

Quantum mechanics summary

Jonathan Hernandez¹

Universidad de Valparaiso.

Jonathan.hernandez@alumnos.uv.cl

Abstract. Cualquier cosa que pueda representarse como un vector o un espacio vectorial puede ser golpeada con álgebra lineal hasta que haga algo útil.

Key words:

1 Herramientas matemáticas

1.1 Espacio de Hilbert

Un espacio de Hilbert \mathcal{H} es un espacio vectorial el cual tiene un producto interno completo. Para desmenuzar esto, partimos con la básica idea de que es un espacio vectorial, esto es, un conjunto de elementos que siguen unas reglas, estas reglas especiales son la suma asociativa y conmutativa, así como la multiplicación por un escalar distributivamente.

1.2 Notación de Dirac

Es otra notación para los vectores, donde se tendrá una notación para los vectores escritos en forma de columna y otra para los vectores fila.

$$\langle v| = (v_1 \ v_2 \ \dots \ v_n) \quad [\mathbf{Bra}] \quad |v\rangle = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ v_n \end{pmatrix} \quad [\mathbf{Ket}] \quad (1)$$

1.2.1 Propiedades

$$\begin{aligned} |v\rangle^\dagger &= \langle v| \\ [\alpha |v\rangle + \beta |\omega\rangle]^\dagger &= \alpha^* \langle v| + \beta^* \langle \omega| \\ |\alpha v\rangle &= \alpha |v\rangle \\ \langle \alpha v| &= \alpha^* \langle v| \end{aligned}$$

1.2.2 Producto interno La operación $\langle u|u \rangle$ corresponde al producto interno, en el lenguaje vectorial es equivalente al producto punto. En notación sumatoria puede escribirse como:

$$\langle u|u \rangle = \sum_{j=1}^n u_j^* u_j = \sum_{j=1}^n |u_j|^2 \geq 0 \quad (2)$$

$$\langle u|v \rangle = \sum_{j=1}^n u_j^* v_j \geq 0 \quad (3)$$

La operación producto interno da un escalar.

1.2.3 Propiedades del producto interno

$$\langle \alpha u + \beta v | \omega \rangle = \alpha^* \langle u | \omega \rangle + \beta^* \langle v | \omega \rangle$$

$$\langle u | \alpha v + \beta \omega \rangle = \alpha \langle u | v \rangle + \beta \langle u | \omega \rangle$$

$$\langle u | v \rangle^* = \langle v | u \rangle = \langle v | u \rangle^\dagger$$

Demostración de la ultima identidad:

$$\begin{aligned} \langle u | v \rangle &= \sum u_j^* v_j \\ &= \left[\left(\sum u_j^* v_j \right)^* \right]^* \\ &= \left[\sum u_j v_j^* \right]^* = \langle v | u \rangle^* \end{aligned}$$

Es igual a la operación daga (adjunta) porque la operación es un escalar, por tanto, adjuntar es igual a conjugar.

1.3 Operadores

Operadores son matrices que "operan" sobre un elemento, en el caso de la cuántica operan sobre vectores (Problemas de valores propios, etc). Estos pueden representar distintos tipos de "operaciones", como derivadas, transformaciones de coordenadas, etc. se denotan por \hat{A} . En cuántica hay tres tipos de operados importantes:

■ Hermitianos

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A} \quad (4)$$

■ Anti hermitianos

$$\hat{A}^\dagger = -\hat{A} \quad (5)$$

- Unitarios: Relacionados con transformaciones, en específico rotaciones que cambian de dirección pero no la magnitud de un vector.

$$\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1} \quad (6)$$

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{\mathbf{1}} \quad (7)$$

Donde $\hat{\mathbf{1}}$ es la matriz identidad.

1.4 Bases vectoriales

Para nosotros las bases vectoriales pueden tratarse como un conjunto de "vectores" linealmente independientes, donde todas las posibles combinaciones entre estos vectores conforma un espacio vectorial.

Sea la base vectorial $|u_i\rangle$ discreta ($i = 1, 2, \dots, N$), esta tiene dos propiedades fundamentales:

- Condición de ortogonalidad: que asegura la independencia lineal entre los vectores.

$$\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij} \quad (8)$$

- Condición de completitud: es un poco mas complicado de explicar, pero esta condición nos dice que la base es completa, lo que se traduce en que cualquier vector $|\phi\rangle$ se puede escribir a partir de esta base de vectores (como una combinación lineal de estos)

$$\sum_{i=1}^N |u_i\rangle \langle u_i| = \hat{\mathbf{1}} \quad (9)$$

Luego, un vector arbitrario $|\phi\rangle$ se puede escribir como:

$$|\phi\rangle = \sum_{i=1}^N \phi_i |u_i\rangle \quad (10)$$

Donde ϕ_i es una cantidad escalar.

