i=1}^{N} \left|a_{i}\right\rangle \left\langle a_{i} \left|b_{j}\right\rangle \right|$$

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

EJEMPLO 3.1 Ejercicio 2

Tenemos la base $\{|+\rangle\,, |-\rangle\},$ o sea un espacio de Hilbert de dimensión 2. Se considera ortonormal de manera que

$$\langle + | + \rangle = \langle - | - \rangle = 1$$
 $\langle + | - \rangle = 0$

Luego, se tiene

$$S_{x}=\frac{\hbar}{2}(\left.\left|+\right\rangle \left\langle -\right|+\left|-\right\rangle \left\langle +\right|\right.)$$

Los elementos de matriz serán

$$(S_x)_{11} = \left\langle + | \left(S_x \right) | + \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \left\langle + | \left(\left| + \right\rangle \left\langle - \right| + \left| - \right\rangle \left\langle + \right| \right) | + \right\rangle = 0,$$

dado que ambos miembros dan $\langle + | - \rangle$. Asimismo,

$$S_x\left|+\right\rangle = \frac{\hbar}{2}(\left|+\right\rangle\left\langle-\right|+\left|-\right\rangle\left\langle+\right|)\left|+\right\rangle = \frac{\hbar}{2}\left|-\right\rangle$$

у

$$S_x \left| - \right\rangle = rac{\hbar}{2} \left| + \right\rangle.$$

Matricialmente

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \, \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

de manera que

$$S_x \left| + \right\rangle = \frac{\hbar}{2} \, \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

EJEMPLO 3.2 Ejercicio 6

Tenemos un espacio de kets generado por $\{|a'\rangle\}$ ortogonales, siendo Ahermítico, de manera que los ason reales.

i) Queremos probar que $\Pi_{a'}(A-a'\mathbb{1})$ es el operador nulo. Luego, supongamos que

$$\Pi_{a'}(A - a'\mathbb{1}) \equiv O$$

y entonces verificará

$$\langle a' \mid O \mid a'' \rangle = O_{a'a''} = 0.$$

Tomemos

$$\Pi_{a'}(A-a'\mathbb{1})\left|a''\right\rangle = \Pi_{a'}A\left|a''\right\rangle - a\mathbb{1}\left|a''\right\rangle = \Pi_{a'}(\left|a''\right\rangle + a')\left|a''\right\rangle$$

pero lo que opera sobre el ket es nulo.

Por otra parte, como $(A - a_n \mathbb{1}) |a''\rangle$ se puede escribir

$$(A-a_{n_2}\mathbb{1})(A-a_{n_1}\mathbb{1})\left|a''\right\rangle(a''-a_n)$$

y sigue pasadno de modo que al final se obtiene

$$|a''\rangle \prod_{a'} (a''-a').$$

ii) Y ahora, qué significa el siguiente operador

$$\Pi_{a'\neq a''} \frac{(A-a''1)}{(a'-a'')}$$

Aplicamos a un ket $|a\rangle$,

$$\Pi_{a'\neq a''}\frac{(A-a''\mathbb{1})}{(a'-a'')}\left|a\right\rangle = \Pi_{a'\neq a''}\frac{(a-a'')}{(a'-a'')}\left|a\right\rangle$$

y será nulo sí y sólo si $a \neq a''$, de manera que es una construcción de la delta de Kronecker,

$$\Pi_{a'\neq a''}\frac{(A-a''\mathbb{1})}{(a'-a'')}=\delta_{aa'}|a'\rangle$$

Es un proyector de todos los elementos en $|a'\rangle$ lo que siempre da cero para los de la base salvo cuando es a'=a.

EJEMPLO 3.3 Ejercicio 8

Consideramos $\mathbf{S} \cdot \hat{n}$ donde $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$ o sea un vector de operadores y el versor es el usual de esféricas en términos de los ángulos.

$$\hat{n} = (\sin \beta \cos \alpha, \sin \beta \sin \alpha, \cos \beta).$$

EJEMPLO 3.4 Ejercicio 11

Consideremos la matriz M hermítica y la base $\{|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle\}$ que tendrá por ello autovalores relaes y autovectores ortogonales.

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Los autovalores saldrán de

$$\left|\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -\lambda & 1 & 0\\ 1 & -\lambda & 1\\ 0 & 1 & -\lambda \end{pmatrix}\right| = -\lambda(\lambda^2 - 1) = 0$$

que dará $\lambda = 0, 1, -1$. Los autovectores salen de resolver

$$\begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1^{(1)} \\ v_2^{(1)} \\ v_3^{(1)} \end{pmatrix} = 0$$

y haciendo $v_2^{(1)}=0$ se tiene $v_1^{(1)}=-v_3^{(1)}$ y luego

$$v^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\0\\-1 \end{pmatrix}$$

con $\left\langle v^{(1)} \left| \, v^{(1)} \right\rangle = 1$ y así siguiendo con los otros vectorcillos, resulta

$$A = \left[v^{(1)}v^{(2)}v^{(3)}\right] = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

1.3.5 Representación diagonal

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

$$A = \sum_{i}^{N} \sum_{j}^{N} |a_{i}\rangle \langle a_{i} | A | a_{j}\rangle \langle a_{j} | = \sum_{i}^{N} \sum_{j}^{N} a_{j} |a_{i}\rangle \langle a_{i} | a_{j}\rangle \langle a_{j} | = \sum_{i}^{N} \delta_{ij} a_{j} |a_{i}\rangle \langle a_{j} | = \sum_{i}^{N} a_{i} \mathbb{1}$$

$$\langle a_{1} \quad 0 \quad \dots \quad 0 \rangle$$

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

y $a_1, a_2, ..., a_n$ 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

$$|a_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ . \\ . \\ N \end{pmatrix} \qquad |a_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ . \\ . \\ N \end{pmatrix} \qquad |a_n\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ . \\ . \\ 1 \end{pmatrix}$$

luego

$$\begin{split} |\alpha\rangle = \sum_{i} |a_{i}\rangle \, \langle a_{i} \, | \, \alpha\rangle = \langle a_{1} \, | \, \alpha\rangle \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ . \\ . \\ N \end{pmatrix} + \langle a_{2} \, | \, \alpha\rangle \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ . \\ . \\ N \end{pmatrix} + ... + \langle a_{n} \, | \, \alpha\rangle \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ . \\ . \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle a_{1} \, | \, \alpha \rangle \\ \langle a_{2} \, | \, \alpha \rangle \\ ... \\ \langle a_{n} \, | \, \alpha \rangle \end{pmatrix} \end{split}$$

y por DC se tiene

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

У

$$\langle \alpha \, | \, \alpha \rangle = 1 = \overbrace{\hspace{1cm}}^{1 \times N} \overbrace{\hspace{1cm}}^{N \times 1} = \square$$

que es un escalar. El producto entre otros dos estados arbitrarios

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

otra vez un escalar.

