Tema 2
El formalismo matematico de la Mecanica Cuantica

Alfonso V. Ramallo

La mecanica cuantica, como muchas otras partes de la fisica, requiere para su formulacion precisa de una serie de conceptos matematicos. El objetivo de este tema es introducir de manera simplificada dicho formalismo. El concepto central con el que trataremos sera el de **espacio de Hilbert**, que es simplemente un espacio vectorial sobre el cuerpo de los numeros complejos dotado de un producto interior definido positivo. En este tema nos restringiremos al caso de espacios de Hilbert de dimension finita y dejaremos la generalizacion a espacios de dimension infinita (mucho mas complicada tecnicamente) para un tema posterior. La gran mayoria de los conceptos que introduciremos deberian ser conocidos de los cursos de algebra lineal. Otro de los objetivos de este tema es familiarizarse con la notacion de Dirac de "bras" y "kets", que es parte esencial del lenguaje cuantico. Aunque en espacios infinito-dimensionales esta notacion puede resultar muy abstracta, es bastante mas comprensible en el caso de tener un espacio de Hilbert de dimension finita.

1 Espacios de Hilbert

Sea $\mathcal{H}$ un conjunto de elementos:

$$\mathcal{H} \,=\, \{|\varphi\rangle, |\chi\rangle, \cdots\} \;. \tag{1.1}$$

Supongamos que $\mathcal{H}$ es un espacio vectorial sobre el cuerpo $\mathbb{C}$ de los numeros complejos, en el cual estan definidas las operaciones:

-Suma

$$|\varphi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H} \qquad \Longrightarrow \qquad |\varphi\rangle + |\chi\rangle \in \mathcal{H} \;. \tag{1.2}$$

-Multiplicacion por un escalar

$$|\varphi\rangle \in \mathcal{H} \;,\; \alpha \in \mathbb{C} \qquad \Longrightarrow \qquad \alpha\,|\varphi\rangle \in \mathcal{H} \;. \tag{1.3}$$

Como en todo espacio vectorial la suma es conmutativa, asociativa, tiene elemento neutro (denotado por 0) y es invertible (el inverso de $|\varphi\rangle$ se denota $|-\varphi\rangle$):

$$
\begin{aligned}
&|\varphi\rangle + |\chi\rangle = |\chi\rangle + |\varphi\rangle \,, \\
&(|\varphi\rangle + |\chi\rangle) + |\phi\rangle = |\varphi\rangle + (|\chi\rangle) + |\phi\rangle) \,, \\
&|\varphi\rangle + 0 = 0 + |\varphi\rangle = |\varphi\rangle \,, \\
&|\varphi\rangle + |-\varphi\rangle = 0 \,.
\end{aligned}
\tag{1.4}
$$

La multiplicacion por un escalar es tambien asociativa, tiene elemento neutro (el numero complejo 1) y satisface la ley distributiva:

$$
\begin{aligned}
&\alpha(\beta|\psi\rangle) = \alpha\beta|\psi\rangle \\
&1\,|\varphi\rangle = |\varphi\rangle \,, \\
&\alpha\,(|\varphi\rangle + |\chi\rangle) = \alpha|\varphi\rangle + \alpha|\chi\rangle \,, \\
&(\alpha+\beta)|\chi\rangle = \alpha\,|\chi\rangle + \beta|\chi\rangle
\end{aligned}
\tag{1.5}
$$

Nota.

Estamos utilizando la notacion de Dirac para denotar vectores. En lugar de denotarlos con una flecha ($\vec{\chi}\,, \vec{\varphi}, \cdots$) los denotaremos con un "ket" ($|\chi\rangle, |\varphi\rangle, \cdots$). Si $\alpha \in \mathbb{C}$ y $|\chi\rangle$ es un vector, denotaremos a veces $\alpha\,|\chi\rangle \equiv |\alpha\,\chi\rangle$.

Definamos ahora el producto interno o **producto escalar hermitico**.

Definicion.

Un producto escalar hermitico es una aplicacion:

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H}\times\mathcal{H} &\to \mathbb{C} \\
(|\chi\rangle, |\varphi\rangle &\mapsto \langle\chi|\varphi\rangle
\end{aligned}
\tag{1.6}
$$

que satisface las siguientes propiedades:

1.- **Linealidad**. Si $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$, se verifica que:

$$
\boxed{\langle\chi|\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2\rangle = \lambda_1\,\langle\chi|\varphi_1\rangle + \lambda_2\,\langle\chi|\varphi_2\rangle}
\tag{1.7}
$$

2.- **Hermiticidad**.

$$
\boxed{\langle\chi|\varphi\rangle = \langle\varphi|\chi\rangle^*}
\tag{1.8}
$$

3.- **Es definido positivo**. Es decir $\langle\varphi|\varphi\rangle \geq 0$ y

$$\boxed{\langle\varphi|\varphi\rangle = 0 \iff |\varphi\rangle = 0} \tag{1.9}$$

Una de las consecuencias inmediatas de esta definicion es la llamada **antilinealidad**, que es la propiedad siguiente:

$$\boxed{\langle\lambda_1\chi_1 + \lambda_2\chi_2|\varphi\rangle \;=\; \lambda_1^*\,\langle\chi_1|\varphi\rangle \;+\; \lambda_2^*\,\langle\chi_2|\varphi\rangle} \tag{1.10}$$

para todo $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$. Demostremos esta propiedad:

$$\langle\lambda_1\chi_1 + \lambda_2\chi_2|\varphi\rangle \;=\; \langle\varphi|\lambda_1\chi_1 + \lambda_2\chi_2\rangle^* \;=\; \lambda_1^*\,\langle\varphi|\chi_1\rangle^* \;+\; \lambda_2^*\,\langle\varphi|\chi_2\rangle^* \;=$$

$$=\; \lambda_1^*\,\langle\chi_1|\varphi\rangle \;+\; \lambda_2^*\,\langle\chi_2|\varphi\rangle \;. \tag{1.11}$$

Dado un producto escalar hermitico, podemos definir una **norma**, que asocia a todo vector $|\varphi\rangle$ un numero real $||\varphi||$, definido como:

$$\boxed{||\varphi|| \;=\; \sqrt{\langle\varphi|\varphi\rangle}} \tag{1.12}$$

Notese que $\langle\varphi|\varphi\rangle$ es real y no negativo, por las propiedades del producto hermitico.

La desigualdad de Schwarz

Sean $|\varphi\rangle$ y $|\chi\rangle$ elementos arbitrarios de $\mathcal{H}$. Entonces:

$$\boxed{\big|\langle\chi|\varphi\rangle\big|^2 \leq \langle\chi|\chi\rangle\,\langle\varphi|\varphi\rangle \;=\; ||\chi||^2\;||\varphi||^2} \tag{1.13}$$

La igualdad ocurre si y solo si $|\chi\rangle$ y $|\varphi\rangle$ son proporcionales entre si, es decir si $|\chi\rangle \;=\; \alpha\,|\varphi\rangle$ para algun $\alpha \in \mathbb{C}$.

Demostracion El teorema es trivial si $\langle\chi|\varphi\rangle = 0$. Supongamos, por tanto, que $\langle\chi|\varphi\rangle \neq 0$. Sea $\lambda \in \mathbb{C}$ un numero complejo arbitrario. Por la no negaticidad de la norma, tenemos:

$$\langle(\varphi - \lambda\chi)|(\varphi - \lambda\chi)\rangle \geq 0 \;. \tag{1.14}$$

Desarrollemos el primer miembro de esta desigualdad:

$$||\varphi||^2 - \lambda^*\langle\chi|\varphi\rangle - \lambda\langle\varphi|\chi\rangle \;+\; |\lambda|^2\,||\chi||^2 \geq 0 \;, \tag{1.15}$$

que se tiene que verificar para todo λ. Escojamos ahora el siguiente valor particular de λ:

$$\lambda \;=\; \frac{||\varphi||^2}{\langle\varphi|\chi\rangle}\;, \qquad \rightarrow \qquad \lambda^* \;=\; \frac{||\varphi||^2}{\langle\varphi|\chi\rangle^*} \;=\; \frac{||\varphi||^2}{\langle\chi|\varphi\rangle}\;. \tag{1.16}$$

Entonces $\lambda^*\langle\chi|\varphi\rangle = \lambda\langle\varphi|\chi\rangle = ||\varphi||^2$ y la desigualdad (1.15) se convierte en:

$$-||\varphi||^2 + \frac{||\varphi||^4\,||\chi||^2}{|\langle\chi|\varphi\rangle|^2} \geq 0\ . \tag{1.17}$$

Si $||\varphi|| = 0$ entonces $|\varphi\rangle = 0$ y el teorema se verifica trivialmente. Supongamos pues que $||\varphi||$ no se anula y dividamos la expresion anterior por $||\varphi||$ para obtener:

$$-1 + \frac{||\varphi||^2\,||\chi||^2}{|\langle\chi|\varphi\rangle|^2} \geq 0\ , \tag{1.18}$$

que es equivalente a la desigualdad del enunciado del teorema. Ademas, si $|\chi\rangle = \alpha|\varphi\rangle$ para algun $\alpha \in \mathbb{C}$, se tiene:

$$|\langle\chi|\varphi\rangle|^2 \;=\; |\alpha|^2\,\langle\varphi|\varphi\rangle^2 \;=\; |\alpha|^2\,||\varphi||^4\ ,$$

$$||\chi||^2\ ||\varphi||^2 \;=\; |\alpha|^2\,||\varphi||^2\,||\varphi||^2\ , \tag{1.19}$$

y la desigualdad de Schwarz se convierte en igualdad.