Demostración

$$|\phi\rangle = \hat{\mathbf{1}} |\phi\rangle = \sum_{i=1}^N |u_i\rangle \langle u_i | \phi \rangle = \sum_{i=1}^N \phi_i |u_i\rangle$$

Donde $\phi_i = \langle u_i | \phi \rangle$, este valor se puede interpretar gráficamente como la componente i -ésima de $|\phi\rangle$ o en otras palabras como la proyección de $|\phi\rangle$ en la dirección de $|u_i\rangle$. Es importante destacar dos cosas, primero que el valor ϕ_i es un escalar PERO después se le dará uso como una función escalar, y como segundo, como pueden haber complejos de por medio, por lo tanto:

$$\phi_i = \langle u_i | \phi \rangle \neq \langle \phi | u_i \rangle \quad (11)$$

De la misma manera una matriz puede ser escrita en esta base vectorial como

$$\hat{A} = \sum_{i,j=1}^N \langle u_i | \hat{A} | u_j \rangle | u_i \rangle \langle u_j | = \sum_{i,j=1}^N A_{ij} | u_j \rangle \langle u_i | \quad (12)$$

Donde el valor A_{ij} es la componente ij -esimo del operador \hat{A} .

Demostración

$$\hat{A} = \hat{\mathbf{1}} \hat{A} \hat{\mathbf{1}} = \sum_{i,j=1}^N | u_i \rangle \langle u_i | \hat{A} | u_j \rangle \langle u_j | = \sum_{i,j=1}^N \langle u_i | \hat{A} | u_j \rangle | u_i \rangle \langle u_j | = \sum_{i,j=1}^N A_{ij} | u_j \rangle \langle u_i |$$

1.5 Problemas de valores propios (PVP)

Se resume a

$$\hat{A} | a_i \rangle = a_i | a_i \rangle \quad (13)$$

Aquí es donde recuperamos el termino de operador, la ecuacion (13) se interpreta como un operador actuando sobre un ket (vector). Opera como una transformación lineal (Todas las matrices son transformaciones lineales, por lo que se), es decir, que al aplicar la matriz a un vector distorsionara este vector, ¿como lo hace? Pues no lo se, un vector puede ser distorsionado de muchas maneras, ahí es donde entran los vectores propios.

Los vectores propios son un conjunto de vectores que no ven afectada su dirección bajo esta transformación, solo pueden ver afectado su modulo, en otras palabras, estira/contrae al vector propio.

El factor por el que se "estira" es el valor propio a_i , de esta manera, cada vector propio tiene su valor propio asociado. De la misma manera, cada operador tiene su problema de valores propios asociados (los que veremos al menos si).

1.5.1 PVP de operadores hermitianos Un operador hermitiano tiene una base vectores propios ortogonales y los valores propios son siempre reales.

Demostración

Sea

$$\begin{aligned} \hat{A} | a_i \rangle &= a_i | a_i \rangle \quad / ()^\dagger \\ \langle a_i | \hat{A} &= a_i^* \langle a_i | \quad / | a_j \rangle \\ \langle a_i | \hat{A} | a_j \rangle &= a_i \langle a_i | a_j \rangle \\ a_j \langle a_i | a_j \rangle &= a_i \langle a_i | a_j \rangle \\ (a_j - a_i) \langle a_i | a_j \rangle &= 0 \end{aligned}$$

Si $i = j$ implica que $a_i^* = a_j \Rightarrow a_i \in \mathbf{R}$, si $i \neq j$ implica que $a_j - a_i \neq 0 \Rightarrow \langle a_i | a_j \rangle = 0$, por lo tanto los auto vectores son ortogonales entre si,

1.5.2 PVP de operadores anti-hermitianos Un operador hermitiano tiene una base vectores propios ortogonales y los valores propios son imaginarios puros.