Para un operador X se tiene la siguiente representación

$$X = \sum_{i}^{N} \sum_{j}^{N} \left| a_{i} \right\rangle \left\langle a_{i} \left| X \right| a_{j} \right\rangle \left\langle a_{j} \right| = \sum_{i}^{N} \sum_{j}^{N} \left\langle a_{i} \left| X \right| a_{j} \right\rangle \left| a_{i} \right\rangle \left\langle a_{j} \right|$$

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

$$X = \sum_{i}^{N} \sum_{j}^{N} X_{ij} |a_{i}\rangle \langle a_{j}|,$$

donde

$$\left|a_{i}\right\rangle \left\langle a_{j}\right|=\begin{pmatrix}0\\ \dots\\1\\ \dots\\0\end{pmatrix}\left(\begin{array}{c}0....1....0\end{array}\right).$$

Para un operador que actúa sobre un estado, dando otro estado, se tiene

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

que es el producto de una matriz por un vector

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

Para el producto externo será

$$|\beta\rangle\langle\alpha| = \sum_{a',a''} |a''\rangle\langle a'' |\beta\rangle\langle\alpha|a'\rangle\langle a'|$$

y este producto de brakets es la versión matricial del operador

$$\begin{pmatrix} \langle a_1 \mid \beta \rangle \, \langle a_1 \mid \alpha \rangle^* & \langle a_1 \mid \beta \rangle \, \langle a_2 \mid \alpha \rangle^* & \dots \\ \langle a_2 \mid \beta \rangle \, \langle a_1 \mid \alpha \rangle^* & \langle a_2 \mid \beta \rangle \, \langle a_2 \mid \alpha \rangle^* & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

En la base en la cual un operador es diagonalizable resulta sencilla su matriz:

$$A = \sum_{a',a''} \left| a'' \right\rangle \left\langle a'' \left| A \right| a' \right\rangle \left\langle a' \right| = \sum_{a'} a' \left| a' \right\rangle \left\langle a' \right| = \sum_{a'} a' \Lambda_{a'},$$

en términos del proyector.

Los elementos usados en el formalismo (bras, kets, etc.) pueden pensarse como vectores (fila o columna) y matrices.

1.4 Sistemas de spín 1/2

Hay dos estados posibles de spin,

$$|S_z;+\rangle = |S_z = \hbar/2\rangle \equiv |+\rangle \qquad \qquad |S_z;-\rangle = |S_z = -\hbar/2\rangle \equiv |-\rangle$$

de manera que la dimensión del espacio vectorial es 2. Entonces, la identidad será

$$\mathbb{1} = \left| + \right\rangle \left\langle + \right| \; + \; \left| - \right\rangle \left\langle - \right|$$

Luego, en la representación de S_z se tiene

$$S_z\left|+\right\rangle = \frac{\hbar}{2}\left|+\right\rangle \qquad \qquad S_z\left|-\right\rangle = \frac{\hbar}{2}\left|-\right\rangle,$$

Acá hay que diseñar unos +,- que habiten dentro de los brakets pues estos se ven feo. que viene de que el operador es

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \left(\; |+\rangle \left< +| \; - \; |-\rangle \left< -| \; \right>. \right.$$

Luego,

$$S_{+} \equiv \hbar \left| + \right\rangle \left\langle + \right| \qquad S_{-} \equiv \hbar \left| - \right\rangle \left\langle - \right|$$

donde $S_{-}=S_{+}^{\dagger}$ son operadores de subida y de bajada. que actuarán subiendo/bajando el spin o dando el ket nulo. Así,

$$S_{+}\left|-\right\rangle = \hbar\left|+\right\rangle \qquad \qquad S_{-}\left|+\right\rangle = \hbar\left|-\right\rangle \qquad \qquad S_{+}\left|+\right\rangle = S_{-}\left|-\right\rangle = 0$$

En la representación vectorial serán

$$|+\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix} \qquad \qquad |-\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix}$$

de manera que los proyectores

$$\Lambda_{+} = \left| + \right\rangle \left\langle + \right| = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Lambda_- = \left| - \right\rangle \left\langle - \right| = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

luego

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

Los operadores \pm serán

$$S_+ = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} (0 \ 1) = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \qquad S_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} (1 \ 0) = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

de modo que

$$S_+ \left| - \right\rangle = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \left| + \right\rangle.$$

Finalmente,

$$|S_x;\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|S_x;+\rangle \pm |S_x;-\rangle \right).$$

1.4.1 Cambio de base

Dados dos conjuntos $\{|a'\rangle\}, \{|b'\rangle\}$ base ortonormales y completos existe un \widehat{U} unitario tal que :

$$U^+U = UU^+ = 1$$
 con $|b_i\rangle = U|a_i\rangle$

Este operador de cambio de base será

$$U = \sum_{\ell} |b_{\ell}\rangle \left\langle a_{\ell} \right|$$

y actuando sobre un elemento de la base a,

$$U\left|a_{i}\right\rangle = \sum_{\ell}\left|b_{\ell}\right\rangle\left\langle a_{\ell}\left|\right.a_{i}\right\rangle = \left|b_{i}\right\rangle$$

Este operador U cumple la función de pasar entre bases

$$\underline{\underline{|a_\ell\rangle}}$$
 \longrightarrow $\underline{\underline{|b_\ell\rangle}}$ vieja base nueva base

o bien

$$|\text{nueva base}\rangle = U |\text{vieja base}\rangle$$
.

Notemos que

$$UU^{\dagger} = \sum_{k,\,\ell} \left| a^k \right\rangle \left\langle b^k \, \right| b^\ell \right\rangle \left\langle a^\ell \right| = \sum_k \left| a^k \right\rangle \left\langle a^k \right| = \mathbb{1}$$

donde del segundo al tercer miembro se pasa por la ortogonalidad de la base b.

Veamos cómo transforma un ket genérico, usando que

$$\langle a^k | U | a^\ell \rangle = \langle a^k | \sum_j | b^j \rangle \langle a^j | a^\ell \rangle = \langle a^k | b^\ell \rangle.$$

Un ket arbitrario se escribirá como una combinación lineal de la base a, es decir,

$$|\alpha\rangle = \sum_{\alpha'} |a'\rangle \langle a' | \alpha\rangle$$

de modo que

$$\left\langle b_k \,|\, \alpha \right\rangle = \sum_{\ell} \left\langle b_k \,|\, a_\ell \right\rangle \left\langle a_\ell \,|\, \alpha \right\rangle = \sum_{\ell} \left\langle a_k \,|\, U^+ \,|\, a_\ell \right\rangle \left\langle a_\ell \,|\, \alpha \right\rangle = \left\langle a_k \,|\, U^+ \,|\, \alpha \right\rangle$$

e identificamos

$$\left\langle b^{k}\,\middle|\,a^{\ell}\right\rangle =\left\langle a_{k}\,\middle|\,U^{+}\,\middle|\,a_{\ell}\right\rangle$$

que nos convierte de

$$|\text{nueva base}\rangle = U^{\dagger} |\text{vieja base}\rangle.$$

Esta es la relación consistente con la anterior en términos de U [?].