Consideremos a partir de ahora que el espacio vectorial $\mathcal{H}$ es de dimension finita. Al espacio $\mathcal{H}$ dotado del producto escalar hermitico lo llamaremos **espacio de Hilbert**. Supongamos que escogemos en $\mathcal{H}$ una base ortonormal, que denotaremos como:

$$\{\,|n\rangle\} \;=\; \{|1\rangle\,,\,|2\rangle\,,\,\cdots\,,\,|N\rangle\}\ , \tag{1.20}$$

siendo $N = \dim\mathcal{H}$. El caracter ortonormal de la base implica que:

$$\langle n|m\rangle \;=\; \delta_{n,m}\ , \qquad\qquad n, m = 1, \cdots N\ . \tag{1.21}$$

Ademas, todo vector de $\mathcal{H}$ puede expresarse como combinacion lineal de los elementos de esta base:

$$|\varphi\rangle \;=\; \sum_{n=1}^{N} c_n\,|n\rangle\ , \qquad\qquad \forall|\varphi\rangle \in \mathcal{H}\ , \tag{1.22}$$

siendo c_n numeros complejos (las coordenadas o componentes de $|\varphi\rangle$ en la base (1.20)). Estas coordenadas pueden obtenerse multiplicando $|\varphi\rangle$ por el vector $|m\rangle$ de la base:

$$\langle m|\varphi\rangle \;=\; \sum_{n=1}^{N} c_n\,\langle m|n\rangle \;=\; \sum_{n=1}^{N} c_n\delta_{m,n}\ , \tag{1.23}$$

es decir, las componentes c_m de $|\varphi\rangle$ en la base ortonormal son:

$$c_m \;=\; \langle m|\varphi\rangle\ , \qquad\qquad m = 1, \cdots N\ . \tag{1.24}$$

Expresemos el producto escalar en terminos de las componentes de los vectores. Sean

$$|\varphi\rangle \;=\; \sum_{n=1}^{N} c_n\,|n\rangle\ , \qquad\qquad |\chi\rangle \;=\; \sum_{m=1}^{N} d_m\,|m\rangle\ . \tag{1.25}$$

Entonces, de las propiedades de linealidad y antilinealidad del producto hermitico, se sigue $\langle\chi|\varphi\rangle$ es:

$$\langle\chi|\varphi\rangle \;=\; \sum_{n,m=1}^{N} d_m^*\, c_n\, \langle m|n\rangle \;=\; \sum_{n,m=1}^{N} d_m^*\, c_n\, \delta_{m,n} \;. \tag{1.26}$$

Es decir:

$$\boxed{\langle\chi|\varphi\rangle \;=\; \sum_{n=1}^{N} d_n^*\, c_n} \tag{1.27}$$

En particular, la norma de un vector de componentes c_n es:

$$\boxed{||\varphi||^2 \;=\; \sum_{n=1}^{N} |c_n|^2 \geq 0} \tag{1.28}$$

2 El espacio dual

Consideremos el espacio $\mathcal{H}^*$ de funcionales lineales en $\mathcal{H}$, es decir de aplicaciones lineales $\mathcal{H} \to \mathbb{C}$. Es facil ver que $\mathcal{H}^*$ es tambien un espacio vectorial si se definen la suma y multiplicacion por un escalar como sigue. Sean f y g dos aplicaciones lineales de $\mathcal{H}$ en $\mathbb{C}$ y λ un numero complejo. Entonces, $f+g$ es la aplicacion:

$$\begin{aligned} f+g\,:\,\mathcal{H} &\;\to\; \mathbb{C} \\ |\varphi\rangle &\mapsto (f+g)(|\varphi\rangle) \equiv f(|\varphi\rangle) + g(|\varphi\rangle)\;, \end{aligned} \tag{2.1}$$

y $\lambda\, f$ es:

$$\begin{aligned} \lambda\, f\,:\,\mathcal{H} &\;\to\; \mathbb{C} \\ |\varphi\rangle &\mapsto (\lambda\, f)(|\varphi\rangle) \equiv \lambda\, f(|\varphi\rangle)\;. \end{aligned} \tag{2.2}$$

El espacio $\mathcal{H}^*$ se dice que es el **espacio dual** de $\mathcal{H}$ y sus elementos se llaman **formas lineales** o **vectores duales**. Esta ultima denominacion esta justificada por el hecho que $\mathcal{H}^*$ es isomorfo a $\mathcal{H}$. De hecho, dado un vector $|\chi\rangle$ es posible asociarle una forma lineal, que denotaremos por $\langle\chi|$, definida como la siguiente aplicacion de $\mathcal{H}^*$:

$$\begin{aligned} \langle\chi|\,:\,\mathcal{H} &\;\to\; \mathbb{C} \\ |\varphi\rangle &\mapsto \langle\chi|\varphi\rangle \end{aligned} \tag{2.3}$$

Es decir la forma lineal asociada a $|\chi\rangle$ es la que multiplica todos los vectores por $|\chi\rangle$. Esta relacion de dualidad la representaremos por medio de la llamada **conjugacion hermitica**, que se denota por el simbolo $\dagger$. Escribiremos:

$$\big(|\chi\rangle\big)^\dagger \;=\; \langle\chi|\;. \tag{2.4}$$

El vector dual $\langle\chi|$ se denomina vector "bra". Observese que si $|\chi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$, su dual actua sobre $|\varphi\rangle$ como:

$$\sum_n c_n^* \langle n|\varphi\rangle \ . \tag{2.5}$$

Por lo tanto, tenemos:

$$|\chi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \qquad \rightarrow \qquad \langle\chi| \ = \ \big(|\chi\rangle\big)^\dagger \ = \sum_n c_n^* \langle n| \ . \tag{2.6}$$

Observacion

Hasta ahora habiamos considerado los vectores "invertidos" $\langle\chi|$ como parte de nuestra notacion del producto escalar. Las definiciones anteriores demuestran que pueden ser considerados como vectores duales. Si los representamos como matrices en terminos de sus componentes en una base ortonormal, los vectores "ket" seran matrices columna:

$$|\varphi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle \qquad \rightarrow \qquad |\varphi\rangle \ \rightarrow \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ a_N \end{pmatrix} \ . \tag{2.7}$$

Los vectores duales (bra) los representaremos como matrices fila:

$$\langle\chi| = \sum_n c_n^* \langle n| \qquad \rightarrow \qquad \langle\chi| \rightarrow (c_1^*, c_2^*, \cdots, c_N^*) \ . \tag{2.8}$$

En terminos de sus componentes, el producto escalar es simplemente el producto ordinario de matrices:

$$\langle\chi|\varphi\rangle \ = \ (c_1^*, c_2^*, \cdots, c_N^*) \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ a_N \end{pmatrix} \ = \ c_1^* \, a_1 \ + \ c_2^* \, a_2 \ + \ \cdots \ c_N^* \, a_N \ . \tag{2.9}$$

Notemos tambien que la operacion de conjugacion hermitica sobre las componentes de un vector corresponde a la trasposicion seguida de la conjugacion compleja:

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ c_N \end{pmatrix}^\dagger \ = \ (c_1^*, c_2^*, \cdots, c_N^*) \ . \tag{2.10}$$

3 Operadores lineales

Definicion

Un operador lineal A es una aplicacion $\mathcal{H} \to \mathcal{H}$ que lleva el vector $|\varphi\rangle$ al vector $|A\varphi\rangle$:

$$\begin{aligned} A : \mathcal{H} &\to \mathcal{H} \\ |\varphi\rangle &\mapsto |A\varphi\rangle \end{aligned} \tag{3.1}$$

de tal manera que se satisface la condicion de linealidad, es decir que para todos $|\varphi\rangle, |\chi\rangle \in \mathcal{H}$ y $\lambda \in \mathbb{C}$ se verifica:

$$|A(\varphi + \lambda\chi)\rangle \;=\; |A\varphi\rangle + \lambda|A\chi\rangle \ . \tag{3.2}$$

Veamos como transforma el operador A las componentes de un vector en una base ortonormal. Debido al caracter lineal de A, tenemos:

$$|\varphi\rangle \;=\; \sum_n c_n\, |n\rangle \qquad \to \qquad |A\varphi\rangle \;=\; \sum_n c_n\, |A\, n\rangle \ . \tag{3.3}$$

Expresemos $|A\varphi\rangle$ en una base ortonormal como:

$$|A\varphi\rangle \;=\; \sum_m d_m\, |m\rangle \ . \tag{3.4}$$

Igualando estas dos ultimas expresiones, tenemos:

$$\sum_m d_m\, |m\rangle \;=\; \sum_n c_n\, |A\, n\rangle \ . \tag{3.5}$$

Si ahora multiplicamos escalarmente los dos miembros de esta ecuacion por el vector $|l\rangle$ de la base ortonormal, obtenemos:

$$\sum_m d_m\, \langle l|m\rangle \;=\; \sum_m d_m\, \delta_{l,m} \;=\; \sum_n c_n\, \langle l|A\, n\rangle \ . \tag{3.6}$$

Si definimos los **elementos de matriz del operador** A en la base $\{|n\rangle\}$ como:

$$\boxed{A_{ln} \;\equiv\; \langle l|A\, n\rangle} \qquad\qquad l, n = 1, \cdots N \ , \tag{3.7}$$

entonces, la relacion (3.6) entre las componentes de los vectores $|\varphi\rangle$ y $|A\varphi\rangle$ puede escribirse como:

$$\boxed{d_l \;=\; \sum_{n=1}^{N} A_{ln}\, c_n} \tag{3.8}$$

En forma de matriz, esta relacion se escribe como:

$$\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ d_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & \cdot & \cdot & \cdot & A_{1N} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ A_{N1} & \cdot & \cdot & \cdot & A_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ c_N \end{pmatrix} . \tag{3.9}$$

Definicion

Sean $|\chi\rangle$ y $|\varphi\rangle$ dos vectores de $\mathcal{H}$. Podemos asociar a estos dos vectores el operador lineal $P_{\chi\varphi} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, que actua sobre un vector arbitrario $|\alpha\rangle \in \mathcal{H}$ como:

$$P_{\chi\varphi}\big(|\alpha\rangle\big) = \langle\varphi|\alpha\rangle\ |\chi\rangle\ . \tag{3.10}$$

Por las propiedades del producto escalar hermitico, $P_{\chi\varphi}$ es un operador lineal. Siguiendo la **notacion de Dirac** escribiremos el operador $P_{\chi\varphi}$ como:

$$\boxed{P_{\chi\varphi} = |\chi\rangle\langle\varphi|} \tag{3.11}$$

es decir como el producto de un ket (a la izquierda) y un bra (a la derecha). La accion de $P_{\chi\varphi}$ sobre un estado $|\alpha\rangle$ se obtiene juntando el bra de $P_{\chi\varphi}$ con el ket sobre el que actua:

$$P_{\chi\varphi}\big(|\alpha\rangle\big) = |\chi\rangle\langle\varphi|\alpha\rangle\ . \tag{3.12}$$

Escribamos $P_{\varphi_1\varphi_2} = |\varphi_1\rangle\langle\varphi_2|$ en terminos de sus componentes. Sean:

$$|\varphi_1\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ a_N \end{pmatrix} , \qquad |\varphi_2\rangle = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ b_N \end{pmatrix} \ \to\ \langle\varphi_2| = (b_1^*, b_2^*, \cdots, b_N^*)\ . \tag{3.13}$$

Entonces la matriz correspondiente a $P_{\varphi_1\varphi_2}$ se obtiene simplemente haciendo el producto ordinario de matrices:

$$|\varphi_1\rangle\langle\varphi_2| = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ a_N \end{pmatrix} (b_1^*, b_2^*, \cdots, b_N^*) = \begin{pmatrix} a_1\, b_1^* & a_1\, b_2^* & \cdot & \cdot & a_1\, b_N^* \\ a_2\, b_1^* & a_2\, b_2^* & \cdot & \cdot & a_2\, b_N^* \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_N\, b_1^* & a_N\, b_2^* & \cdot & \cdot & a_N\, b_N^* \end{pmatrix} . \tag{3.14}$$

Podemos comprobar directamente este resultado a partir de (3.7):

$$\Big(P_{\varphi_1\varphi_2}\Big)_{ln} \;=\; \langle l|P_{\varphi_1\varphi_2}\, n\rangle \;=\; \langle l|\varphi_1\rangle\,\langle\varphi_2|n\rangle\ . \tag{3.15}$$

Teniendo en cuenta que, segun (3.13):

$$\langle l|\varphi_1\rangle \;=\; a_l\ , \qquad\qquad \langle\varphi_2|n\rangle \;=\; \langle n|\varphi_2\rangle^* \;=\; b_n^*\ , \tag{3.16}$$

obtenemos:

$$\Big(P_{\varphi_1\varphi_2}\Big)_{ln} \;=\; a_l\, b_n^*\ , \tag{3.17}$$

que coinciden con las componentes de la matrix (3.14).

