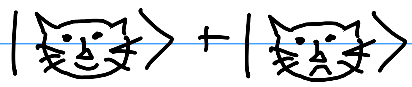
Esquema matemático y notación

- El estado de un sistema

- Clásicamente, para N partículas ~~tenemos~~ representamos el estado por $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{v}_1, \dots, \vec{v}_N$ (N vectores de pos. y vel.).

- Cuánticamente hay grados de libertad más allá que la posición (como el espín) y además existen estados de superposición.



- El estado de un sistema cuántico debe ser representado por un **vector**.

  - La dimensión del vector depende del sistema en cuestión:
    - 1 qubit : 2 dimensiones
    - Partícula en movimiento : dim infinita!
      (numerable o no numerable)
      estados de E $|n\rangle$, $|\vec{x}\rangle$ $|\vec{p}\rangle$

Espacio de Hilbert

usamos $\mathbb{C}$

- Espacio vectorial (Conjunto de vectores, campo, suma de vectores, producto por escalar)
- Producto interior (punto) $(\square, \square) : \mathcal{H} \times \mathcal{H} \to \mathbb{C}$
  - $(y, x) = (x, y)^*$
  - $(x, x) > 0$, $(x, x) = 0 \Rightarrow x = 0$
  - Lineal respecto a la segunda entrada y anti-lineal respecto a la primera.
- Espacio métrico completo (respecto a la norma del producto punto) (i.e. toda sucesión de Cauchy converge)

¿Por qué usamos $\mathbb{C}$?

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\Psi(\vec{r},t)$$

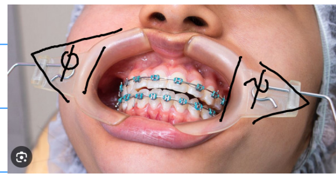
$\rho = |\Psi|$

Podríamos usar $\Psi(\vec{r},t) = u(\vec{r},t) + v(\vec{r},t)$ o $\Psi(\vec{r},t) = \rho(\vec{r},t)e^{i\alpha(\vec{r},t)}$
pero la representación compleja es más sencilla.

El producto interior entre elementos de $\mathcal{H}$ tiene la forma

$\langle\ \ \rangle$ Brackets

$$\underbrace{\langle \alpha |}_{\text{Bra}} - \underbrace{| \beta \rangle}_{\text{Ket}}$$



"Kets" = vectores

$|\Psi\rangle$ es como $\vec{\Psi}$

Kets

- Un vector en MC se denota por $|\text{etiqueta}\rangle$. La etiqueta puede ser cualquier cosa, a veces hasta dibujos.
- Podemos sumar dos kets $|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle$ y obtener otro ket.
- Producto por escalar $c\,|\alpha\rangle = |\alpha\rangle\, c$
- Físicamente $c\,|\alpha\rangle$ y $|\alpha\rangle$ van a representar el mismo estado. Lo que nos importa es la dirección (rayos).
- Los kets representan vectores columna.
- en relatividad esto es un vector con un índice abajo.

El producto interior $(|\beta\rangle, |\alpha\rangle) = \langle \beta | \alpha \rangle$

$$= \underbrace{\langle \beta | \cdot | \alpha \rangle}_{\text{no se usa}}$$

Propiedades del producto interior:

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

$\therefore\ \langle \alpha | \alpha \rangle \in \mathbb{R}$

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

Análogo $\langle\alpha|(|\beta\rangle + |\gamma\rangle) = \langle\alpha|\beta\rangle + \langle\alpha|\gamma\rangle$

Para $c \in \mathbb{C}$

$(c|\beta\rangle, |\alpha\rangle) = c^* \langle\beta|\alpha\rangle$ antilineal

$(|\beta\rangle, c|\alpha\rangle) = c\langle\beta|\alpha\rangle$ lineal

Def.

$|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$ son ORTOGONALES si $\langle\alpha|\beta\rangle = 0$

La norma de un ket $|\alpha\rangle$ es

$$\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}$$

Bras: un espacio vectorial dual (complementario) al espacio de kets

Definición matemática de Espacio Dual:

- Si consideramos un funcional lineal χ (i.e. una función que va del espacio de vectores $\mathcal{H}$ a los complejos.

$$|\alpha\rangle \in \mathcal{H} \xrightarrow{\chi} \text{número complejo } \chi(|\alpha\rangle)$$
$$\chi(a\,|\alpha\rangle + b\,|\beta\rangle) = a\chi(|\alpha\rangle) + b\chi(|\beta\rangle)$$

- ~~Ojo! Un funcional lineal no es un operador.~~

- el conjunto de todos los funcionales lineales χ definidos sobre $\mathcal{H}$ es un espacio vectorial y es el dual de $\mathcal{H}$.

- ~~$\chi(|\alpha\rangle) = \langle\chi|\alpha\rangle$~~ (esto va al final)

- La existencia de un producto escalar nos permite haccer la correspondencia $|\alpha\rangle \leftrightarrow \langle\alpha|$. Teniendo un ket $|\psi\rangle$ su correspondiente bra es el asociado al funcional lineal $\psi(|\alpha\rangle) = (|\psi\rangle, |\alpha\rangle) = \langle\psi|\alpha\rangle$

- ¿Cuál es el bra asociado a $a\,|\alpha\rangle + b\,|\beta\rangle$?