Por otra parte, considerando otro operador X

$$\left\langle b_{i} \, \big| \, X \, \big| \, b_{j} \right\rangle = \sum_{\ell \, m} \left\langle b_{i} \, \big| \, a_{\ell} \right\rangle \left\langle a_{\ell} \, \big| \, X \, \big| \, a_{m} \right\rangle \left\langle a_{m} \, \big| \, b_{j} \right\rangle,$$

o bien,

$$\left\langle b_{i} \left| X \right| b_{j} \right\rangle = \sum_{\ell,m} \left\langle a_{i} \left| U^{+} \right| a_{\ell} \right\rangle \left\langle a_{\ell} \left| X \right| a_{m} \right\rangle \left\langle a_{m} \left| U \right| a_{j} \right\rangle$$

lo cual implica que

$$X_{|b\rangle}=U^{+}X_{|a\rangle}U,$$

que es una transformación de similaridad.

En matrices se puede poner como:

$$X'_{kl} = U^{\dagger}_{km} X_{mn} U_{nl}.$$

1.4.2 Mediciones y probabilidades

En mecánica cuántica medir es filtrar; de todos los autoestados posibles se selecciona uno de ellos. La medición perturba al sistema. Se miden variables dinámicas asociadas a observables. Como los autoestados de un observable \hat{A} son una base completa $\{|a_i\rangle\}$ entonces un sistema se hallará en una combinación lineal de autoestados de \hat{A} , o al menos eso puede pensarse.

antes de medir	Medición de \hat{A}	luego de medir
sistema en CL de autestados de \hat{A}		Salta a un autoestado de \hat{A}
sistema en autoestado de \hat{A}		Continúa en autoestado de \hat{A}

Puede verse pictóricamente la medición así:

$$|\alpha\rangle \longrightarrow |a'\rangle$$

el proceso de medición hace saltar $|\alpha\rangle$ hacia $|a'\rangle$, siendo el resultado de la medida el autovalor a'. Antes de medir no puedo saber a qué estado saltará y tampoco en qué estado se hallaba. Si antes de medir se hallaba en un autoestado, continúa manteniéndose allí

$$|a'\rangle \longrightarrow |a'\rangle$$

Lo que se puede determinar es la probabilidad de que se halle en cierto autoestado a' de acuerdo con

$$\operatorname{Prob}_{|a'\rangle} \equiv |\left\langle a' \,|\, \alpha\right\rangle|^2.$$

Si P=1 se halla en $|a'\rangle$ antes de saltar, si P=0 no se halla en $|a'\rangle$ antes de saltar. Este valor de Prob es mayor igual a cero y se verifica

$$\sum_{a'} \text{Prob}_{a'} = 1$$

si la probabilidad está correctamente normalizada.

Notamos que se puede escribir

$$P = \langle a' \mid \alpha \rangle \langle \alpha \mid a' \rangle = \langle \alpha \mid \Lambda_{a'} \mid \alpha \rangle$$

La base que diagonaliza a un operador es la de sus autoestados.

1.4.3 Valor de expectación

$$\langle \widehat{A} \rangle \equiv \langle \alpha \, | \, A \, | \, \alpha \rangle$$

c el valor de expectación siempre se refiere a un estado en particular.

$$\begin{split} \langle A \rangle &= \sum_{a',a''} \langle \alpha \, | \, a' \rangle \, \langle a' \, | \, A \, | \, a'' \rangle \, \langle a'' \, | \, \alpha \rangle \\ \langle A \rangle &= \sum_{a',a''} \langle \alpha \, | \, a' \rangle \, a'' \delta_{a'a''} \, \langle a'' \, | \, \alpha \rangle = \sum_{a''} a'' | \, \langle \alpha \, | \, a'' \rangle \, |^2 \\ \langle A \rangle &= \sum_{a',a''} = a'' \mathrm{Prob}_{|a''\rangle} \end{split}$$

Esto último tiene el sentido de una especie de promedio ponderado. Hasta repetir el cansancio el experimento el resultado tenderá a este valor de expectación.

1.4.4 Conmutadores

Dados dos operadores A, B, se definen, el conmutador

$$[A, B] \equiv AB - BA,$$

y el anticonmutador

$${A,B} \equiv AB + BA,$$

y se dice que dos observables conmutan si [A, B] = 0. Se dice que son compatibles si [A, B] = 0 y anticompatibles si se da la contrario, $[A, B] \neq 0$.

TEOREMA:

Sean dos observables compatibles y no degenerados, entonces los autoestados $\{|a'\rangle\}$ de A lo son también de B. Es decir que A y B tienen base de autoestados en común.

demostración:

$$\langle a' \mid AB - BA \mid a'' \rangle = 0$$

$$a' \langle a' \mid B \mid a'' \rangle - \langle a' \mid B \mid a'' \rangle a'' = (a' - a'') \langle a' \mid B \mid a'' \rangle = 0$$

entonces

$$\langle a' \mid B \mid a'' \rangle = 0$$

y B es diagonal en $\{|a'\rangle\}$. Luego, se ve que escribiendo B en términos de esta base y aplicando sobre un estado de la misma

$$B\left|a''\right\rangle = \sum \left|a'\right\rangle \left\langle a'\right|B\left|\left.a'\right\rangle \left\langle a'\right|a''\right\rangle = \left\langle a''\right|B\left|\left.a''\right\rangle \left|a''\right\rangle$$

por lo tanto la base de A diagonaliza a B, pero los autoestados tienen todos sus autovalores diferentes.

Los autoestados son iguales pero no los autovalores; con lo cual se utilizará la notación $|a',b'\rangle$ donde

$$A|a',b'\rangle = a'|a',b'\rangle$$
 $B|a',b'\rangle = b'|a',b'\rangle$

Si dos operadores no conmutan entonces no hay base común para ambos. Para ver que se debe cumplir esto supongamos que sí hay base común. Entonces, se tendrán

$$AB |a',b'\rangle = b'A |a',b'\rangle = b'a' |a',b'\rangle$$

$$BA|a',b'\rangle = a'B|a',b'\rangle = a'b'|a',b'\rangle$$

y estos dos renglones son iguales puesto que números escalares sí conmutan. Luego,

$$AB \mid \rangle = BA \mid \rangle$$

y entonces como esto significa que conmutan y partimos de la presunción en contrario, con lo cual este absurdo surge de asumir base en común; no la tienen. Por ende no los puedo medir con precisión. La medida del segundo afecta a la medición del primero.

1.4.5 Degeneración

Puede darse que haya varios g autoestados correspondientes a un mismo autovalor a'; entonces se dice que hay degeneración de orden g para el autoestado $|a'\rangle$

$$A |a'\rangle = a' |a'\rangle$$
 ; $i = 1, 2, ..., g$

y A tendrá una matriz de $m \times n$ bloques. En este caso no se puede decir que la base de A diagonalice a B.

Mejorar la matriz que está un asco

$$A = \begin{pmatrix} a'\mathbb{1} & 0 & & \\ 0 & a''\mathbb{1} & & \\ & & a''' & \\ & & & a^IV \end{pmatrix}$$

Los $|a_i'\rangle$ no dan información sobre los bloques correspondientes en la matriz de B. Necesito un conjunto de operadores que haga romper la degeneración para expresar unívocamente el estado del sistema. Se llama CCOC. Necesito que conmuten entre sí para que las mediciones tengan sentido. Un Conjunto Completo de Observables que Conmutan.