Demostración

$$\begin{aligned}\hat{A}|a_i\rangle &= a_i|a_i\rangle \quad /()^\dagger \\ -\langle a_i|\hat{A} &= a_i^* \langle a_i| \quad /|a_j\rangle \\ -\langle a_i|\hat{A}|a_j\rangle &= a_i^* \langle a_i|a_j\rangle \\ -\langle a_i|a_j|a_j\rangle &= a_i^* \langle a_i|a_j\rangle \\ (a_i^* + a_j) \langle a_i|a_j\rangle &= 0\end{aligned}$$

Si $i = j \Rightarrow -a_i^* = a_i$, esto solo es posible si a_i es un imaginario puro, es decir, $a_i = iK$ con $K \in \mathbb{R}$. Si $i \neq j$ implica que $a_j - a_i \neq 0 \Rightarrow \langle a_i|a_j\rangle = 0$, por lo tanto los auto vectores son ortogonales entre si.

1.5.3 PVP de operadores unitarios Un operador unitario tiene una base vectores propios ortogonales y los valores propios tienen modulo uno.

Demostración

Sean dos PVP del operador \hat{U} , donde el segundo esta en forma adjuntada

$$\begin{aligned}\hat{U}|u_i\rangle &= u_i|u_i\rangle \\ \langle u_j|\hat{U}^\dagger &= u_j^* \langle u_j|\end{aligned}$$

Multiplicando ambas ecuaciones

$$\begin{aligned}\langle u_j|\hat{U}^\dagger\hat{U}|u_i\rangle &= u_i u_j^* \langle u_j|u_i\rangle \\ (u_i u_j^* - 1) \langle u_j|u_i\rangle &= 0\end{aligned}$$

Si $i = j \Rightarrow |u_i|^2 = 1$. Si $i \neq j \Rightarrow \langle u_j|u_i\rangle = 0$.

1.6 Cambios de bases

Sean un espacio n-dimensional y las bases $\{|u_i\rangle\}$ y $\{|\tilde{u}_j\rangle\}$, donde cada base cumple con sus respectivas condición de ortogonalidad y completitud.

Definition 1. Definimos el producto interno entre elementos de bases distintas como el elemento de una matriz de la siguiente forma

$$\langle u_i|\tilde{u}_j\rangle = (\hat{U})_{ij} \quad (14)$$

Si conjugamos el bracket nos lleva a:

$$\langle u_i|\tilde{u}_j\rangle^* = \hat{U}_{ij}^* = (\hat{U}^\dagger)_{ji} \quad (15)$$

Nota: La matriz \hat{U} es unitaria.

Demostración

$$(\hat{U}^\dagger \hat{U})_{ij} = \sum_k (\hat{U}^\dagger)_{ik} (\hat{U})_{kj} = \sum_k \langle u_k | \tilde{u}_i \rangle^* \langle u_k | \tilde{u}_j \rangle = \sum_k \langle \tilde{u}_i | u_k \rangle \langle u_k | \tilde{u}_j \rangle = \langle \tilde{u}_i | \tilde{u}_j \rangle = \delta_{ij}$$

El elemento ij -ésimo de la matriz $\hat{U}^\dagger \hat{U}$ es una delta de Kronecker, por lo tanto, $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{\mathbf{1}}$.

1.6.1 ¿Como se transforman los vectores? Sea un vector arbitrario escrito en la base $\{|u_i\rangle\}$

$$|\psi\rangle_u = \sum_i^n \langle u_i | \psi \rangle |u_i\rangle$$

A través de la componente i -ésima:

$$\psi_i = \langle u_i | \hat{\mathbf{1}} | \psi \rangle = \sum_j \langle u_i | \tilde{u}_j \rangle \langle \tilde{u}_j | \psi \rangle$$

Reconocemos a $\langle u_i | \tilde{u}_j \rangle = (\hat{U})_{ij}$ y a $\langle \tilde{u}_j | \psi \rangle = \tilde{\psi}_j$, por lo que podemos escribir

$$\psi_i = \sum_j (\hat{U})_{ij} \tilde{\psi}_j \quad (16)$$

O de manera vectorial/matricial

$$|\psi\rangle_u = \hat{U} |\psi\rangle_{\tilde{u}} \quad (17)$$

$$|\psi\rangle_{\tilde{u}} = \hat{U}^\dagger |\psi\rangle_u \quad (18)$$

1.6.2 ¿Como se transforman los operadores? Sea el operador \hat{A} escrito en la base $\{|u_i\rangle\}$, el elemento ij -ésimo de este operador es

$$(\hat{A})_{ij} = \langle u_i | \hat{\mathbf{1}} \hat{A} \hat{\mathbf{1}} | u_j \rangle = \sum_{l,k} \langle u_i | \tilde{u}_k \rangle \langle \tilde{u}_k | \hat{A} | \tilde{u}_l \rangle \langle \tilde{u}_l | u_j \rangle$$