Para un $|\psi\rangle$ cualquiera, ¿Qué debo poner en "$\boxed{?}$" $|\psi\rangle$ para que sea $(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle, |\psi\rangle)$?

$$\begin{aligned}(a\,|\alpha\rangle + b\,|\beta\rangle, |\gamma\rangle) &= a^*(|\alpha\rangle, |\gamma\rangle) + b^*(|\beta\rangle, |\gamma\rangle)\\ &= a^*\langle\alpha|\gamma\rangle + b^*\langle\beta|\gamma\rangle\\ &= (a^*\langle\alpha| + b^*\langle\beta|)\,|\gamma\rangle\end{aligned}$$

por lo que el bra asociado a $a\,|\alpha\rangle + b\,|\beta\rangle$ es $a^*\langle\alpha| + b^*\langle\beta|$

El bra asociado a $|\psi\rangle$ que denotamos por $\langle\psi|$ es aquel que para cualquier ket $|\alpha\rangle$ tenemos $\langle\psi|\alpha\rangle = (|\psi\rangle, |\alpha\rangle)$. Aclarar que $\langle\psi| = (|\psi\rangle, \square)$

El razonamiento para definir al espacio dual es que primero uno define al espacio de funcionales lineales y luego uno nota que uno puede ver a cada elemento del dual como un producto punto: para dim finita es porque cada transformación lineal tiene una representación matricial y un funcional queda como vector renglón. En dim infinita esto es el teorema de representación de Reisz

Un funcional lineal $\chi : \mathcal{H} \to \mathbb{C}$ es una transformación lineal y por tanto tiene una representación matricial (en dim finita)

$$(\chi_1, \ldots\ldots, \chi_N) \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \psi_N \end{pmatrix} \in \mathbb{C}$$

producto de matrices queda como producto punto.

Para cada ket hay un bra (en dim infinita el recíproco no es cierto siempre)

la correspondencia entre Bras y kets es 1 a 1 en un espacio de Hilbert como $\mathcal{L}^2$ pero que a veces nos vamos a salir de $\mathcal{L}^2$ (usando $\delta(x)$ y e^{ikx}) y en esos casos hay que tener cuidado con los duales.

$$|\alpha\rangle \longleftrightarrow \langle\alpha| \qquad |\alpha\rangle + |\beta\rangle \longleftrightarrow \langle\alpha| + \langle\beta|$$

$$a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle \longleftrightarrow a^*\langle\alpha| + b^*\langle\beta|$$

Un ket se escribe como vector columna y un bra es fila

$$|\alpha\rangle \sim \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_N \end{pmatrix} \qquad \langle\beta| \sim (\beta_1, \ldots, \beta_N)$$

Operadores

Transformación lineal

$$\hat{A} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$$

aplicado a

producto

$$\hat{A}(|\psi\rangle) = \hat{A}|\psi\rangle$$

matriz cuadrada.

en AL aprendemos que toda T.L. se puede ver como un producto por matriz

— Son importantes porque a cada observable físico (R, P, L, n, J, E ..) asociamos un operador.

Propiedades de operadores

- $\hat{A}|\psi\rangle$ no es necesariamente paralelo a $|\psi\rangle$; i.e. $\nexists\, c,\ A|\psi\rangle \neq c|\psi\rangle$

- $\hat{A}|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ¿Cuál es su dual? no es $\langle\psi|\hat{A}$ ¿Qué obj. matemático es esto?

Def. → El dual de $\hat{A}|\psi\rangle$ es $\langle\psi|\hat{A}^{+}$

$\hat{A}^{+}$ es el conjugado hermitiano
hermítico

¿Qué relación tienen $\hat{A}$ y $\hat{A}^{+}$?

¿cómo es {?} para que $\{?\}|\gamma\rangle = (A|\psi\rangle, |\gamma\rangle)$

$$\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle = \left(|\alpha\rangle, \hat{A}|\beta\rangle\right) = \left(\hat{A}^{+}|\alpha\rangle, |\beta\rangle\right)$$

En tarea $\left(\hat{A}\hat{B}\right)^{+} = \hat{B}^{+}\hat{A}^{+}$

El conjugado Hermitiano de $\hat{A}$ es el operador que habría que aplicarle a $|\alpha\rangle$ para que el (D,D) quede igual.

- La matriz asociada a $\hat{A}^{+}$ es la transpuesta y complejo-conjugada de A (lo probaremos)

→ Como $A|\psi\rangle \leftrightarrow \langle\psi|A^{+}$ $\quad \langle\psi|A^{+}|\varphi\rangle = \langle\varphi|A|\psi\rangle^{*}$ pues $\langle\psi'|\varphi\rangle = \langle\varphi|\psi'\rangle$ con $|\psi'\rangle = A|\psi\rangle$

- Def: A es hermitiano si $A = A^{+}$

→ $\hat{A}, \hat{B}$ operadores $\hat{A}\hat{B}$ operador.

→ OJO: $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$

→ Definir conmutador $[A,B] = AB - BA$

→ Con kets y bras podemos definir operadores.

Producto exterior $|\alpha\rangle\langle\beta|$

$\begin{pmatrix}\alpha_1\\ \vdots \\ \alpha_N\end{pmatrix}(\beta_1 \cdots \beta_N)$ matricial

ojo $|\alpha\rangle\langle\beta| = |\alpha\rangle\langle\beta|$