Si no conmutan entonces son incompatibles; la medición de uno hace saltar al sistema a un autoestado del otro y como no son comunes pierde sentido el concepto de medir. No tiene sentido la medición de algo si por el hecho de medir cambiamos lo que queremos medir. Al ser incompatibles sus mediciones de afectan mutuamente.

Los autovalores de algunos operadores podrán tener degeneración pero una combinación de los autovalores del CCOC, $|a'b'c'...\rangle$, determina el estado de forma única.

Dado un set CCOC, $\{A,B,C,D\}$, se etiquetarán $|K'\rangle \equiv |a'b'c'd'\rangle$ los autoestados, que es una variable colectiva. Se cumplirán

$$\begin{split} \left\langle K \,|\, K' \right\rangle &= \delta_{KK'} = \delta_{aa'} \delta_{bb'} ... \\ \sum_{K'} \left| K' \right\rangle \left\langle K' \right| &= \mathbb{1} \end{split}$$

Las únicas cosas que tiene sentido medir en MC son las variables asociadas a operadores en un CCOC.

Sean A,B compatibles sin degeneración, y consideremos la siguiente notación pictórica donde arriba digo qué mido y abajo qué obtengo. Entonces

$$|lpha
angle \begin{picture}(20,0) \put(0,0){\oodd} \put(0,0)$$

Veo que midiendo alternadamente uno y otro no salgo del autoestado $|K'\rangle$.

En cambio si A,B son compatibles pero con degeneración en el autoestado a' [?] se tiene

$$|\alpha\rangle \overset{\text{Mido A}}{\underset{a'}{\bigoplus}} \sum_{i=1}^g C_{a'}^{(i)} \left| a'b'(i) \right\rangle \overset{\text{Mido B}}{\underset{b'(j)}{\bigoplus}} C_{a'}^{(j)} \left| a'b'(j) \right\rangle \overset{\text{Mido A}}{\underset{a'(j)}{\bigoplus}} C_{a'}^{(j)} \left| a'b'(j) \right\rangle$$

Al medir A y obtener a' no tengo determinado el estado del sistema (medir A no me da información). Me hallaré en una CL de autoestados correspondientes al autovalor degenerado a'. Al medir luego B selecciono uno de los $|a'b'\rangle$ degenerados, el correspondiente a b'(j) pues B no está degenerado. Puedo volver a medir A pues el autoestado en que ha caído el fsistema permanece incólume.

Operadores y observables

Entonces siendo A un operador se dice que es un observable si el operador es hermítico, con lo cual sus autovalores serán reales, y si el conjunto de sus autoestados es una base. Usando la notación $|a,i\rangle$ para indicar un autoestado y su degeneración, se tiene una descomposición espectral

$$A = \sum_{a,i} a |a,i\rangle \langle a,i|$$

que se puede asociar a una matriz como

$$\begin{pmatrix} 1 & \dots & & \\ \dots & 2 & & \\ \dots & & 2 & \\ \dots & & & 3 \\ \dots & & & \end{pmatrix}$$

Luego,

$$A = 1 |1, 1\rangle \langle 1, 1| + 2 (|2, 1\rangle \langle 2, 1| + |2, 2\rangle \langle 2, 2|) + \dots$$

El espacio de los operadores es N, finito. En el caso de $N \to \infty$ hay que sumar algunas restricciones (me pregunto si tiene que ver con alguna

regularización para evitar infinitos). Se dice que A es normal si verifica $[A,A^{\dagger}]=0.$

1.4.6 Postulados de la mecánica cuántica

- 1. El estado de un sistema lo definimos con un ket $|\alpha\rangle\in\mathcal{H}$ y con $\langle\alpha\,|\,\alpha\rangle=1$
- 2. Asociamos a propiedades físicas (observables) operadores hermíticos \widehat{A} que operan sobre los kets. Los autokets $|a\rangle$ verifican :

$$\widehat{A}|a\rangle = a|a\rangle$$
,

y $\{|a\rangle\}$ es base del espacio de kets. El operador se puede expresar como

$$A = \sum_{a,i} a |a,i\rangle \langle a,i|$$

3. Al medir una cantidad física representada por el observable \widehat{A} obtenemos siempre un autovalor a'. Luego de medir, el estado del sistema es $|a\rangle$. Suponiendo un estado $|\Psi\rangle$, sobre el cual se mide A (obteniéndose a), se tendrá que inmediatamente después el estado de $|\Psi'\rangle$ según

$$\left|\Psi\right\rangle \underbrace{\overset{\text{Mido A}}{\bigoplus}}_{a'}\left|\Psi'\right\rangle = P_a\left|\Psi\right\rangle = \left|a\right\rangle\left\langle a\left|\Psi\right\rangle = \left(\left\langle a\left|\Psi\right\rangle\right)\left|a\right\rangle$$

Llevé al sistema a un autoestado de \widehat{A} . Ahora quizás deba ahora normalizar, es decir

No confundir la notación para proyector con la de probabilidad.

$$|\Psi'\rangle_{\text{norm}} = \frac{\langle a | \Psi \rangle}{\sqrt{\langle \Psi' | \Psi' \rangle}} |a\rangle$$

donde $\langle \Psi' \,|\, \Psi' \rangle = \langle \Psi \,|\, P_a P_a \,|\, \Psi \rangle = \langle \Psi \,|\, P_a \,|\, \Psi \rangle$, siendo la última igualdad porque P_a es un proyector y su cuadrado es él mismo. El esquema de arriba representa la frase "proyectar sobre la base de autoestados".

Dos posibilidades al medir. Si la probabilidad la nomenclamos como P(a) que es la probabilidad de medir el estado a, entonces

• Sin degeneración:

$$P(a) = |\langle a | \psi \rangle|^2$$

• Con degeneración:

$$P(a) = \sum_{i} |\langle a, i | \psi \rangle|^{2}$$

4. Las transformaciones espaciales se generan por p

$$[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

5. La evolución temporal la realiza H (el hamiltoniano).

Extrañamente el punto 4 estaba vacío. Raro.

1.4.7 Operador de dispersión

Se define la dispersión del operador A de acuerdo con

$$\Delta \widehat{A} \equiv \widehat{A} - \langle A \rangle \, \mathbb{1}$$

la dispersión será nula cuando el sistema se halle en un autoestado del operador \widehat{A} . Será no nula en caso contrario, cuando no se halle en un autoestado. Luego la dispersión cualitativamente nos dice "qué tan lejos" del autoestado nos hallamos.

$$\begin{split} \left\langle (\Delta A)^2 \right\rangle &= \left\langle (\widehat{A} - \left\langle A \right\rangle \mathbb{1})^2 \right\rangle = \left\langle A^2 - 2A \left\langle A \right\rangle + \left\langle A \right\rangle^2 \right\rangle = \\ &\left\langle A^2 \right\rangle - 2A \left\langle A \right\rangle^2 + \left\langle A \right\rangle^2 = \left\langle A^2 \right\rangle - \left\langle A \right\rangle^2 \end{split}$$

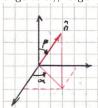
y la relación de dispersión generalizada

$$\left\langle (\Delta A)^2 \right\rangle \left\langle (\Delta B)^2 \right\rangle \geq \frac{1}{4} |\left\langle [A,B] \right\rangle|^2$$

se probará [?].