Reconocemos $\langle u_i | \tilde{u}_k \rangle = (\hat{U})_{ik}$, $\langle \tilde{u}_k | \hat{A} | \tilde{u}_l \rangle = (\hat{A}_{\tilde{u}})_{kl}$ y escribimos $\langle \tilde{u}_l | u_j \rangle = \langle u_j | \tilde{u}_l \rangle^*$, por tanto

$$(\hat{A})_{ij} = \sum_{lk} (\hat{U})_{ik} (\hat{A}_{\tilde{u}})_{kl} (\hat{U})_{lj} \quad (19)$$

Para finalmente escribir

$$\hat{A} = \hat{U} \hat{A}_{\tilde{u}} \hat{U}^\dagger \quad (20)$$

$$\hat{A}_{\tilde{u}} = \hat{U}^\dagger \hat{A}_u \hat{U} \quad (21)$$

1.6.3 Cantidades invariantes ante cambios de base

- Productos internos.

$${}_{\tilde{u}}\langle\psi|\phi\rangle_{\tilde{u}} = {}_u\langle\psi|\phi\rangle_u \quad (22)$$

- Determinante de un operador.

$$\det(\hat{A}_{\tilde{u}}) = \det(\hat{A}_u) \quad (23)$$

- Traza de un operador.

$$\text{Tr}(\hat{A}_{\tilde{u}}) = \text{Tr}(\hat{A}_u) \quad (24)$$

- Autovalores de un operador.

Demostración Sea el operador \hat{A} cuyo PVP en la base $\{|u_i\rangle\}$

$$\hat{A}_u |a_i\rangle_u = a_i |u\rangle_u$$

Análogamente, en la base $\{|\tilde{u}_j\rangle\}$

$$\hat{A}_{\tilde{u}} |a_i\rangle_{\tilde{u}} = a'_i |a_i\rangle_{\tilde{u}}$$

Multiplicamos la ultima ecuacion por $\hat{\mathbf{1}} = \hat{U}^\dagger \hat{U}$, teniendo:

$$\begin{aligned} \hat{A}_{\tilde{u}} \hat{U}^\dagger \hat{U} |a_i\rangle_{\tilde{u}} &= a'_i \hat{U}^\dagger \hat{U} |a_i\rangle_{\tilde{u}} \\ \hat{A}_{\tilde{u}} \hat{U}^\dagger |a_i\rangle_u &= a'_i \hat{U}^\dagger |a_i\rangle_u \quad / \hat{U} \\ \hat{U} \hat{A}_{\tilde{u}} \hat{U}^\dagger |a_i\rangle_u &= a'_i |a_i\rangle_u \\ \hat{A}_u |a_i\rangle_u &= a'_i |a_i\rangle_u \\ a_i |a_i\rangle_u &= a'_i |a_i\rangle_u \\ \Rightarrow a_i &= a'_i \end{aligned}$$

1.7 Espacios vectoriales continuos

Sea una base $\{|a_\lambda\rangle\}$ donde λ es continuo, esta base cumple las mismas condiciones de una discreta:

- Condición de Ortogonalidad

$$\langle a_\lambda | a_{\lambda'} \rangle = \delta(\lambda - \lambda') \quad (25)$$

- Condición de completitud

$$\int_\lambda |a_\lambda\rangle \langle a_\lambda| d\lambda = \hat{\mathbf{1}} \quad (26)$$

1.7.1 Espacio de posición unidimensional Podemos asociar a la coordenada de posición x como autovalor de un operador \hat{X} .

$$\hat{X} |x\rangle = x |x\rangle \quad (27)$$

Como $x \in \mathbb{R} \Rightarrow \hat{X}^\dagger = \hat{X}$ y por lo tanto, el conjunto de vectores $\{|x\rangle\}$ forma una base ortonormal y completa.