Al producto $|\varphi_1\rangle\langle\varphi_2|$ se le denomina **producto externo de los vectores** $|\varphi_1\rangle$ y $|\varphi_2\rangle$. En particular, podemos definir los operadores P_{mn}, donde los dos vectores son elementos de la base ortonormal:

$$P_{mn} \;=\; |m\rangle\langle n|\ . \tag{3.18}$$

Teorema

Sea A un operador lineal con elementos de matriz A_{mn}. Entonces A puede escribirse como combinacion lineal de los operadores P_{mn}, en la forma:

$$\boxed{A \;=\; \sum_{m,n=1}^{N} A_{mn}\ |m\rangle\langle n|} \tag{3.19}$$

Demostracion

Recordemos como actua A cuando los vectores se expresan como combinacion lineal de los elementos de una base ortonormal (ecuaciones (3.4) y (3.8)):

$$|\varphi\rangle = \sum_l a_l|l\rangle \qquad \rightarrow \qquad |A\varphi\rangle \;=\; \sum_m \Big(\sum_n A_{mn}\, a_n\Big)|m\rangle\ . \tag{3.20}$$

Entonces, si hacemos actuar el segundo miembro de (3.19) sobre $|\varphi\rangle$, tenemos:

$$\begin{aligned}\Big(\sum_{m,n} A_{mn}|m\rangle\langle n|\Big)|\varphi\rangle \;&=\; \sum_{m,n,l} A_{mn}\, a_l\, |m\rangle\,\langle n|l\rangle \;=\; \sum_{m,n,l} A_{mn}\, a_l\, |m\rangle\, \delta_{n,l} \;= \\ =\; \sum_{m,n} A_{mn}\, a_n\, |m\rangle \;&=\; \sum_m \Big(\sum_n A_{mn}\, a_n\Big)|m\rangle \;=\; |A\varphi\rangle\ ,\end{aligned} \tag{3.21}$$

como queriamos demostrar.

Sea I el operador identidad, es decir el operador que actua sobre cualquier vector $|\varphi\rangle$ como:

$$|I\varphi\rangle \;=\; |\varphi\rangle\ . \tag{3.22}$$

Entonces, los elementos de matriz de I son:

$$I_{mn} \;=\; \langle m|I\,n\rangle \;=\; \langle m|n\rangle \;=\; \delta_{m,n}\;, \tag{3.23}$$

y aplicando la formula general (3.19), llegamos a:

$$I \;=\; \sum_{m,n=1}^{N} \delta_{m,n}\; |m\rangle\langle n|\;. \tag{3.24}$$

Hemos demostrado de esta forma la denominada **formula de resolucion de la unidad**:

$$\boxed{I \;=\; \sum_{n=1}^{N} |n\rangle\langle n|} \tag{3.25}$$

(a veces escribiremos 1 en lugar del operador unidad I).

Ejemplo

Sea la siguiente base ortonormal de $\mathbb{C}^2$:

$$|\lambda_1\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}\;, \qquad\qquad |\lambda_2\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}i\\ 1\end{pmatrix}\;. \tag{3.26}$$

Comprobemos que $\langle\lambda_i|\lambda_j\rangle \;=\; \delta_{ij}$:

$$\begin{aligned}
\langle\lambda_1|\lambda_1\rangle \;&=\; \frac{1}{2}(1,-i)\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix} \;=\; \frac{1}{2}\big(1+(-i)(i)\big) \;=\; 1\;,\\
\langle\lambda_2|\lambda_2\rangle \;&=\; \frac{1}{2}(-i,1)\begin{pmatrix}i\\ 1\end{pmatrix} \;=\; \frac{1}{2}\big((-i)(i)+1\big) \;=\; 1\;,\\
\langle\lambda_1|\lambda_2\rangle \;&=\; \frac{1}{2}(1,-i)\begin{pmatrix}i\\ 1\end{pmatrix} \;=\; \frac{1}{2}\big(i-i\big) \;=\; 0\;.
\end{aligned} \tag{3.27}$$

Comprobemos ahora la formula de resolucion de la unidad. Como:

$$\begin{aligned}
|\lambda_1\rangle\langle\lambda_1| \;&=\; \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1\\ i\end{pmatrix}(1,-i) \;=\; \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & -i\\ i & 1\end{pmatrix}\;,\\
|\lambda_2\rangle\langle\lambda_2| \;&=\; \frac{1}{2}\begin{pmatrix}i\\ 1\end{pmatrix}(-i,1) \;=\; \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & i\\ -i & 1\end{pmatrix}\;.
\end{aligned} \tag{3.28}$$

Entonces:

$$|\lambda_1\rangle\langle\lambda_1| \;+\; |\lambda_2\rangle\langle\lambda_2| \;=\; \frac{1}{2}\begin{pmatrix}2 & 0\\ 0 & 2\end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}\;, \tag{3.29}$$

tal como queriamos demostrar.

La multiplicacion de dos operadores A y B se define como su composicion: la imagen del vector $|\varphi\rangle$ bajo el operador producto AB es la que se obtiene aplicando en primer lugar el operador B a $|\varphi\rangle$, y despues el operador A a $|B\varphi\rangle$. En general el producto de operadores no es conmutativo, es decir AB no es igual a BA.

Demostremos ahora que el producto de operadores tiene como elementos de matriz los de la matriz producto. Es decir la **matriz del producto de operadores es el producto de las matrices**. Sean A y B los operadores:

$$A \,=\, \sum_{m,n} A_{mn}|m\rangle\,\langle n|\ , \qquad B \,=\, \sum_{m,n} B_{mn}|m\rangle\,\langle n|\ , \tag{3.30}$$

entonces

$$\boxed{A\,B \,=\, \sum_{p,m} \big(A\,B\big)_{pm}\,|p\rangle\,\langle m|\ , \qquad \big(A\,B\big)_{pm} \,=\, \sum_{n} A_{pn}\,B_{nm}} \tag{3.31}$$

Para probarlo, calculemos los elementos de matriz del producto utilizando la formula de resolucion de la unidad $I = \sum_n |n\rangle\langle n|$:

$$A\,B\,|m\rangle \,=\, \sum_n |A\,n\rangle\langle n|B\,m\rangle \,=\, \sum_n B_{nm}\,|A\,n\rangle\ . \tag{3.32}$$

Multiplicando escalarmente por el vector $|p\rangle$, llegamos a:

$$\big(A\,B\big)_{pm} \,=\, \langle p|A\,B\,m\rangle \,=\, \sum_n B_{nm}\,\langle p|A\,n\rangle \,=\, \sum_n A_{pn}\,B_{nm}\ , \tag{3.33}$$

tal como queriamos demostrar. En particular, se sigue de este resultado que al operador A^{-1}, que satisface $A\,A^{-1} \,=\, A^{-1}\,A \,=\, I$, le corresponde la matriz inversa de A_{mn}.

Ejemplo

Estudiemos la multiplicacion de dos productos externos de vectores. Sean:

$$P_{\varphi_1\,\varphi_2} \,=\, |\varphi_1\rangle\langle\varphi_2|\ , \qquad\qquad P_{\chi_1\,\chi_2} \,=\, |\chi_1\rangle\langle\chi_2|\ . \tag{3.34}$$

Veamos entonces que:

$$P_{\varphi_1\,\varphi_2}\,P_{\chi_1\,\chi_2} \,=\, \langle\varphi_2|\chi_1\rangle\,|\varphi_1\rangle\,\langle\chi_2| \,=\, \langle\varphi_2|\chi_1\rangle\,P_{\varphi_1\,\chi_2}\ . \tag{3.35}$$

En efecto, sea $\alpha \in \mathcal{H}$, entonces:

$$\begin{aligned} P_{\varphi_1\,\varphi_2}\,P_{\chi_1\,\chi_2}|\alpha\rangle \,&=\, \langle\chi_2|\alpha\rangle\,P_{\varphi_1\,\varphi_2}|\chi_1\rangle \,=\, \langle\chi_2|\alpha\rangle\,\langle\varphi_2|\chi_1\rangle\,|\varphi_1\rangle \,= \\ &=\, \Big(\langle\varphi_2|\chi_1\rangle\,|\varphi_1\rangle\,\langle\chi_2|\Big)\,|\alpha\rangle \,=\, \langle\varphi_2|\chi_1\rangle\,P_{\varphi_1\,\chi_2}|\alpha\rangle\ , \end{aligned} \tag{3.36}$$

como queriamos demostrar.

4 Operadores hermiticos y unitarios

Definicion

El **hermitico conjugado** (o **adjunto**) de un operador A, denotado por $A^\dagger$, se define como el operador que para cada par de vectores $|\varphi\rangle$y $|\chi\rangle$ satisface:

$$\boxed{\langle\chi|A^\dagger\,\varphi\rangle \;=\; \langle A\,\chi|\varphi\rangle \;=\; \langle\varphi|A\,\chi\rangle^*} \tag{4.1}$$

Obtengamos los elementos de matriz de $A^\dagger$ en la base $\{|n\rangle\}$. Para ello tomemos $|\chi\rangle = |m\rangle$ y $|\varphi\rangle = |n\rangle$ en la definicion de $A^\dagger$:

$$\big(A^\dagger\big)_{mn} \;=\; \langle m|A^\dagger\,n\rangle \;=\; \langle n|A\,m\rangle^* \;, \tag{4.2}$$

o, lo que es lo mismo:

$$\boxed{\big(A^\dagger\big)_{mn} \;=\; A^*_{nm}} \tag{4.3}$$

Asi pues, sobre los elementos de matriz, el hermitico conjugado es equivalente a **trasponer y hacer la conjugacion compleja**. Probemos ahora que:

$$\boxed{\big(A\,B\,\big)^\dagger \;=\; B^\dagger\,A^\dagger} \tag{4.4}$$

En efecto, de la definicion de hermitico conjugado de un operador, se sigue:

$$\langle\chi|\big(A\,B\,\big)^\dagger\varphi\rangle \;=\; \langle AB\,\chi|\varphi\rangle \;=\; \langle B\chi|A^\dagger\varphi\rangle \;=\; \langle\chi|B^\dagger\,A^\dagger\varphi\rangle \;, \tag{4.5}$$

como queriamos demostrar. Ademas:

$$\boxed{\big(A^\dagger\big)^\dagger \;=\; A} \tag{4.6}$$

Esta propiedad es obvia a partir de los elementos de matriz de A, puesto que la satisfacen la trasposicion de matrices y la conjugacion compleja.