EJEMPLO 4.1 Ejercicio 9 guía 1

Espacio de spines de dimensión 2. Base $\{\ket{+},\ket{-}\}$. Consideramos un versor angular con ángulos α,β según se ilustra aquí abajo.



Del ejercicio 8 se sabe que

$$|\mathbf{S} \cdot \hat{n}; +\rangle = \cos(\beta/2) |+\rangle + \sin(\beta/2) e^{i\alpha} |-\rangle$$

Luego, como $\mathbf{S} \cdot \hat{n} | \mathbf{S} \cdot \hat{n}; \pm \rangle = \pm \hbar/2 | \mathbf{S} \cdot \hat{n}; \pm \rangle$ se tiene

$$P\left(\frac{\hbar}{2}\right) = |\langle S_x; + | \boldsymbol{S} \cdot \hat{n}; + \rangle|^2$$

donde usando que

$$|S_x;+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle + |-\rangle\right)$$

nos conduce a

$$P\left(\frac{\hbar}{2}\right) = \frac{1}{2}|\cos(\beta/2) + \sin(\beta/2) \, \mathrm{e}^{i\alpha}|^2$$

y usando $\alpha = 0, \beta = \gamma$ resultan en

$$P\left(\frac{\hbar}{2}\right) = \frac{1}{2} \left(1 + \sin \gamma\right).$$

En la parte b) se pide hallar $\Delta S_x^2=\left\langle S_x^2\right\rangle-\left\langle S_x\right\rangle^2$. Para ello usamos los hallazgos del ejercicio 2.

$$S_{x}=\frac{\hbar}{2}\left[\left|+\right\rangle \left\langle -\right|+\left|-\right\rangle \left\langle +\right|\right]$$

y luego

$$S_{x}^{2}=\frac{\hbar^{2}}{4}\left[\left|+\right\rangle \left\langle +\right|+\left|-\right\rangle \left\langle -\right|\right]=\frac{\hbar^{2}}{4}\mathbb{1}$$

Entonces,

$$\langle S_x^2 \rangle = \left[\cos(\gamma/2) \left< + \right| + \sin(\gamma/2) \left< - \right| \right] S_x^2 \left[\cos(\gamma/2) \left| + \right> + \sin(\gamma/2) \left| - \right> \right]$$

Se puede ver que

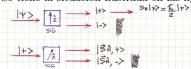
$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \gamma,$$

de manera que lo buscado es

$$(\Delta S_x)^2 = \frac{\hbar^2}{4} \cos^2 \gamma.$$

EJEMPLO 4.2 Ejercicio 10

Se tiene la situación ilustrada en las figuras bajo estas líneas



Por otra parte, la probabilidad será

$$P\left(\frac{\hbar}{2}\right)_{\hat{n}} = |\left\langle S_n, + \right| + \rangle|^2 = \cos^2\left(\frac{\beta}{2}\right)$$



Consiguientemente,

$$P\left(\frac{-\hbar}{2}\right)_{\hat{n}} = |\langle -|\mathbf{S}\cdot\,\hat{n}, +\rangle|^2 = \sin^2\left(\frac{\beta}{2}\right)$$

y la intensidad final

$$I_f = I_0 \, \cos^2 \left(\frac{\beta}{2}\right) \, \sin^2 \left(\frac{\beta}{2}\right).$$

EJEMPLO 4.3 Ejercicio 12

Consideramos una base $\{|a',b'\rangle\}$ ortonormal de autoestados de $A \cdot B$. La idea es que [A,B]=C si $C|\Psi\rangle=0 \forall |\Psi\rangle$. Entonces lo aplicamos a algo

$$\begin{split} \left(AB-BA\right)|\Psi\rangle &=c\left|\Psi\right\rangle \\ A\left|a'b'\right\rangle &=a'\left|a'b'\right\rangle \\ B\left|a'b'\right\rangle &=b'\left|a'b'\right\rangle \end{split}$$

1.4.8 Espectro continuo

Queremos pasar al continuo este formalismo. Pensamos en una única variable x, tal que

$$x | x' \rangle = x' | x' \rangle$$

y los kets de la base son los canónicos. En un rango [a,b] descomponemos una función $f_N(x)$ en esta base

$$\left|f_N\right> = f_N(x_1) \left|x^{(1)}\right> + f_N(x_2) \left|x^{(2)}\right> + \ldots + f_N(x_N) \left|x^{(N)}\right>,$$

o bien

$$|f_N\rangle = \sum_{i=1}^N f_N(x_i) \left| x^{(i)} \right\rangle$$

y queremos pasar al continuo utilizando $N\to\infty$ y $\Delta x\to 0$ con la constraint de que $N\Delta x\to cte$.

Hay observables con espectro de autovalores continuo. Nos podemos construir la siguiente tabla para comparar ambos escenarios.

Espectro discreto	Espectro continuo	
$A a'\rangle = a' a'\rangle$	$Y\ket{y'}=y'\ket{y'}$	
$\mathbb{1} = \sum_{a'}^{N} a'\rangle \left\langle a' \right $	$\mathbb{1} = \int_{-\infty}^{\infty} \left y' \right\rangle \left\langle y' \right dy'$	
$\langle a' \mid a'' \rangle = \delta_{a'a''}$	$\langle y' y'' \rangle = \delta(y' - y'')$	
$\sum_{a'}^{N} \langle a' \mid a'' \rangle \langle a'' = \langle a' $	$\int_{-\infty}^{\infty} dy'' \left\langle y' \mid y'' \right\rangle \left\langle y'' \right = \left\langle y' \right $	
$\sum_{a'}^{N} a'\rangle \langle a' \alpha \rangle = \alpha\rangle$	$\int_{-\infty}^{\infty} dy' \left y' \right\rangle \left\langle y' \right \alpha \right\rangle = \left \alpha \right\rangle$	
$\sum_{a'}^{N} \langle a' \alpha \rangle ^2 = 1$	$\int_{-\infty}^{\infty} dy' \left\langle y' \alpha \right\rangle ^2 = 1$	
$\langle \beta \alpha \rangle = \sum_{a'}^{N} \langle \beta a' \rangle \langle a' \alpha \rangle$	$\langle \beta \mid \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dy' \langle \beta \mid y' \rangle \langle y' \alpha \rangle$	

Debemos notar aquí que la delta correspondiente al caso discreto es la de Kronecker, mientras que la del caso continuo es la de Dirac.