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x') \quad (28)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle \langle x| dx = \hat{1} \quad (29)$$

Un vector arbitrario escrito en la base $\{|x\rangle\}$ se ve como:

$$|\phi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x) |x\rangle dx \quad (30)$$

Donde

$$\phi(x) = \langle x|\phi\rangle \quad (31)$$

Un operador arbitrario escrito en la base $\{|x\rangle\}$ se ve como:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \hat{A}(x, x') |x'\rangle \langle x| dx dx' \quad (32)$$

Donde

$$\hat{A}(x, x') = \langle x'|\hat{A}|x\rangle \quad (33)$$

1.7.2 Espacio de numero de onda(k) A través del mismo tratamiento, tenemos el PVP

$$\hat{K} |k\rangle = k |k\rangle \quad (34)$$

Donde k es llamado "numero de onda" (Por ahora es otro espacio, no importa su interpretación física), es un numero real, lo que implica que el operador \hat{k} es hermitiano. El conjunto de vectores es una base ortonormal y completa, satisfaciendo ambas condiciones. Un vector arbitrario escrito en esta base ve como:

$$|\phi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\phi}(k) |k\rangle dk \quad (35)$$

Donde

$$\tilde{\phi}(k) = \langle k|\phi\rangle \quad (36)$$

Un operador arbitrario escrito en la base $\{|k\rangle\}$ es escrito como

$$\hat{A} = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\tilde{A}}(k, k') |k'\rangle \langle k| dk dk' \quad (37)$$

Donde

$$\tilde{\hat{A}}(k, k') = \langle k' | \hat{A} | k \rangle \quad (38)$$

1.7.3 Espacio de momentum Esto es algo extra, el vector de momentum lineal y el de numero de onda se relacionan por $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, por lo que sus magnitudes cumplen con $p = \hbar k$, que son precisamente los autovalores del operador momentum \hat{P} y el de numero de onda \hat{K} . La relación que cumplen los autovalores la cumplen los autovectores, por lo que

$$\hat{P} |\vec{p}\rangle = \vec{p} |\vec{p}\rangle = \hbar \vec{k} |\vec{p}\rangle$$

La notación vectorial en los ket es simplemente para denotar que se cumplen "por componentes". Es importante esto porque se cumplen todas las relaciones que mezclan las bases de x y de k pero hay un \hbar entremedio.

1.7.4 Relación entre bases

$$\phi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\phi}(k) \langle x | k \rangle dk \quad (39)$$

$$\tilde{\phi}(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(x) \langle k | x \rangle dx \quad (40)$$

Notar que:

$$\langle x | k \rangle = \langle k | x \rangle^* \quad (41)$$

Estas no son mas que transformadas integrales, pasan de un dominio a otro, o en este caso de un espacio a otro. Los bracket $\langle x | k \rangle$ y $\langle k | x \rangle$ es el Kernel o núcleo de la transformada. Una transformada que usaremos es la de Fourier, cuyo Kernel es:

$$\langle x | k \rangle = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} \quad (42)$$

$$\langle k | x \rangle = \langle x | k \rangle^* = \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{2\pi}} \quad (43)$$

Una de sus utilidades es que es posible usar el núcleo de Fourier para una aproximación de la delta de Dirac

$$\delta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx}}{\sqrt{e\pi}} dk \quad (44)$$

Por definición la delta cumple dos relaciones importantes:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - a) dx = 1 \quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - a) f(x) dx = f(a) \quad (45)$$

Otras propiedades importantes son:

$$\delta(-x) = \delta(x) \quad (46)$$

$$\delta(kx) = \frac{1}{|k|} \delta(x) \quad (47)$$

Demostración

A través de la ecuación (45) hacemos el siguiente cambio de variable $v = -x \Rightarrow dv = -dx$, por lo que se tendrá

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(-x) f(x) dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \delta(v) f(-v) dx = f(0) = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) f(x) dx$$

Por comparación, llegamos a la identidad (46).

Para demostrar la segunda identidad usamos el cambio de variable $y = kx \Rightarrow dy = k dx$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(kx) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f\left(\frac{y}{k}\right) \delta(y) \frac{dy}{k} = \frac{f(0)}{k} = \frac{1}{k} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx$$

Comparando y notando que tenemos resultando "distintos" si $k > 0$ o $k < 0$, notamos que:

$$\delta(kx) = \frac{\delta(x)}{|k|}$$

1.8 Aplicaciones de toda la wea, truño de propiedades

Una importante identidad es

$$\frac{k^n e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} = \frac{d^n}{d(ix)^n} \left[\frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} \right] = (-i)^n \frac{d^n}{dx^n} \left[\frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} \right] \quad (48)$$