Ejemplo

Sean $|\phi_1\rangle$ y $|\phi_2\rangle$ dos vectores y $P_{\phi_1\phi_2}$ el operador $P_{\phi_1\phi_2} = |\phi_1\rangle\langle\phi_2|$. Veamos que

$$P^\dagger_{\phi_1\phi_2} \;=\; P_{\phi_2\phi_1} \;, \tag{4.7}$$

o, equivalentemente:

$$\boxed{\big(|\phi_1\rangle\langle\phi_2|\big)^\dagger \;=\; |\phi_2\rangle\langle\phi_1|} \tag{4.8}$$

Para demostrarlo, consideremos dos vectores arbitrarios $|\varphi\rangle$ y $|\chi\rangle$ de $\mathcal{H}$. Los operadores $P_{\phi_1\phi_2}$ y $P_{\phi_2\phi_1}$ actuan sobre ellos como:

$$P_{\phi_1\phi_2}\,|\chi\rangle \;=\; \langle\phi_2|\chi\rangle\,|\phi_1\rangle \;, \qquad P_{\phi_2\phi_1}\,|\varphi\rangle \;=\; \langle\phi_1|\varphi\rangle\,|\phi_2\rangle \;. \tag{4.9}$$

Veamos que $P_{\phi_2\phi_1}$ tiene los mismos elementos de matriz que $P^\dagger_{\phi_1\phi_2}$:

$$\big(P_{\phi_2\phi_1}\big)_{mn} \,=\, \langle m|P_{\phi_2\phi_1}\, n\rangle \,=\, \langle\phi_1|n\rangle\,\langle m|\phi_2\rangle \,=\, \langle n|\phi_1\rangle^*\,\langle\phi_2|m\rangle^* \,=$$

$$= \Big(\langle n|P_{\phi_1\phi_2}\, m\rangle\Big)^* \,=\, \Big(P_{\phi_1\phi_2}\Big)^*_{nm} \,=\, \Big(P^\dagger_{\phi_1\phi_2}\Big)_{mn} \;. \tag{4.10}$$

Definicion

Un operador A se dice que es **hermitico** o autoadjunto si se verifica:

$$A^\dagger \,=\, A \;. \tag{4.11}$$

Definicion

Un operador U que satisface:

$$U\,U^\dagger \,=\, U^\dagger\,U \,=\, I \;, \tag{4.12}$$

o, lo que es lo mismo que $U^{-1} \,=\, U^\dagger$, se dice que es un operador **unitario**.

Los operadores unitarios tienen la propiedad de que preservan la norma de los vectores sobre los que actuan, es decir:

$$\boxed{U\,\text{unitario}\;, \qquad |\varphi\rangle\in\mathcal{H} \qquad \Longrightarrow \qquad ||U\,\varphi|| \,=\, ||\varphi||} \tag{4.13}$$

Para demostrar esta afirmacion, observemos que:

$$||U\,\varphi||^2 \,=\, \langle U\,\varphi|U\,\varphi\rangle \,=\, \langle\varphi|U^\dagger\,U\,\varphi\rangle \,=\, \langle\varphi|\varphi\rangle \,=\, ||\varphi||^2 \;, \tag{4.14}$$

donde hemos utilizado que U es unitario y, por lo tanto, $U^\dagger\,U \,=\, I$. Tomando la raiz cuadrada de (4.14) obtenemos el resultado buscado.

Probemos el resultado reciproco, es decir:

$$\boxed{U\,\text{conserva la norma de cualquier vector} \qquad \Longrightarrow \qquad U^\dagger = U^{-1}} \tag{4.15}$$

Para probarlo, consideremos dos vectores $|\varphi\rangle$ y $|\chi\rangle$ arbitrarios y un numero complejo λ y calculemos:

$$\langle\varphi+\lambda\chi|\varphi+\lambda\chi\rangle \,=\, \langle\varphi|\varphi\rangle \,+\, \lambda^*\,\langle\chi|\varphi\rangle \,+\, \lambda\langle\varphi|\chi\rangle \,+\, |\lambda|^2\,\langle\chi|\chi\rangle \,=$$

$$= \langle\varphi|\varphi\rangle \,+\, |\lambda|^2\,\langle\chi|\chi\rangle \,+\, 2\,\mathrm{Re}\big(\lambda\,\langle\varphi|\chi\rangle\big) \;. \tag{4.16}$$

De forma similar:

$$\langle U(\varphi+\lambda\chi)|U(\varphi+\lambda\chi)\rangle \,=\, \langle U\,\varphi|U\,\varphi\rangle + |\lambda|^2\,\langle U\,\chi|U\,\chi\rangle + 2\,\mathrm{Re}\big(\lambda\,\langle U\,\varphi|U\,\chi\rangle\big) \;. \tag{4.17}$$

Restemos ahora las ecuaciones (4.16) y (4.17) y tengamos en cuenta que, por hipotesis, el operador U preserva la norma de cualquier vector sobre el que actua. Se sigue que:

$$\mathrm{Re}\big(\lambda\,\langle\varphi|\chi\rangle\big) \;=\; \mathrm{Re}\big(\lambda\,\langle U\,\varphi|U\,\chi\rangle\big)\;, \qquad \forall\lambda\in\mathbb{C}\;. \tag{4.18}$$

Tomando $\lambda = 1$ en (4.18), obtenemos:

$$\mathrm{Re}\big(\,\langle\varphi|\chi\rangle\big) \;=\; \mathrm{Re}\,\langle U\,\varphi|U\,\chi\rangle\;, \tag{4.19}$$

mientras que tomando $\lambda = i$ llegamos a:

$$\mathrm{Im}\big(\,\langle\varphi|\chi\rangle\big) \;=\; \mathrm{Im}\,\langle U\,\varphi|U\,\chi\rangle\;. \tag{4.20}$$

Por consiguiente, $\forall|\varphi\rangle\,,\,|\chi\rangle$, se tiene:

$$\langle U\,\varphi|U\,\chi\rangle \;=\; \langle\varphi|\chi\rangle\;. \tag{4.21}$$

Pero $\langle U\,\varphi|U\,\chi\rangle = \langle\varphi|U^\dagger\,U\chi\rangle$ y por lo tanto:

$$\langle\varphi|U^\dagger\,U\chi\rangle \;=\; \langle\varphi|\chi\rangle\;, \tag{4.22}$$

que implica que $U^\dagger\,U = I$. En un espacio de dimension finita $U^\dagger\,U = I$ implica que $U\,U^\dagger = I$ y, entonces, el operador U es unitario, tal como queriamos demostrar.

Los operadores unitarios sirven para realizar cambios de base ortonormal. En efecto, sea $\{|n\rangle\}$ una base ortonormal de $\mathcal{H}$. Definamos los nuevos vectores $|n'\rangle \equiv |Un\rangle$, obtenidos transformando los vectores $|n\rangle$ por el operador U. Multipliquemos dos de estos vectores transformados:

$$\langle m'|n'\rangle \;=\; \langle U\,m|U\,n\rangle \;=\; \langle m|n\rangle \;=\; \delta_{m,n} \;=\; \delta_{m',n'}\;. \tag{4.23}$$

Es decir el nuevo conjunto de vectores es tambien ortonormal y, por tanto, forman una base. Entonces, concluimos que si U es un operador unitario:

$$\boxed{\{|n\rangle\}\ \text{base ortonormal de}\ \mathcal{H} \qquad \Longrightarrow \qquad \{|U\,n\rangle\}\ \text{base ortonormal de}\ \mathcal{H}} \tag{4.24}$$

Estudiemos como se transforman las componentes de un vector arbitrario $|\varphi\rangle$ bajo el cambio de base realizado con un operador unitario U. Pongamos:

$$|\varphi\rangle \;=\; \sum_n c_n\,|n\rangle \;=\; \sum_n c'_n\,|n'\rangle\;. \tag{4.25}$$

Claramente, se tiene:

$$c'_n \;=\; \langle n'|\varphi\rangle \;=\; \langle U\,n|\varphi\rangle \;=\; \langle n|U^\dagger\,\varphi\rangle \;=\; \sum_m c_m\,\langle n|U^\dagger\,m\rangle\;, \tag{4.26}$$

y, por tanto la relacion de las componentes de $|\varphi\rangle$ en las dos bases es:

$$c'_n \;=\; \sum_m U^\dagger_{nm}\,c_m\;, \tag{4.27}$$

es decir, las componentes del vector transforman con la matriz $U^\dagger$.

Obtengamos ahora la ley de transformacion de los elementos de matriz de un operador A:

$$A'_{mn} \,=\, \langle m'|A\,n'\rangle \,=\, \langle U\,m|A\,U\,n\rangle \,=\, \langle m|U^\dagger\,A\,U\,n\rangle \;. \tag{4.28}$$

Por lo tanto, bajo un cambio de base los elementos de matriz de un operador A se transforman como:

$$\boxed{A'_{mn} \,=\, \left(U^\dagger\,A\,U\right)_{mn} \,=\, \sum_{k,l} U^\dagger_{mk}\,A_{kl}\,U_{ln}} \tag{4.29}$$

Si substituimos A por su matriz, la relacion anterior nos dice simplemente que bajo un cambio de base $A \,\rightarrow\, U^\dagger\,A\,U$.

5 Proyectores

Definicion

Sea $M \subset \mathcal{H}$ un subconjunto del espacio $\mathcal{H}$. El complemento ortogonal de M, denotado por $M^\perp$, se define como el conjunto:

$$M^\perp \,=\, \{|\psi\rangle \in \mathcal{H} \,/\, \langle\phi|\psi\rangle = 0\,,\, \forall|\phi\rangle \in M\} \;. \tag{5.1}$$

Es decir $M^\perp$ esta formado por los vectores que son ortogonales a todos los elementos de M. Asi, por ejemplo, $\mathcal{H}^\perp = \{0\}$.

Definicion

Sea M un subespacio vectorial de dimension $D \leq \dim\mathcal{H} = N$. Supongamos que $\{|1\rangle, |2\rangle, \cdots |D\rangle\}$ es una base ortonormal de M. El proyector sobre M, denotado por $\mathcal{P}_M$, se define como:

$$\boxed{\mathcal{P}_M \,=\, \sum_{n=1}^{D} |n\rangle\langle n|} \tag{5.2}$$

Estudiemos las propiedades que tiene el proyector $\mathcal{P}_M$. Claramente es un operador hermitico en virtud de (4.8). Ademas se verifica que:

$$\boxed{\mathcal{P}_M^2 \,=\, \mathcal{P}_M} \tag{5.3}$$

La demostracion de esta propiedad es muy simple:

$$\mathcal{P}_M^2 \,=\, \sum_{m,n=1}^{D} |n\rangle\langle n|m\rangle\langle m| \,=\, \sum_{m,n=1}^{D} \delta_{m,n}\,|n\rangle\langle m| \,=\, \sum_{n=1}^{D} |n\rangle\langle n| \,=\, \mathcal{P}_M \;. \tag{5.4}$$