1.4.9 Midiendo y otras representaciones. Función de onda

El operador que da la posición es \hat{x} de acuerdo con $\hat{x} | x' \rangle = x' | x' \rangle$. La representación de un cierto estado es

$$|\alpha\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx' |x'\rangle \langle x' | \alpha\rangle,$$

i.e. combinación lineal de todos los estados x' entre $-\infty$ y ∞ . No obstante puede ser que al medir, la física del instrumento o de la medida nos restringe a una zona $x\pm\Delta$, de modo que

$$|\alpha\rangle = \int_{x-\Delta}^{x+\Delta} dx' |x'\rangle \langle x' | \alpha\rangle,$$

donde

$$\langle x' \mid \alpha \rangle dx'$$

es la densidad de probabilidad de hallar a la partícula entre $(x-\Delta,x+\Delta)$ y

$$|\langle x' \, | \, \alpha \rangle \, |^2$$

Acá ya vamos viendo que hay bases de posición, spin, momento, etc. es la amplitud de probabilidad. En el formalismo de Schrödinger la densidad de probabilidad es la función de onda

$$\Psi_{\alpha}(x) = \langle x \mid \alpha \rangle$$

siendo este el vínculo entre la representación de Dirac y la función de onda, que nos permite ir de una a otra representación. La probabilidad de hallar al sistema en α será

$$|\Psi_{\alpha}(x)|^2 = \Psi_{\alpha}(x)\Psi_{\alpha}^*(x) = |\left\langle x \,|\, \alpha\right\rangle|^2.$$

Asimismo,

$$\langle p \mid x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}.$$

$$\left\langle \beta \,|\, \alpha \right\rangle = \int dx' \, \left\langle \beta \,|\, x' \right\rangle \left\langle x' \,|\, \alpha \right\rangle = \int dx' \Psi_\beta^*(x) \Psi_\alpha(x)$$

Para un elemento de matriz se tiene

$$\langle \beta \, | \, A \, | \, \alpha \rangle = \int \int dx' dx'' \, \langle \beta \, | \, x'' \rangle \, \langle x'' \, | \, A \, | \, x' \rangle \, \langle x' \, | \, \alpha \rangle$$

$$\langle \beta \, | \, A \, | \, \alpha \rangle = \int \int dx' dx'' \Psi_{\beta}^*(x'') \, \langle x'' \, | \, A \, | \, x' \rangle \, \Psi_{\alpha}(x')$$

y si $A = f(\hat{x})$ entonces $f(\hat{x}) | x' \rangle = f(x') | x' \rangle$ y

$$\langle\beta\,|\,A\,|\,\alpha\rangle = \int\int dx' dx'' \Psi_\beta^*(x'') f(x') \delta(x''-x') \Psi_\alpha(x')$$

y entonces

$$\langle\beta\,|\,A\,|\,\alpha\rangle = \int dx' \Psi_\beta^*(x') f(x') \Psi_\alpha(x').$$

En forma análoga tenemos la representación de momento;

$$\begin{split} \hat{p} \left| p' \right\rangle = p' \left| p' \right\rangle & \qquad \left\langle p' \left| p'' \right\rangle = \delta(p' - p'') \\ & \qquad \left| \alpha \right\rangle = \int dp' \left| p' \right\rangle \left\langle p' \left| \alpha \right\rangle \\ & \qquad \Phi_{\alpha}(p') = \left\langle p' \left| \alpha \right\rangle . \end{split}$$

En el anterior curso de física donde se hizo algo de mecánica cuántica (F4) todo se llevó a cabo en la representación de posición. El formalismo de Dirac permite movernos cómodamente entre cualesquiera de estas representaciones.

Para la generalización a 3 dimensiones se usan operadores vectoriales, que no son otra cosa que tres operadores escalares.

$$x\ket{x'} = x'\ket{x'}$$
,

así $y\left|\boldsymbol{x}'\right\rangle = y'\left|\boldsymbol{x}'\right\rangle = y'\left|\boldsymbol{x}',y',z'\right\rangle$ con

$$\mathbb{1} = \int_{-\infty}^{\infty} d^3 x | \boldsymbol{x}' \rangle \langle \boldsymbol{x}' |$$

y la delta de Dirac es

$$\langle \boldsymbol{x}'' \, | \, \boldsymbol{x}' \rangle = \delta^3(\boldsymbol{x}'' - \boldsymbol{x}') = \delta(x'' - x')\delta(y'' - y')\delta(z'' - z')$$

1.4.10 Operador de traslación

Este operador realiza una traslación infinitesimal. Se le pedirá

$$T_{(dx')}|x'\rangle = |x' + dx'\rangle$$

siendo este requerimiento intuitivamente adecuado para una traslación. Nótese que dx' no es un operador, es el parámetro de la traslación.

Sobre un ket genérico será

$$\mathcal{T}_{(dx')}\left|\alpha\right\rangle = \int d^3x' \, \left|x' + dx'\right\rangle \left\langle x \, | \, \alpha\right\rangle.$$

Cumplirá las propiedades

• Unitariedad:

$$T^{\dagger}T = TT^{\dagger} = 1$$

para que no varíe la probabilidad ante un cambio de coordenadas.

• Aditividad:

$$\mathbf{T}_{(dx')}\mathbf{T}_{(dx'')} = \mathbf{T}_{(dx'+dx'')}$$

porque vale en mecánica clásica.

• Existencia de inverso:

$${\bf T}_{(dx')}^{-1}={\bf T}_{(-dx'')}$$

• Existencia de la identidad, el que no hace nada. Límite a 1

$$T_{(dx')} \to 1$$
 si $dx' \to 0$

Se propone un¹

$$T_{(dx')} = 1 - i\boldsymbol{K} \cdot d\boldsymbol{x}'$$

con \pmb{K} un operador vectorial hermítico (notemos que τ no es hermítico). Para ver quién es éste operador se considera

$$\mathbf{T}_{(dx')}^{\dagger} = \mathbb{1} + i\mathbf{K} \cdot d\mathbf{x}',$$

y luego, a orden lineal, es $\mathcal{T}_{(dx')}\mathcal{T}_{(dx')}^{\dagger}\approx 1$ y

$$\mathbf{T}_{(dx')}\mathbf{T}_{(dx)} = 1 - i\boldsymbol{K}\cdot(d\boldsymbol{x}' + d\boldsymbol{x}) = \mathbf{T}_{(dx'+dx)}$$

Comparando con mecánica clásica, y viendo que allí p origina las traslaciones, entonces identificamos K con p. Se postuló que

$$\boldsymbol{K} = \frac{1}{\hbar} \boldsymbol{p},$$

y se ha visto a posteriori que esto funcionar.

Entonces pedimos que p cuántico origine las traslaciones

$$oldsymbol{K} = rac{oldsymbol{p}}{\hbar} \qquad \mathrm{T}_{(dx')} = \mathbb{1} - rac{i}{\hbar} oldsymbol{P} \cdot doldsymbol{x}'$$

y así

$$\mathbf{T}_{(dx')}\left|p'\right\rangle = \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{P} \cdot d\boldsymbol{x}'\right) \left|p'\right\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar} p' dx\right) \left|p'\right\rangle$$

el autovalor no es real, pues T no es hermítico.

Partiendo del conmutador

$$x\mathbf{T}_{(dx')}-\mathbf{T}_{(dx')}x=dx\mathbf{T}_{(dx')}$$

entonces

$$[x, T_{(dx')}] = dxT$$

y con $dx \sim 0$ a orden uno (esto significa que tiramos los términos cuadráticos en dx). Usando la anterior

$$[x,1-i\pmb{K}\cdot d\pmb{x}']=-i[x_i,K_jdx_j']=-i[x_i,K_j]dx_j'=dx_j'$$

de lo cual se deduce que

$$\frac{dx_i'}{dx_i'} = -i[x_i, K_j] = \delta_{ij}$$

Hay que ver el carácter vectorial de estas cosas. dx es vectorial en realidad, pero no un operador.