O en notación de Dirac:

$$k^n \langle x|k \rangle = \frac{d^n}{d(ix)^n} \langle x|k \rangle = (-i)^n \frac{d^n}{dx^n} \langle x|k \rangle \quad (49)$$

Asumiendo (por el momento) que el conmutador entre el operador posición y el de número de onda.

$$[\hat{X}, \hat{K}] = i\hat{1} \quad (50)$$

A través de esta suposición, conlleva a las siguientes igualdades:

$$[\hat{X}, \hat{K}^n] = ni\hat{K}^{n-1} \quad [\hat{X}^n, \hat{K}] = in\hat{X}^{n-1} \quad (51)$$

Demostración

Por calculo directo

$$\begin{aligned}
[\hat{X}, \hat{K}^2] &= 2i\hat{K} \\
[\hat{X}, \hat{K}^3] &= 3i\hat{K}^2 \\
&\vdots \\
&\vdots \\
&\vdots \\
[\hat{X}, \hat{K}^n] &= in\hat{K}^{n-1}
\end{aligned}$$

De la misma manera se demuestra la segunda igualdad.

Otro conmutador de importancia es:

$$[\hat{X}, f(\hat{K})] = i \frac{df(\hat{K})}{d\hat{K}} \quad [f(\hat{X}), \hat{K}] = i \frac{df(\hat{X})}{d\hat{X}} \quad (52)$$

Demostración

Sea $f(\hat{K}) = \sum_n^\infty a_n \hat{K}^n$

$$\begin{aligned}
[\hat{X}, f(\hat{K})] &= \sum_n^\infty a_n [\hat{X}, \hat{K}^n] \\
&= \sum_n^\infty a_n in\hat{K}^{n-1} \\
&= \sum_n^\infty ia_n \frac{d\hat{K}^n}{d\hat{K}} \\
&= i \frac{d}{d\hat{K}} \left[\sum_n^\infty a_n \hat{K}^n \right] \\
&= i \frac{df(\hat{K})}{d\hat{K}}
\end{aligned}$$

QED, el otro conmutador se demuestra de la misma manera.

Theorem 1. Si dos operadores \hat{A} y \hat{B} conmutan, es decir que $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, estos comparten la misma base de auto vectores (luego, se dirá que comparten una base en común)

Demostración

Sean los operadores \hat{A} y \hat{B} , tal que:

$$\begin{aligned}
\hat{A} |n\rangle &= a_n |n\rangle \\
\hat{B} |n\rangle &= b_n |n\rangle
\end{aligned}$$

Luego, hacemos la siguiente operación:

$$\begin{aligned}
 [\hat{A}, \hat{B}] &= \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} / |n\rangle \\
 &= \hat{A}\hat{B} |n\rangle - \hat{B}\hat{A} |n\rangle \\
 &= \hat{A}b_n |n\rangle - \hat{B}a_n |n\rangle \\
 &= a_n b_n - b_n a_n = 0
 \end{aligned}$$

QED.

Observación *Esto solo demuestra que si dos operadores comparten una misma base, estos conmutaran. Físicamente, si los dos operadores están asociados a cantidades físicas y estos conmutan, eso implica que las cantidades físicas no se encuentran relacionadas entre si.*

Siguiendo con propiedades varias

$$\langle x | \hat{X} | \phi \rangle = \langle x | x | \phi \rangle = x \langle x | \phi \rangle = x \phi(x) \quad (53)$$

$$Si \quad \hat{A} | a \rangle = a | a \rangle \Rightarrow f(\hat{A}) | a \rangle = f(a) | a \rangle \quad (54)$$

$$\langle x | f(\hat{X}) | \phi \rangle = f(x) \phi(x) \quad (55)$$

$$\langle x | \hat{K} | \phi \rangle = -i \frac{d\phi(x)}{dx} \quad (56)$$

Demostración

$$\begin{aligned}
 \langle x | \hat{K} | \phi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle x | k \rangle \langle k | \hat{K} | \phi \rangle dk \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} k \langle x | k \rangle \langle k | \phi \rangle dk \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} (-i) \frac{d}{dx} \langle x | k \rangle \tilde{\phi}(k) dk \\
 &= -i \frac{d}{dx} \int_{-\infty}^{\infty} \langle x | k \rangle \tilde{\phi}(k) dk = -i \frac{d}{dx} \phi(x)
 \end{aligned}$$