Descompongamos $\mathcal{H}$ como suma directa en la forma $\mathcal{H} = M \oplus M^{\perp}$. Si $|\phi\rangle \in M$, entonces de la definicion (5.2) de $\mathcal{P}_M$ se sigue que $\mathcal{P}_M |\phi\rangle = \sum_{n=1}^{D} \langle n|\phi\rangle |n\rangle$. Por otra parte, si $|\phi\rangle \in M$, entonces $|\phi\rangle$ es una combinacion lineal de los vectores de la base de M:

$$|\phi\rangle = \sum_{n=1}^{D} c_n |n\rangle = \sum_{n=1}^{D} \langle n|\phi\rangle |n\rangle \ , \tag{5.5}$$

donde, en el ultimo paso hemos utilizado la expresion de los coeficientes c_n (vease (1.24). Se sigue que $\mathcal{P}_M |\phi\rangle = |\phi\rangle$ si $|\phi\rangle \in M$. Por otra parte, si $|\chi\rangle \in M^{\perp}$, entonces, debido a la ortogonalidad de $|\chi\rangle$ con todos los elementos de M, se tiene que $\mathcal{P}_M |\chi\rangle = \sum_{n=1}^{D} \langle n|\chi\rangle |n\rangle = 0$. En resumen:

$$\boxed{|\phi\rangle \in M \qquad \Longrightarrow \qquad \mathcal{P}_M |\phi\rangle = |\phi\rangle}$$

$$\boxed{|\chi\rangle \in M^{\perp} \qquad \Longrightarrow \qquad \mathcal{P}_M |\chi\rangle = 0} \tag{5.6}$$

Probemos ahora la siguiente propiedad:

Sea $|\varphi\rangle$ un vector arbitrario de $\mathcal{H}$. Entonces $|\varphi\rangle$ se puede descomponer como una suma de la forma:

$$|\varphi\rangle = |\varphi\rangle_M + |\varphi\rangle_{M^{\perp}} \ , \qquad |\varphi\rangle_M \in M \ , \ |\varphi\rangle_{M^{\perp}} \in M^{\perp} \tag{5.7}$$

Para demostrar esta afirmacion pongamos

$$|\varphi\rangle = \big(\mathcal{P}_M + 1 - \mathcal{P}_M\big)|\varphi\rangle = \mathcal{P}_M|\varphi\rangle + \big(1 - \mathcal{P}_M\big)|\varphi\rangle \ . \tag{5.8}$$

Veamos que podemos tomar en la descomposicion (5.7) los vectores $|\varphi\rangle_M$ y $|\varphi\rangle_{M^{\perp}}$ como:

$$|\varphi\rangle_M = \mathcal{P}_M|\varphi\rangle \ , \qquad |\varphi\rangle_{M^{\perp}} = \big(1 - \mathcal{P}_M\big)|\varphi\rangle \ . \tag{5.9}$$

Claramente $\mathcal{P}_M|\varphi\rangle = \sum_{n=1}^{D} \langle n|\varphi\rangle |n\rangle \in M$, pues es una combinacion lineal de los vectores de la base de M. Probemos que $\big(1-\mathcal{P}_M\big)|\varphi\rangle \in M^{\perp}$. Para ello consideremos un vector arbitrario $|\phi\rangle \in M$ y multipliquemoslo escalarmente por $\big(1 - \mathcal{P}_M\big)|\varphi\rangle$:

$$\langle\phi|\big(1 - \mathcal{P}_M\big)\varphi\rangle = \langle\phi|\varphi\rangle - \langle\phi|\mathcal{P}_M\,\varphi\rangle = \langle\phi|\varphi\rangle - \langle\mathcal{P}_M\,\phi|\varphi\rangle =$$

$$= \langle\phi|\varphi\rangle - \langle\phi|\varphi\rangle = 0 \ , \tag{5.10}$$

donde, en el segundo paso hemos utilizado que $\mathcal{P}_M$ es hermitico y en el tercer paso hemos hecho uso de la primera de las propiedades (5.6). Asi pues $\big(1 - \mathcal{P}_M\big)|\varphi\rangle$ es ortogonal a cualquier vector de M, lo que demuestra que $\big(1 - \mathcal{P}_M\big)|\varphi\rangle \in M^{\perp}$.

Como caso particular interesante consideremos el subespacio vectorial generado por un vector no nulo $|\varphi\rangle$ de $\mathcal{H}$. Dicho subespacio tiene como base el vector normalizado $|\varphi\rangle/||\varphi||$, por lo que el proyector en la direccion de $|\varphi\rangle$ es:

$$\boxed{\mathcal{P}_{\varphi} = \frac{|\varphi\rangle\langle\varphi|}{||\varphi||^2}} \tag{5.11}$$

Notacion

Siguiendo a Dirac, en lugar de escribir $|A\,\varphi\rangle$ pondremos $A\,|\varphi\rangle$, cuando A es un operador y $|\varphi\rangle$ es un vector. Ademas, el producto escalar $\langle\chi|A\,\varphi\rangle$ se escribira $\langle\chi|A|\varphi\rangle$. Siempre se supone que A actua sobre el vector que tiene a su derecha.

6 La traza y el conmutador

Definicion

La traza de un operador A, que denotaremos por $\mathrm{Tr}\,A$, se define como la suma de sus elementos de matriz diagonales:

$$\boxed{\mathrm{Tr}\,A \;=\; \sum_{n=1}^{N} \langle n|A|n\rangle \;=\; \sum_{n=1}^{N} A_{nn}} \tag{6.1}$$

La traza es invariante bajo un cambio unitario de base. Bajo un tal cambio, los elementos de matriz de un operador A se transforman como:

$$A'_{mn} \;=\; \sum_{k,l} U^{\dagger}_{mk}\,A_{kl}\,U_{ln}\ . \tag{6.2}$$

La traza del operador en la nueva base es:

$$\mathrm{Tr}\,A' \;=\; \sum_{n} A'_{nn} \;=\; \sum_{n,k,l} U^{\dagger}_{nk}\,A_{kl}\,U_{ln} \;=\; \sum_{k,l} A_{kl} \sum_{n} U_{ln}\,U^{\dagger}_{nk} \;=\; \sum_{k,l} A_{kl}\left(U\,U^{\dagger}\right)_{lk}\ . \tag{6.3}$$

Puesto que U es unitaria, $\left(U\,U^{\dagger}\right)_{lk} = I_{lk} \;=\; \delta_{l,k}$ y la expresion anterior se convierte en:

$$\mathrm{Tr}\,A' \;=\; \sum_{l} A_{ll} \;=\; \mathrm{Tr}\,A\ , \tag{6.4}$$

tal como queriamos demostrar. Otra propiedad interesante es que la traza de un producto de dos matrices no cambia si se cambia el orden en que se multiplican, es decir:

$$\boxed{\mathrm{Tr}\left(A\,B\right) \;=\; \mathrm{Tr}\left(B\,A\right)} \tag{6.5}$$

Esta propiedad se puede demostrar por calculo directo:

$$\mathrm{Tr}\left(A\,B\right) \;=\; \sum_{n} \left(AB\right)_{nn} \;=\; \sum_{n,l} A_{nl}B_{ln} \;=\; \sum_{l} \left(BA\right)_{ll} \;=\; \mathrm{Tr}\left(B\,A\right)\ . \tag{6.6}$$

Tambien es facil probar la propiedad ciclica de la traza:

$$\mathrm{Tr}\left(A\,B\,C\right) \;=\; \mathrm{Tr}\left(B\,C\,A\right) \;=\; \mathrm{Tr}\left(C\,A\,B\right)\ . \tag{6.7}$$

Definicion

Dados dos operadores A y B, definimos su conmutador $[A,B]$ como:

$$\boxed{[A,B] \,=\, A\,B \,-\, B\,A} \tag{6.8}$$

Estudiemos algunas propiedades interesantes del conmutador. En primer lugar veamos que el conmutador se comporta como una derivada cuando esta actua sobre un producto. Mas concretamente probemos que:

$$\boxed{[A,B\,C] \,=\, [A,B]\,C \,+\, B[A,C]} \tag{6.9}$$

La demostracion de esta propiedad es sencilla:

$$\begin{aligned}[A,BC] \,&=\, ABC - BCA = [A,B]C + BAC - BCA = \\ &= [A,B]C + B(AC - CA) \,=\, [A,B]C + B[A,C] \;.\end{aligned} \tag{6.10}$$

De forma similar, tenemos:

$$\boxed{[A\,B,C] \,=\, A[B,C] \,+\, [A,C]\,B} \tag{6.11}$$

Esta propiedad se puede probar facilmente:

$$\begin{aligned}[AB,C] \,&=\, ABC - CAB = A[B,C] + ACB - CAB = \\ &= A[B,C] + (AC - CA)B \,=\, A[B,C] + [A,C]B \;.\end{aligned} \tag{6.12}$$

Ademas, el conmutador satisface la llamada **identidad de Jacobi**:

$$\boxed{[A,[B,C]] \,+\, [B,[C,A]] \,+\, [C,[A,B]] \,=\, 0} \tag{6.13}$$

Para demostrarla, calculemos los tres dobles conmutadores del primer miembro de (6.13):

$$\begin{aligned}[A,[B,C]] \,&=\, A[B,C] - [B,C]A \,=\, ABC - ACB - BCA + CBA \;, \\ [B,[C,A]] \,&=\, B[C,A] - [C,A]B \,=\, BCA - BAC - CAB + ACB \;, \\ [C,[A,B]] \,&=\, C[A,B] - [A,B]C \,=\, CAB - CBA - ABC + BAC \;.\end{aligned} \tag{6.14}$$

Sumando los tres segundos miembros de esta ultima ecuacion se puede comprobar que da cero, lo que demuestra la identidad de Jacobi.

7 Autovalores y autovectores

Definicion

Sea A un operador lineal. Si existe un vector $|\varphi\rangle$ y un numero complejo a tal que se verifica:

$$A\,|\varphi\rangle \;=\; a\,|\varphi\rangle \;, \tag{7.1}$$

entonces diremos que $|\varphi\rangle$ es un **autovector** de A y diremos que el numero complejo a es un **autovalor** del operador A. Los autovectores y autovalores se llaman tambien **vectores propios** y **valores propios** respectivamente.

Escribamos la ecuacion de autovalores (7.1) en la forma:

$$\big(A \,-\, a\,I\big)\,|\varphi\rangle \;=\; 0 \;. \tag{7.2}$$

Si $|\varphi\rangle = \sum_n c_n\,|n\rangle$, la ecuacion anterior se escribe como:

$$\sum_n \Big(A_{mn} \,-\, a\,\delta_{m,n}\Big)\,c_n \;=\; 0 \;. \tag{7.3}$$

Este es un sistema lineal para las componentes c_n de $|\varphi\rangle$. La condicion de que existan soluciones no triviales es:

$$p(a) \equiv \det\Big(\mathbb{A} \,-\, a\,\mathbb{I}\Big) \;=\; 0 \;, \tag{7.4}$$

donde $\mathbb{A}$ es la matriz $[A_{mn}]$ y $\mathbb{I}$ es la matriz unidad $N \times N$. En (7.4) $p(a)$ es un polinomio de grado N que se llama **polinomio caracteristico** de la matriz $\mathbb{A}$. Segun el teorema fundamental del algebra, la ecuacion $p(a) = 0$ tiene N raices para a, contando multiplicidades.

Estudiemos ahora el caso particular de los operadores hermiticos. En este caso tenemos el siguiente teorema:

Teorema

Los autovalores de un operador hermitico son reales y los autovectores correspondientes a dos autovalores distintos son ortogonales.