En la carpeta el conmutador da sin la T, así que acá parece estar mal.

¹Es una especie de expansión de Taylor.

lo que conduce a

$$[x_i, p_i] = i\hbar \; \delta_{ij},$$

que es la incompatibilidad de posición y momento.

Pero las traslaciones en diferentes direcciones conmutan

$$[\mathbf{T}_{(dx')}, \mathbf{T}_{(dx'')}] = 0$$
 $[p_i, p_i] = 0$

$$\mathrm{T}_{(d\boldsymbol{x}')}\left|\boldsymbol{p}'\right\rangle = \left(1 - \frac{i}{\hbar}\boldsymbol{P}'\cdot d\boldsymbol{x}\right)\left|\boldsymbol{p}'\right\rangle$$

donde recordamos que como el operador no es hermítico el autovalor no es necesariamente real.

Sumando infinitas traslaciones infinitesimales tenemos una traslación finita,

$$\mathcal{T}_{(\Delta x')} = \lim_{N \to \infty} \left(1 - \frac{i}{\hbar} p \frac{\Delta x'}{N} \right)^N = e^{-i/\hbar p \Delta x'}$$

que en tres dimensiones será

$$T_{(\Delta x')} = e^{-i/\hbar \, \boldsymbol{p} \cdot \Delta \boldsymbol{x}'},$$

donde se hace $dx' \equiv \Delta x'/N$ para el paso al continuo.

EJEMPLO 4.4 Ejercicio 15

Las partes a), b), c) están hechas en el libro de Sakurai. La dispersión resulta $\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$ lo que es fácil de ver haciendo explícitamente la operación para un estado ψ . Se considera

$$\Delta A = A - \left\langle A \right\rangle_{\psi}.$$

Si A, B son observables, entonces

$$\left\langle \Delta A^2 \right\rangle_{\psi} \, \left\langle \Delta B^2 \right\rangle_{\psi} \geq \frac{1}{4} | \, \left\langle [A,B] \right\rangle|_{\psi}^2.$$

EJEMPLO 4.5 Ejercicio 16

Tenemos $\langle \Delta S_x^2 \rangle = \langle \Delta S_x^2 \rangle - \langle \Delta S_x \rangle^2$ con $|\psi\rangle = |+\rangle$ y escribimos S_x en la base de autoestados

$$\begin{split} S_x &= \frac{\hbar}{2} \left(\left| + \right\rangle \left\langle - \right| + \left| - \right\rangle \left\langle + \right| \right), \\ S_x^2 &= \frac{\hbar^2}{4} \left(\left| + \right\rangle \left\langle + \right| + \left| - \right\rangle \left\langle - \right| \right) = \frac{\hbar^2}{4} \mathbb{1} \end{split}$$

y como es un Stern-Gerlach en \hat{x} y le mandamos partículas en \hat{z} ,

$$\langle S_x \rangle = \langle + |\, S_x \, | + \rangle = 0 \qquad \qquad \langle S_x^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}$$

y de la misma manera

$$\langle S_y \rangle = 0$$
 $\langle S_y^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}$

Si queremos ahora probar la relación de incerteza generalizada, será

$$\frac{1}{4}|\ \left\langle (S_x,S_y)\right\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{4}|\ \left\langle S_z\right\rangle|^2 = \frac{\hbar^4}{16},$$

y luego

$$\left. \left< (\Delta S_x)^2 \right>_{|+\rangle} \right. \left. \left< (\Delta S_y)^2 \right>_{|+\rangle} = \frac{1}{4} | \left. \left< [S_x, S_y] \right>|_{|+\rangle}^2,$$

vemos que se verifica la igualdad en la relación de incerteza.

EJEMPLO 4.6 Ejercicio 15 parte d)

Se tiene

$$\langle x' \mid \alpha \rangle = (2\pi d^2)^{-1/4} e^{i \langle p \rangle x' / \hbar - (x' - \langle x \rangle)^2 / (4d^2)}$$

y se pide

$$\langle (\Delta x)^2 \rangle \langle (\Delta p)^2 \rangle = \frac{\hbar}{2}$$

Son los valores medios

$$\left\langle x\right\rangle =\left\langle \alpha\,|\,x\,|\,\alpha\right\rangle =\int_{-\infty}^{\infty}\,\left\langle \alpha\,|\,x\,|\,x'\right\rangle \left\langle x'\,|\,\alpha\right\rangle dx'=\int_{-\infty}^{\infty}\,x'\,\left\langle \alpha\,|\,x'\right\rangle \left\langle x'\,|\,\alpha\right\rangle dx'$$

У

$$\begin{split} \left\langle p \right\rangle = \left\langle \alpha \,|\, p \,|\, \alpha \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \,p' \,\left\langle \alpha \,|\, p' \right\rangle \left\langle p' \,|\, \alpha \right\rangle dp' = \\ \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \,p' \,\left\langle \alpha \,|\, x' \right\rangle \left\langle x' \,|\, p' \right\rangle \left\langle p' \,|\, x'' \right\rangle \left\langle x'' \,|\, \alpha \right\rangle dp' dx' dx'' \end{split}$$

donde hemos introducido identidades, continuas, en estados de posición. Reacomodando las integraciones,

$$\langle p
angle = \int \int dx' dx'' \, rac{\psi^*(x')\psi(x'')}{2\pi\hbar} \int dp' \, p' \, \mathrm{e}^{ip/\hbar(x'-x'')}$$

y haciendo aparecer explícitamente una derivada espacial (ayudados por la exponencial)

$$\langle p \rangle = \int \int dx' dx'' \, \frac{\psi^*(x')\psi(x'')}{2\pi\hbar} \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x'} \int dp' \, \mathrm{e}^{ip/\hbar(x'-x'')}.$$

Luego, como la expresión de la delta de Dirac es

$$\delta(x'-x'') = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp' \, \mathrm{e}^{ip'/\hbar(x'-x'')}$$

se tiene

$$\langle p \rangle = \int \int dx' dx'' \frac{\hbar}{i} \psi^*(x') \psi(x'') \delta(x'-x'') = \int dx' \ \psi^*(x') \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \right) \psi(x').$$

1.4.11 p en la representación x

Parece que la ecuación

$$[x, \mathbf{T}_{(dx')}] = dx',$$

que se escribió anterioremente, no es exacta. La carpeta no da más información al respecto. Se verifica en realidad que

Ahora se entiende el entuerto con la T que sobraba.