A traves de la misma manera, se llega a:

$$\langle x | \hat{K}^n | \phi \rangle = (-i)^n \frac{d^n}{dx^n} \phi(x) \quad (57)$$

$$\langle x | g(\hat{K}) | \phi \rangle = g\left(-i \frac{d}{dx}\right) \phi(x) \quad (58)$$

Por otro lado, usando el espacio k, se tiene algo parecido.

$$\langle k | \hat{K} | \phi \rangle = k \langle k | \phi \rangle = k \tilde{\phi}(k) \quad (59)$$

$$\langle k | f(\hat{K}) | \phi \rangle = f(k) \tilde{\phi}(k) \quad (60)$$

Por ahora dejare de usar mayus para los operadores, ya lo arreglare

$$\langle k | \hat{x} | \phi \rangle = i \frac{d}{dk} \tilde{\phi}(k) \quad (61)$$

$$\langle k | f(\hat{x}) | \phi \rangle = f\left(i \frac{d}{dk}\right) \tilde{\phi}(k) \quad (62)$$

1.8.1 Proyecciones En el espacio de posición x

$$\begin{aligned} \hat{x} &\rightarrow x \\ f(\hat{x}) &\rightarrow f(x) \\ \hat{k} &\rightarrow -i \frac{d}{dx} \\ f(\hat{k}) &\rightarrow f\left(-i \frac{d}{dx}\right) \\ \hat{k}^2 &\rightarrow -\frac{d^2}{dx^2} \end{aligned}$$

En el espacio de numero de onda k

$$\begin{aligned} \hat{x} &\rightarrow i \frac{d}{dk} \\ f(\hat{x}) &\rightarrow f\left(i \frac{d}{dk}\right) \\ \hat{k} &\rightarrow k \\ f(\hat{k}) &\rightarrow f(k) \end{aligned}$$

Por tanto, tenemos la ecuacion matricial en el espacio de Hilbert que pasa a verse como una ecuacion diferencial en el espacio fisico.

Example 1. Proyectar la ecuacion $(\hat{x}\hat{k} + \hat{k}^2) |\phi\rangle = |\psi\rangle$ en el espacio físico

$$\begin{aligned} \langle x | (\hat{x}\hat{k} + \hat{k}^2) | \phi \rangle &= \langle x | \psi \rangle \\ \langle x | \hat{x}\hat{k} | \phi \rangle + \langle x | \hat{k}^2 | \phi \rangle &= \psi(x) \\ x \langle x | \hat{k} | \phi \rangle + \langle x | \hat{k}^2 | \phi \rangle &= \psi(x) \\ -ix \frac{d}{dx} \phi(x) - \frac{d^2}{dx^2} \phi(x) &= \psi(x) \end{aligned}$$

1.9 Sturm-Liouville

Pendiente

1.10 Transformaciones unitarias infinitesimales

$$\hat{U}(\hat{G})_\alpha = \hat{1} + i\alpha\hat{G} \quad \text{donde} \quad \hat{G}^\dagger = \hat{G} \quad \text{y} \quad \alpha \ll 1 \quad (63)$$

Podemos construir una transformación unitaria finita a través de n unitarias infinitesimales, tal que:

$$\hat{U}_\alpha(\hat{G}) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[\hat{1} + \frac{i\alpha}{n} \hat{G} \right]^n = e^{i\alpha\hat{G}} \quad (64)$$

1.11 Ecuacion de Schrodinger

Sea E la energía de una partícula tal que sea el autovalor de cierto operador \hat{H} llamado Hamiltoniano, por lo que

$$\hat{H}|\phi_E\rangle = E|\phi_E\rangle \quad (65)$$

Esta ecuación es general y no depende de ningún sistema de coordenadas. Para resolverla, necesito representar esta ecuación en alguna base dada.

1.12 Propiedades varias

$$e^{\alpha\hat{x}} = \sum_{n \geq 0} \frac{\alpha^n}{n!} \hat{x}^n \quad (66)$$

$$e^{-\alpha \frac{d}{dx}} \psi(x) = \psi(x - \alpha) \quad (67)$$

Demostración

Sea $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$ y la proyección $\hat{k} \rightarrow -i$ tal que:

$$\begin{aligned} e^{-\alpha \frac{d}{dx}} \psi(x) &= e^{-i\alpha\hat{k}} \langle x|\psi\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha\hat{k}} |k\rangle \langle k| \langle x|\psi\rangle dk \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha k} \langle x|k\rangle \langle k|\psi\rangle dk \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha k} \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}} \langle k|\psi\rangle dk \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ik(x-\alpha)}}{\sqrt{2\pi}} \langle k|\psi\rangle dk \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle x-\alpha|k\rangle \langle k|\psi\rangle dk \\ &= \langle x-\alpha|\psi\rangle \\ &= \psi(x-\alpha) \end{aligned}$$

$$Tr(\hat{A}\hat{B}) = Tr(\hat{B}\hat{A}) \quad (68)$$

Demostración

$$\begin{aligned} Tr(\hat{A}\hat{B}) &= \sum_{i=1}^N (\hat{A}\hat{B})_{ii} = \sum_{i=1}^N \langle u_i | \hat{A}\hat{B} | u_i \rangle = \sum_{i,j=1}^N \langle u_i | \hat{A} | u_j \rangle \langle u_j | \hat{B} | u_i \rangle \\ &= \sum_{i,j=1}^N \langle u_j | \hat{B} | u_i \rangle \langle u_i | \hat{A} | u_j \rangle = \sum_{j=1}^N \langle u_j | \hat{B}\hat{A} | u_j \rangle = \sum_{j=1}^N (\hat{B}\hat{A})_{jj} = Tr(\hat{B}\hat{A}) \end{aligned}$$

QED.

$$\hat{A}(\alpha |v\rangle + \beta |\omega\rangle) = \alpha \hat{A}|v\rangle + \beta \hat{A}|\omega\rangle \quad (69)$$

$$(\alpha \langle u| + \beta \langle \omega|) \hat{A} = \alpha \langle u| \hat{A} + \beta \langle \omega| \hat{A} \quad (70)$$

$$\langle u | \hat{A} | v \rangle^\dagger = \langle v | \hat{A}^\dagger | u \rangle \quad (71)$$

Demostración

Podemos escribir

$$\langle u | \hat{A} | v \rangle = \sum_{ij} u_i^* A_{ij} v_j$$

Por lo que el auto adjunto se puede escribir como:

$$\langle u | \hat{A} | v \rangle^\dagger = \langle u | \hat{A} | v \rangle^* = \sum_{ij} (u_i^* A_{ij} v_j)^* = \sum_{ij} v_j^* (A_{ij})^* u_i$$

Es fácil comprobar que $(A_{ij})^* = (\hat{A})_{ij}^* = (\hat{A}^\dagger)_{ji}$, por lo tanto

$$\langle u | \hat{A} | v \rangle^\dagger = \sum_{ij} v_j^* (A_{ij})^* u_i = \sum_{ij} v_j^* (\hat{A}^\dagger)_{ji}^* u_i = \langle v | \hat{A}^\dagger | u \rangle$$

QED.

$$(\hat{A}|u\rangle)^\dagger = \langle u | \hat{A}^\dagger \quad (72)$$

$$(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger \quad (73)$$

Demostración

Escribamos

$$\begin{aligned}
(\hat{A}\hat{B})_{ij} &= \sum_l^N A_{il}B_{lj} \quad /()^* \\
(\hat{A}\hat{B})_{ij}^* &= \sum_l^N A_{il}^*B_{lj}^* = \sum_l^N (\hat{B}^\dagger)_{jl}(\hat{A}^\dagger)_{li} = (\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger)_{ji} \\
\Rightarrow (\hat{A}\hat{B})_{ij}^* &= (\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger)_{ji} \\
((\hat{A}\hat{B})^\dagger)_{ji} &= (\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger)_{ji} \\
\Rightarrow (\hat{A}\hat{B})^\dagger &= \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger
\end{aligned}$$

QED.

$$\det(\hat{A}\hat{B}) = \det(\hat{A})\det(\hat{B}) \quad (74)$$

$$[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}] \quad (75)$$

$$[\hat{A}, \alpha\hat{B}] = [\alpha\hat{A}, \hat{B}] = \alpha[\hat{A}, \hat{B}] \quad (76)$$

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad (77)$$

$$[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}] = \hat{A}[\hat{B}, \hat{C}] + [\hat{A}, \hat{C}]\hat{B} \quad (78)$$

$$[\hat{A}, \hat{B}]^\dagger = -[\hat{B}, \hat{A}] \quad (79)$$

$$[\hat{A}, f(\hat{A})] = 0 \quad (80)$$

Siempre que la función se pueda expandir en serie de potencias $f(\hat{A}) = \sum c_n \hat{A}^n$

References