Demostracion

Sea $|\varphi\rangle$ un autovector de un operador A hermitico, que satisface $A|\varphi\rangle \;=\; a|\varphi\rangle$. Entonces, se tiene:

$$\langle\varphi|A|\varphi\rangle \;=\; a\,\langle\varphi|\varphi\rangle \;=\; a\,||\varphi||^2 \;. \tag{7.5}$$

Ademas, utilizando la definicion del conjugado hermitico y el hecho que $A^\dagger \;=\; A$, podemos calcular este mismo elemento de matriz de A como:

$$\langle\varphi|A|\varphi\rangle \;=\; \langle A^\dagger\,\varphi|\varphi\rangle \;=\; \langle A\varphi|\varphi\rangle \;=\; \langle a\varphi|\varphi\rangle \;=\; a^*\langle\varphi|\varphi\rangle \;=\; a^*\,||\varphi||^2 \;. \tag{7.6}$$

Comparando los segundos miembros de (7.5) y (7.6), obtenemos que $a^* = a$, es decir que el autovalor a del operador A es real, tal como queriamos demostrar.

Sean ahora $|\varphi\rangle$ y $|\chi\rangle$ dos autovectores correspondientes a dos autovalores a y b distintos:

$$A|\varphi\rangle \;=\; a|\varphi\rangle \;, \qquad A|\chi\rangle \;=\; b|\chi\rangle \;, \qquad\qquad a,b\in\mathbb{R} \;,\;\; (a\neq b) \;. \tag{7.7}$$

Entonces, se tiene:

$$\langle\chi|A\,\varphi\rangle \;=\; a\,\langle\chi|\varphi\rangle \;,$$

$$\langle\chi|A\varphi\rangle \;=\; \langle A\,\chi|\varphi\rangle \;=\; b\langle\chi|\varphi\rangle \;, \tag{7.8}$$

donde, en la segunda ecuacion, hemos utilizado el caracter hermitico de A y el caracter real del autovalor b. Restando estas dos ultimas expresiones, obtenemos:

$$(a-b)\,\langle\chi|\varphi\rangle \;=\; 0 \;. \tag{7.9}$$

Si $a\neq b$ esta ultima expresion implica que $\langle\chi|\varphi\rangle = 0$, como queriamos demostrar.

El resultado que acabamos de probar implica que, si la ecuacion caracteristica de un operador hermitico tiene todas sus raices distintas, los correspondientes autovectores son todos ortogonales entre si y, forzosamente, son independientes entre si. Puesto que tenemos tantos autovectores como la dimension de $\mathcal{H}$, estos ultimos se pueden tomar como una base del espacio vectorial $\mathcal{H}$. Sean $|\varphi_n\rangle$ estos autovectores. En esta base:

$$\langle\varphi_m|A|\varphi_n\rangle \;=\; a_n\,\delta_{m,n} \;, \tag{7.10}$$

es decir el operador A es diagonal. Asi, encontrar los vectores propios de un operador es equivalente a encontrar una base en la cual el operador (y la matriz que lo representa) es diagonal. El conjunto de autovalores de A se denomina el **espectro del operador** A.

Puede ocurrir, sin embargo, que los autovalores de A no sean distintos, es decir que la ecuacion caracteristica tenga raices multiples. Se dice entonces que el espectro, y el autovalor correspondiente, esta **degenerado**. Tambien en este caso es posible construir una base ortonormal con los autovectores gracias al siguiente teorema (que no probaremos):

Teorema

Sea A un operador hermitico y sea $\mathbb{A}$ su matriz asociada. Es posible encontrar una matriz unitaria U tal que $U^{-1}\,\mathbb{A}\,U$ es una matriz diagonal, donde los elementos de la diagonal de $U^{-1}\,\mathbb{A}\,U$ son los autovalores, cada uno de los cuales aparece tantas veces como su multiplicidad.

Sea a_n un autovalor degenerado y sea $G(n)$ su multiplicidad. Segun el teorema anterior, existen $G(n)$ autovectores independientes ortogonales correspondientes al mismo autovalor a_n, que generan un subespacio vectorial de dimension $G(n)$ llamado el **subespacio del autovalor** a_n. Sean $|n,r\rangle$ $(r = 1, \cdots, G(n))$ los vectores de esta base:

$$A\,|n,r\rangle \,=\, a_n\,|n,r\rangle \;, \qquad\qquad r = 1, \cdots, G(n) \;. \tag{7.11}$$

Si A es un operador hemitico, la base $\{|n,r\rangle\}$ existe siempre aunque no es unica. El proyector sobre el subespacio del autovalor a_n es:

$$\mathcal{P}_n \,=\, \sum_{r=1}^{G(n)} |n,r\rangle\langle n,r| \;. \tag{7.12}$$

Los vectores $|n,r\rangle$, para todo n,r, son vectores de una base ortonormal de $\mathcal{H}$. La relacion de complitud de esta base es:

$$\sum_n \mathcal{P}_n \,=\, \sum_n \sum_{r=1}^{G(n)} |n,r\rangle\langle n,r| \,=\, I \;. \tag{7.13}$$

En esta base el operador A es diagonal. En virtud de (3.19) podemos representarlo como:

$$A \,=\, \sum_n \sum_{r=1}^{G(n)} a_n\,|n,r\rangle\langle n,r| \;, \tag{7.14}$$

o, equivalentemente:

$$A \,=\, \sum_n a_n\,\mathcal{P}_n \;. \tag{7.15}$$

Esta representacion de A se denomina la **representacion espectral del operador** y es valida para cualquier operador diagonalizable por medio de una transformacion unitaria.

Teorema

Si dos operadores hermiticos A y B conmutan, es decir si $AB = BA$ o $[A,B] = 0$, entonces son diagonalizables simultaneamente, es decir se puede encontrar una base de $\mathcal{H}$ con autovectores comunes a A y a B.

Demostracion

Sean a_n los autovalores del operador A y sea $\{|n,r\rangle\}$ una base de $\mathcal{H}$ con autovectores de A. Entonces $A|n,r\rangle \,=\, a_n\,|n,r\rangle$. Calculemos $AB|n,r\rangle$ y utilicemos que A y B conmutan:

$$A\big(B|n,r\rangle\big) \,=\, B\big(A|n,r\rangle\big) \,=\, a_n\,B|n,r\rangle \;. \tag{7.16}$$

Se sigue de este calculo que $B|n,r\rangle$ es un autovector de A con autovalor a_n. Si a_n es no degenerado el subespacio correspondiente a este autovalor es de dimension 1. Por tanto, en este caso, $B|n,r\rangle$ debe de ser proporcional a $|n,r\rangle$. Pongamos:

$$B|n,r\rangle \,=\, b_n\,|n,r\rangle \;. \tag{7.17}$$

Entonces $|n,r\rangle$ es autovector de B. Si a_n es degenerado sabemos que $B|n,r\rangle$ es ortogonal a todos los autovectores $|m,s\rangle$ con $m \neq n$, es decir debemos de tener:

$$\langle m,s|B|n,r\rangle \,=\, \delta_{m,n}\, B^{(n)}_{rs} \;. \tag{7.18}$$

Esto implica que la representacion matricial de B en la base $\{|n,r\rangle\}$ es diagonal por bloques:

$$\mathbb{B} \,=\, \begin{pmatrix} B^{(1)} & & & & \\ & B^{(2)} & & & \\ & & B^{(3)} & & \\ & & & \cdot & \\ & & & & \cdot \end{pmatrix} \;. \tag{7.19}$$

Podemos entonces diagonalizar cada bloque $B^{(k)}$ cambiando a una base en cada subespacio, sin afectar a la diagonalizacion de A.

El resultado reciproco es tambien facil de demostrar: **si A y B son diagonalizables simultaneamente entonces su conmutador se anula**. En efecto, supongamos que hemos encontrado una base $|(n,p),r\rangle$ de autovectores de A y B:

$$A\,|(n,p),r\rangle \,=\, a_n\,|(n,p),r\rangle \;, \qquad\qquad B\,|(n,p),r\rangle \,=\, b_p\,|(n,p),r\rangle \;. \tag{7.20}$$

Entonces, se tiene:

$$[A,B]|(n,p),r\rangle \,=\, AB|(n,p),r\rangle \,-\, BA|(n,p),r\rangle \,=$$

$$=\, b_p\,A|(n,p),r\rangle \,-\, a_n\,B|(n,p),r\rangle \,=\, (b_p\,a_n \,-\, a_n\,b_p)\,|(n,p),r\rangle \,=\, 0 \;. \tag{7.21}$$

Como $\{|(n,p),r\rangle\}$ es una base de $\mathcal{H}$, se sigue que de este resultado que $[A,B]|\varphi\rangle = 0$ para todo $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$, lo que implica que $[A,B]=0$, tal como queriamos demostrar.

Definicion

Si $[A,B]=0$, se dice que los operadores A y B son **compatibles**

Acabamos de ver que si los operadores A y B son compatibles pueden ser diagonalizables simultaneamente. Supongamos que los vectores de una base de $\mathcal{H}$ pueden ser especificados de forma unica (salvo un factor multiplicativo de modulo 1) dando los autovalores a_n y b_n de A y B, es decir que no exista degeneracion adicional. Se dice entonces que A y B forman un **conjunto completo de operadores compatibles**. Puede que esto no sea verdad y que tengamos que considerar otro operador C que conmuta con A y B. En general, definimos:

Definicion

Un conjunto de operadores hermiticos $A_1\,, A_2\,, \cdots, A_N$ que conmutan entre si ($[A_i,A_j]=0\,, \forall i,j=1,\cdots N$) cuyos autovalores definan univocamente los vectores de una base de $\mathcal{H}$ se llama un **conjunto completo de operadores compatibles**.

Estudiemos ahora la diagonalizacion de operadores unitarios. Sea U uno de tales operadores ($U\,U^\dagger\,=\,1$) y sea $|\varphi\rangle$ un autovector de U de autovalor u:

$$U\,|\varphi\rangle\;=\;u\,|\varphi\rangle\;. \tag{7.22}$$

Probemos que el autovalor u es un numero complejo de modulo 1. Efectivamente, el operador U conserva la norma de los vectores por lo que $||U\,|\varphi\rangle||^2\;=\;||\varphi||^2$, es decir:

$$||\varphi||^2\;=\;||U\,|\varphi\rangle||^2\;=\;\langle U\,\varphi|U\,\varphi\rangle\;=\;|u|^2\,||\varphi||^2\;. \tag{7.23}$$

Comparado los dos miembros de esta igualdad, se sigue que:

$$|u|^2\;=\;1\;,\qquad\Longrightarrow\qquad u=e^{i\alpha}\;,\;\alpha\in\mathbb{R}. \tag{7.24}$$

Puede probarse ademas que los autovectores que corresponden a autovalores distintos son ortogonales entre si. La demostracion de esta propiedad es exactamente la misma que para operadores hermiticos. Por lo tanto, la representacion espectral de un operador unitario, si no hay degeneracion, es:

$$U\;=\;\sum_n e^{i\alpha_n}\,|n\rangle\langle n|\;. \tag{7.25}$$

Para acabar esta seccion vamos a dar un criterio para saber de forma rapida si un operador es diagonalizable. Comencemos con una definicion:

Definicion

Se dice que un operador A es **normal** si:

$$A\,A^\dagger\;=\;A^\dagger\,A\;, \tag{7.26}$$

es decir si A conmuta con su hermitico conjugado: $[A\,,\,A^\dagger]\;=\;0$.