$$[x, \mathbf{T}_{(dx')}] |x'\rangle = dx' \mathbf{T}_{(dx')} |x'\rangle$$

y usando la equivalencia de T
 a orden $d{x'}^2,$ podemos escribir

$$\left(1-i\frac{P\Delta x'}{\hbar}\right)\left|\alpha\right\rangle = \int dx' \, \mathbf{T}_{(dx')}\left|x'\right\rangle \left\langle x' \, | \, \alpha\right\rangle$$

o bien, a primer orden siempre,

$$\mathbf{T}_{(\Delta x)}\left|\alpha\right\rangle = \int dt' \mathbf{T} \left|x'\right\rangle \left\langle x'\right|\alpha\right\rangle = \int dt' \left|x' + \Delta x\right\rangle \left\langle x'\right|\alpha\right\rangle = \int dt' \left|x'\right\rangle \left\langle x' - \Delta x\right|\alpha\right\rangle$$

pero

$$\frac{\partial}{\partial x'} \left\langle x' \,|\, \alpha \right\rangle \approx \frac{-\left\langle x' - \Delta x \,|\, \alpha \right\rangle + \left\langle x' \,|\, \alpha \right\rangle}{\Delta x}$$

y entonces

$$-\frac{\partial}{\partial x'} \left\langle x' \mid \alpha \right\rangle \Delta x + \left\langle x' \mid \alpha \right\rangle = \left\langle x' - \Delta x \mid \alpha \right\rangle$$

de manera que

$$\begin{split} \operatorname{T} \left| \alpha \right\rangle &= \int dx' \left| x' \right\rangle \left(\left\langle x' \right| \alpha \right\rangle - \frac{\partial}{\partial x'} \left\langle x' \right| \alpha \right\rangle \Delta x \right) = \int dx' \left| x' \right\rangle \left\langle x' \right| \alpha \right\rangle - \int dx' \left| x' \right\rangle \frac{\partial}{\partial x'} \left\langle x' \right| \alpha \right\rangle \Delta x \\ &\left(1 - \frac{i}{\hbar} p \Delta x \right) \left| \alpha \right\rangle = \left| \alpha \right\rangle - \int dx' \left| x' \right\rangle \frac{\partial}{\partial x'} \left\langle x' \right| \alpha \right\rangle \Delta x \\ &\frac{i}{\hbar} p \Delta x \left| \alpha \right\rangle = \int dx' \left| x' \right\rangle \frac{\partial}{\partial x'} \left\langle x' \right| \alpha \right\rangle \Delta x \end{split}$$

y así

$$p |\alpha\rangle = -i\hbar \int dx' |x'\rangle \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | \alpha\rangle$$

de modo que usándo este resultado se tienen

$$\langle x'' | p | \alpha \rangle = -i\hbar \int dx' \langle x'' | x' \rangle \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | \alpha \rangle$$

$$\begin{split} \left\langle x'' \mid p \mid \alpha \right\rangle &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \left\langle x'' \mid \alpha \right\rangle \\ \left\langle \beta \mid p \mid \alpha \right\rangle &= \int dx' \left\langle \beta \mid x' \right\rangle (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x'} \left\langle x' \mid \alpha \right\rangle \\ \left\langle \beta \mid p \mid \alpha \right\rangle &= \int dx' \Psi_{\beta}^{*}(x') (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x'} \Psi_{\alpha}(x') \end{split}$$

de lo que se deduce

$$\hat{p} \equiv -i\hbar \frac{\partial}{\partial x},$$

que es el resultado más importante de la sección. En la representación de x, el operador p es proporcional a la derivada.

1.4.12 Cambio entre representaciones x y p

Supongamos ahora que α es un autoestado de p. Entonces

$$\langle x' \, | \, \hat{p} \, | \, p' \rangle = -i\hbar \int dx' \, \langle x' \, | \, x' \rangle \, \frac{\partial}{\partial x'} \, \langle x' \, | \, p' \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \, \langle x' \, | \, p' \rangle$$

y entonces,

$$p'\langle x' | p' \rangle = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x'} \langle x' | p' \rangle,$$

que es una ecuación diferencial para $\langle x' | p' \rangle$. Luego

$$\int \frac{1}{\langle x' | p' \rangle} \partial \langle x' | p' \rangle = \int \frac{ip'}{\hbar} \partial x'$$
$$\log \langle x' | p' \rangle = \frac{ip'x'}{\hbar} + Cte.$$

Ahora escribimos la delta e integramos,

$$\begin{split} \int dp' \left< x' \, | \, p' \right> \left< p' \, | \, x'' \right> &= \left< x' \, | \, x'' \right> = \delta(x-x') \\ \int dp' \, \mathrm{e}^{ip'/\hbar(x'-x'')} |N|^2 &= \delta(x-x') \end{split}$$

donde usamos la integral del handbook ver Apéndice I X

$$|N| = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}.$$

$$\langle x' | p' \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ip'x'/\hbar}$$

Entonces, los autoestados de p son ondas libres. Toda esta información la obtuvimos de suponer que p es el generador de las traslaciones. Con este escalar podemos cambiar entre representaciones. Usando esto podemos ver que $\Psi_{\alpha}(x')$ y $\Phi_{\alpha}(p')$ son transformadas de Fourier la una de la otra.

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \, e^{iap(x-x')} = \frac{2\pi}{a} \delta(x-x')$$

Suponiendo que queremos pasar entre representaciones dado un ket $|\alpha\rangle$, tenemos

$$\psi_{\alpha}(x') = \langle a' \mid \alpha \rangle \qquad \langle p' \mid \alpha \rangle = \phi_{a}(x')$$

y el cambio siempre implica escribir un "uno" apropiadamente,

$$\langle a' \mid \alpha \rangle = \int dp' \, \langle x' \mid p' \rangle \, \langle p' \mid \alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp' \, \mathrm{e}^{ip'x'/\hbar} \phi_{\alpha}(p') = \psi_{\alpha}(x')$$

y entonces, consecuentemente,

$$\phi_{\alpha}(p') = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx' \, \mathrm{e}^{ip'x'/\hbar} \psi_{\alpha}(x').$$

Notemos que la mecánica cuántica que desarrollamos ya sabe que ϕ y ψ son transformadas de Fourier entre sí, sin utilizar la ecuación de Schrödinger.

EJEMPLO 4.7 Ejercicio 18

 S_y es un operador complejo. Luego

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

Luego, dependiendo de la base que se utilice resultará

$$S_y|_{\text{base}} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

EJEMPLO 4.8 Ejercicio 20

Se define f(A) de modo que si $f(x) = \sum_{i} c_{j} x^{j}$ entonces se toma

$$f(A) \equiv \sum_{j=0}^{\infty} \, c_j A^j,$$

luego, si nos hallamos en autoestado de A estaremos entonces en autoestados de f(A). Si es $A |a'\rangle = a' |a'\rangle$, será

$$A^{j} |a'\rangle = A^{j-1} A |a'\rangle = A^{j-1} a' |a'\rangle = {a'}^{j} |a'\rangle$$
.

El elemento de matriz

$$\left\langle b'' \mid f(A) \mid b' \right\rangle = \sum_{a'} \left\langle b'' \mid f(A) \mid a' \right\rangle \left\langle a' \mid b' \right\rangle = \sum_{a'} f(a') \left\langle b'' \mid a \right\rangle \left\langle a' \mid b' \right\rangle$$

y los dos últimos brakets son los datos conocidos. La parte b) es igual pero para el caso continuo.

1.4.13 Corchetes de Poisson versus conmutadores

Hay una equivalencia entre corchetes de Poisson y conmutadores, a saber:

$$[A, B]_{\text{classic}} \longrightarrow \frac{1}{i\hbar} [A, B]$$

o

$$[A,B]_{\rm classic} = \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right)$$

Esta relación fue planteada por Dirac.