Enunciemos ahora el siguiente teorema cuya demostracion omitiremos:

Teorema

Todo operador normal es diagonal con respecto a una base ortogonal. Inversamente todo operador diagonalizable es normal.

Observese que los operadores hermiticos, asi como los operadores unitarios son normales, por lo que todos ellos son diagonalizables.

8 Funciones de operadores

Dada una funcion $f(z)$ de la variable compleja z queremos definir $f(A)$, siendo A un operador. Para ello supongamos que $f(z)$ se representa a traves de su serie de Taylor, que converge en una cierta region $|z|<R$ del plano complejo:

$$f(z)\;=\;\sum_{p=0}^{\infty} c_p\,z^p\;. \tag{8.1}$$

Entonces, $f(A)$ se define como la serie:

$$f(A) \,=\, \sum_{p=0}^{\infty} c_p\, A^p \ . \tag{8.2}$$

Por ejemplo la exponencial del operador A es:

$$e^A \,=\, \sum_{p=0}^{\infty} \frac{A^p}{p!} \ . \tag{8.3}$$

En el caso de una funcion general, supongamos que el operador A sea diagonalizable, es decir supongamos que puede escribirse como $A \,=\, X\, D\, X^{-1}$, siendo D un operador diagonal con elementos de matriz d_n. La representacion matricial de D (que seguiremos llamando D) es:

$$D \,=\, \begin{pmatrix} d_1 & & & \\ & d_2 & & \\ & & . & \\ & & & . \end{pmatrix} \ . \tag{8.4}$$

Calculemos A^2 utilizado esta representacion de A en terminos de D:

$$A^2 \,=\, X\, D\, X^{-1}\, X\, D\, X^{-1} \,=\, X\, D^2\, X^{-1} \ . \tag{8.5}$$

Esta relacion se generaliza facilmente para cualquier potencia de A:

$$A^p \,=\, X\, D^p\, X^{-1} \ . \tag{8.6}$$

Entonces, la matriz correspondiente a $f(A)$ es:

$$f(A) \,=\, \sum_{p=0}^{\infty} c_p\, X\, D^p\, X^{-1} \,=\, X \Big[\sum_{p=0}^{\infty} c_p\, D^p \Big]\, X^{-1} \ . \tag{8.7}$$

La matriz entre corchetes en (8.7) es una matriz diagonal cuyos elementos son $\sum_{p=0}^{\infty} c_p\, (d_n)^p = f(d_n)$, si $|d_n| < R$. Asi pues:

$$f(A) \,=\, X \begin{pmatrix} f(d_1) & & & \\ & f(d_2) & & \\ & & . & \\ & & & . \end{pmatrix} X^{-1} \ . \tag{8.8}$$

En general, si A es diagonalizable, la representacion espectral de $f(A)$ sera:

$$f(A) \,=\, \sum_{n} f(d_n)\, \mathcal{P}_n \ , \tag{8.9}$$

siendo $\mathcal{P}_n$ el proyector correspondiente al autovalor d_n (vease (7.12)). Esta ecuacion permite obtener $f(A)$ a partir de los autovectores y autovalores de la matriz A. Observese que la suma en el segundo miembro de (8.9) es una suma finita. Por esta razon en la practica es muchas veces mas sencillo utilizar (8.9) en lugar de la definicion (8.2) para calcular $f(A)$, tal como ilustra el siguiente ejemplo.

Ejemplo

Consideremos la matriz:

$$A = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} . \tag{8.10}$$

Los autovalores de esta matriz son las raices de la ecuacion polinomica:

$$\det \begin{pmatrix} -\lambda & -i \\ i & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - 1 = 0 , \tag{8.11}$$

cuyas soluciones son:

$$\lambda_1 = 1 , \qquad \lambda_2 = -1 . \tag{8.12}$$

Los autovectores correspondientes son:

$$|\lambda_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} , \qquad |\lambda_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} , \tag{8.13}$$

tal como se puede comprobar directamente:

$$\begin{aligned} A\,|\lambda_1\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} = |\lambda_1\rangle , \\ A\,|\lambda_2\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ -1 \end{pmatrix} = -|\lambda_2\rangle . \end{aligned} \tag{8.14}$$

Los proyectores correspondientes ya han sido obtenidas en (3.28):

$$\mathcal{P}_{\lambda_1} = |\lambda_1\rangle\langle\lambda_1| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} , \qquad \mathcal{P}_{\lambda_2} = |\lambda_2\rangle\langle\lambda_2| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} . \tag{8.15}$$

Utilicemos este resultado para calcular $e^{i\alpha A}$ por medio de (8.9):

$$\begin{aligned} e^{i\alpha A} &= e^{i\alpha\,\lambda_1}\,\mathcal{P}_{\lambda_1} + e^{i\alpha\,\lambda_2}\,\mathcal{P}_{\lambda_2} = e^{i\alpha}\,\mathcal{P}_{\lambda_1} + e^{-i\alpha}\,\mathcal{P}_{\lambda_2} = \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} e^{i\alpha} + e^{-i\alpha} & -i(e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}) \\ i(e^{i\alpha} - e^{-i\alpha}) & e^{i\alpha} + e^{-i\alpha} \end{pmatrix} . \end{aligned} \tag{8.16}$$

Es decir:

$$e^{i\alpha A} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \operatorname{sen}\alpha \\ -\operatorname{sen}\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} . \tag{8.17}$$

9 Las matrices de Pauli

Obtengamos la forma general de una matriz 2×2 hermitica:

$$M = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \qquad \Longrightarrow \qquad M^\dagger = \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix} \; . \tag{9.1}$$

La condicion de hermiticidad $M^\dagger = M$ implica:

$$a = a^* \; , \qquad d = d^* \; , \qquad b = c^* \; , \tag{9.2}$$

lo que significa que $a, d \in \mathbb{R}$. Definamos ahora los numeros reales c_0 y c_3 como:

$$c_0 = \frac{a+d}{2} \; , \qquad c_3 = \frac{a-d}{2} \; , \tag{9.3}$$

asi como $c_1, c_2 \in \mathbb{R}$:

$$c_1 = \mathrm{Re}\,(c) = \frac{c + c^*}{2} \; , \qquad c_2 = \mathrm{Im}\,(c) = \frac{c - c^*}{2i} \; . \tag{9.4}$$

La relacion inversa es:

$$\begin{aligned} a &= c_0 + c_3 \; , \qquad & d &= c_0 - c_3 \; , \\ c &= c_1 + ic_2 \; , \qquad & b &= c^* = c_1 - ic_2 \; . \end{aligned} \tag{9.5}$$

Entonces M puede escribirse como:

$$M = \begin{pmatrix} c_0 + c_3 & c_1 - ic_2 \\ c_1 + ic_2 & c_0 - c_3 \end{pmatrix} \; . \tag{9.6}$$

Escribamos la matriz M en la forma:

$$M = c_0\, I + c_1\, \sigma_1 + c_2\, \sigma_2 + c_3\, \sigma_3 \; , \tag{9.7}$$

siendo I la matriz unidad 2×2 y $\sigma_1 \equiv \sigma_x$, $\sigma_2 \equiv \sigma_y$ y $\sigma_3 \equiv \sigma_z$ son las denominadas **matrices de Pauli**:

$$\boxed{\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \; , \qquad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \; , \qquad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}} \tag{9.8}$$

Por construccion, σ_1, σ_2 y σ_3 son matrices hermiticas. Estas matrices son muy importantes en mecanica cuantica. Estudiemos algunas de sus propiedades. En primer lugar veamos que satisfacen:

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = I \; . \tag{9.9}$$

Esta propiedad es obvia para la matriz diagonal σ_3. Comprobemosla para σ_1:

$$\sigma_1^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = I \ . \tag{9.10}$$

Muchas veces escribiremos $\sigma_1^2 = 1$, donde se sobreentiende que 1 es la matriz unidad I. Ademas, cuando se multiplican dos de ellas se obtiene la tercera multiplicada por i. Asi, por ejemplo:

$$\begin{aligned} \sigma_1 \, \sigma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = i\sigma_3 \ , \\ \sigma_2 \, \sigma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = -i\sigma_3 \ . \end{aligned} \tag{9.11}$$

Es decir, se tiene:

$$\sigma_1 \, \sigma_2 = -\sigma_2 \, \sigma_1 = i\sigma_3 \ . \tag{9.12}$$

De forma similar, obtenemos por permutacion circular:

$$\sigma_2 \, \sigma_3 = -\sigma_3 \, \sigma_2 = i\sigma_1 \ , \qquad \sigma_3 \, \sigma_1 = -\sigma_1 \, \sigma_3 = i\sigma_2 \ . \tag{9.13}$$

Las ecuaciones (9.12) y (9.13) pueden condensarse en la relacion:

$$\boxed{\sigma_i \, \sigma_j = \delta_{i,j} + i \sum_k \epsilon_{ijk} \, \sigma_k} \tag{9.14}$$

Equivalentemente, si $\vec{a}$ y $\vec{b}$ son dos vectores de $\mathbb{R}^3$ (y entonces $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3)$ y $\vec{b} = (b_1, b_2, b_3)$):

$$\boxed{(\vec{\sigma} \cdot \vec{a}) \, (\vec{\sigma} \cdot \vec{b}) = \vec{a} \cdot \vec{b} + i \, \vec{\sigma} \cdot (\vec{a} \times \vec{b})} \tag{9.15}$$

De las ecuaciones anteriores podemos extraer el conmutador de dos matrices de Pauli. En efecto, es inmediato deducir de (9.14) que el conmutador $[\sigma_i, \sigma_j] = \sigma_i \, \sigma_j - \sigma_j \, \sigma_i$ vale:

$$\boxed{[\sigma_i, \sigma_j] = 2 \, i \sum_k \epsilon_{ijk} \, \sigma_k} \tag{9.16}$$

Asi pues las matrices σ_i no conmutan pero cierran bajo conmutacion, es decir el conmutador de dos de ellas es una matriz de Pauli. Por esta razon se dice que forman un **algebra de Lie**, el algebra $SU(2)$.

La matriz σ_3 es diagonal y tiene por autovalores ± 1. La propiedad $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = I$ implica que σ_1 y σ_2 tienen los mismos autovalores que σ_3 (es decir ± 1). Sin embargo σ_1 y σ_2 no conmutan con σ_3 y, por tanto, **las matrices de Pauli no son simultaneamente diagonalizables**. Denotemos por $| \pm z \rangle$ los autovectores de σ_z:

$$\sigma_z \, | \pm z \rangle = \pm | \pm z \rangle \ . \tag{9.17}$$

Claramente, los vectores $|\pm z\rangle$ son los vectores unitarios de la base canonica de $\mathbb{C}^2$ en la cual estan escritas las matrices de Pauli:

$$|+z\rangle \;=\; \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \;, \qquad\qquad |-z\rangle \;=\; \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \;. \tag{9.18}$$

Es facil ver que los autovalores de σ_x y σ_y son tambien ± 1. De forma similar a σ_z, denotemos por $|\pm x\rangle$ y $|\pm y\rangle$ los correspondientes autovectores:

$$\sigma_x\,|\pm x\rangle \;=\; \pm|\pm x\rangle \;, \qquad\qquad \sigma_y\,|\pm y\rangle \;=\; \pm|\pm y\rangle \;. \tag{9.19}$$

Es facil deducir que los autovectores $|\pm x\rangle$ son:

$$|+x\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+z\rangle \,+\, |-z\rangle\Big) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \;,$$

$$|-x\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+z\rangle \,-\, |-z\rangle\Big) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \;, \tag{9.20}$$

que, como era de esperar, no coinciden con los vectores $|\pm z\rangle$ que diagonalizan σ_z. Es facil demostrar que estos vectores satisfacen la primera ecuacion en (9.19):

$$\sigma_x\,|\pm x\rangle \;=\; \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm 1 \end{pmatrix} \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \pm 1 \\ 1 \end{pmatrix} \;=\; \pm|\pm x\rangle \;. \tag{9.21}$$

Finalmente, σ_y ha sido diagonalizada en el ejemplo de la seccion 8, con el resultado:

$$|+y\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|+z\rangle \,+\, i|-z\rangle\Big) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \;,$$

$$|-y\rangle \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(i|+z\rangle \,+\, |-z\rangle\Big) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} \;. \tag{9.22}$$

Sea $\vec{v} = (v_1, v_2, v_3)$ un vector de $\mathbb{R}^3$. Entonces $\vec{v}\cdot\vec{\sigma}$ es la matriz:

$$\vec{v}\cdot\vec{\sigma} \;=\; \begin{pmatrix} v_3 & v_1 - iv_2 \\ v_1 + iv_2 & -v_3 \end{pmatrix} \;. \tag{9.23}$$

Calculemos directamente el cuadrado de esta matriz:

$$\begin{aligned} \big(\vec{v}\cdot\vec{\sigma}\big)^2 \;&=\; \begin{pmatrix} v_3 & v_1 - iv_2 \\ v_1 + iv_2 & -v_3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} v_3 & v_1 - iv_2 \\ v_1 + iv_2 & -v_3 \end{pmatrix} \;= \\ =\; &\begin{pmatrix} v_3^2 + v_1^2 + v_2^2 & v_3(v_1 - iv_2) - v_3(v_1 - iv_2) \\ (v_1 + iv_2)v_3 - (v_1 + iv_2)v_3 & v_1^2 + v_2^2 + v_3^2 \end{pmatrix} \;=\; \begin{pmatrix} \vec{v}^{\,2} & 0 \\ 0 & \vec{v}^{\,2} \end{pmatrix} \;. \end{aligned} \tag{9.24}$$

Es decir:

$$(\vec{v}\cdot\vec{\sigma})^2 \,=\, \vec{v}^{\,2}\, I\ . \tag{9.25}$$

Esta propiedad tambien puede demostrarse poniendo $\vec{a} = \vec{b} = \vec{v}$ en (9.15). Si, en particular $\vec{v}^{\,2} = 1$, es decir si $\vec{v}$ es un vector unitario, la ecuacion anterior implica:

$$(\vec{v}\cdot\vec{\sigma})^n \,=\, \begin{cases} 1 & \text{si n es par,} \\ \vec{v}\cdot\vec{\sigma} & \text{si n es impar.} \end{cases} \tag{9.26}$$

A partir de este resultado podemos obtener las exponenciales de las matrices de Pauli de manera sencilla. Efectivamente, si $\theta \in \mathbb{R}$ y $\vec{v}^{\,2} = 1$, calculemos:

$$\begin{aligned} e^{i\theta\,\vec{v}\cdot\vec{\sigma}} \,&=\, \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\theta\,\vec{v}\cdot\vec{\sigma})^n}{n!} \,=\, \sum_{n=2p} + \sum_{n=2q+1} \,=\, \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(i\theta)^{2p}}{(2p)!} \,+\, \sum_{q=0}^{\infty} \frac{(i\theta)^{2q+1}}{(2q+1)!}\,\vec{v}\cdot\vec{\sigma} \,= \\ &= \sum_{p=0}^{\infty} \frac{(-1)^p\,\theta^{2p}}{(2p)!} \,+\, i\sum_{q=0}^{\infty} \frac{(-1)^q\,\theta^{2q+1}}{(2q+1)!}\,\vec{v}\cdot\vec{\sigma}\ . \end{aligned} \tag{9.27}$$

Las dos series que aparecen en esta ultima ecuacion corresponden a $\cos\theta$ y $\operatorname{sen}\theta$, por lo que podemos escribir:

$$\boxed{e^{i\theta\,\vec{v}\cdot\vec{\sigma}} \,=\, \cos\theta \,+\, i\operatorname{sen}\theta\,\vec{v}\cdot\vec{\sigma}} \qquad\qquad (\vec{v}^{\,2} \,=\, 1). \tag{9.28}$$

Sea $M = e^{i\theta\,\vec{v}\cdot\vec{\sigma}}$ con $\theta \in \mathbb{R}$ y $\vec{v}^{\,2} \,=\, 1$. Probemos que M es una matriz unitaria de determinante unidad. Calculemos el hermitico conjugado de M:

$$M^\dagger \,=\, \big(\cos\theta \,+\, i\operatorname{sen}\theta\,\vec{v}\cdot\vec{\sigma}\big)^\dagger \,=\, \cos\theta \,-\, i\operatorname{sen}\theta\,\vec{v}\cdot\vec{\sigma}\ , \tag{9.29}$$

donde hemos utilizado que las matrices de Pauli son hermiticas. Por otra parte el inverso de M es:

$$M^{-1} \,=\, \Big(e^{i\theta\,\vec{v}\cdot\vec{\sigma}}\Big)^{-1} \,=\, e^{-i\theta\,\vec{v}\cdot\vec{\sigma}} \,=\, \cos\theta \,-\, i\operatorname{sen}\theta\,\vec{v}\cdot\vec{\sigma}\ . \tag{9.30}$$

Comparando los segundos miembros de (9.29) y (9.30) concluimos que $M^\dagger = M^{-1}$ y, por consiguiente, M es unitaria. Calculemos ahora directamente el determinante de M:

$$\begin{aligned} \det M \,&=\, \det\begin{pmatrix} \cos\theta + i\operatorname{sen}\theta\,v_3 & i\operatorname{sen}\theta\,(v_1 - iv_2) \\ i\operatorname{sen}\theta\,(v_1 + iv_2) & \cos\theta - i\operatorname{sen}\theta\,v_3 \end{pmatrix} \,= \\ &= \cos^2\theta \,+\, \operatorname{sen}^2\theta\,v_3^2 \,-\, (i)^2\operatorname{sen}^2\theta\,(v_1^2 + v_2^2) \,=\, \cos^2\theta \,+\, \operatorname{sen}^2\theta\,\vec{v}^{\,2} \,=\, 1\ . \end{aligned} \tag{9.31}$$

Definicion

Las matrices $N \times N$ M tales que $M^\dagger = M^{-1}$ y $\det M = 1$ forman un grupo de Lie que se denomina SU(N).

En particular las matrices que tienen la forma escrita en (9.28), es decir que se obtienen exponenciando las matrices de Pauli, pertenecen al grupo de Lie $SU(2)$. En general tenemos la relacion simbolica:

$$\boxed{\exp[\text{algebra de Lie}] \,=\, \text{grupo de Lie}} \tag{9.32}$$

donde las matrices del algebra de Lie cierran bajo conmutacion. Como veremos, las matrices del grupo $SU(2)$ son muy importantes en mecanica cuantica porque realizan las rotaciones espaciales de las particulas de espin 1/2.

Ejemplo

Estudiemos la diagonalizacion de una matriz hermitica general 2×2. Si $M^\dagger = M$, sabemos que tiene que tener la forma:

$$M \,=\, \begin{pmatrix} a & b \\ b^* & a' \end{pmatrix} \ , \tag{9.33}$$

con $a, a' \in \mathbb{R}$ y $b \in \mathbb{C}$. Los vectores de la base canonica son

$$|1\rangle \,=\, \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \ , \qquad\qquad |2\rangle \,=\, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \ , \tag{9.34}$$

y la ecuacion caracteristica, que determina los autovalores λ de M, es:

$$\det \begin{pmatrix} a-\lambda & b \\ b^* & a'-\lambda \end{pmatrix} \,=\, \lambda^2 \,-\, (a+a')\lambda \,+\, a\,a' \,-\, |b|^2 \,=\, 0 \ . \tag{9.35}$$

Las raices de esta ecuacion polinomica son:

$$\lambda_\pm \,=\, \frac{1}{2}\left[a + a' \pm \sqrt{(a-a')^2 + 4|b|^2}\right] \ . \tag{9.36}$$

Notese que $\lambda_\pm \in \mathbb{R}$, como debe de ser pues $M^\dagger = M$. Encontremos ahora los autovectores $\begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix}$, que deben de satisfacer:

$$\begin{pmatrix} a & b \\ b^* & a' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \,=\, \lambda_\pm \begin{pmatrix} u \\ v \end{pmatrix} \ , \tag{9.37}$$

que equivale al sistema de ecuaciones lineales:

$$(a-\lambda_\pm)u \,+\, b\,v \,=\, 0 \ ,$$

$$b^*\,u \,+\, (a'-\lambda_\pm)\,v \,=\, 0 \ . \tag{9.38}$$

Estas ecuaciones son equivalentes. De la primera de ellas obtenemos la razon entre las componentes de los autovectores:

$$\frac{u}{v} \,=\, \frac{b}{\lambda_\pm - a} \ . \tag{9.39}$$

Para resolver esta ecuacion, pongamos:

$$u \;=\; A_\pm\, b \;, \qquad\qquad v \;=\; A_\pm\,(\lambda_\pm - a) \;, \tag{9.40}$$

siendo $A_\pm$ una constante que se determina imponiendo la condicion de normalizacion del vector:

$$|u|^2 + |v|^2 \;=\; 1 \qquad \rightarrow \qquad |A_\pm|^2 \left(|b|^2 + (\lambda_\pm - a)^2\right) \;=\; 0 \;, \tag{9.41}$$

a partir de la cual obtenemos:

$$A_\pm \;=\; \frac{e^{i\alpha_\pm}}{\sqrt{(\lambda_\pm - a)^2 + |b|^2}} \;, \tag{9.42}$$

siendo $\alpha_\pm \in \mathbb{R}$ una fase arbitraria. Por tanto, los autovectores son:

$$|\lambda_\pm\rangle \;=\; \frac{e^{i\alpha_\pm}}{\sqrt{(\lambda_\pm - a)^2 + |b|^2}} \begin{pmatrix} b \\ \lambda_\pm - a \end{pmatrix} \;. \tag{9.43}$$

Comprobemos que estos dos autovectores son ortogonales. Su producto es:

$$\langle\lambda_+|\lambda_-\rangle = A_+^*\, A_-\, (b^*, \lambda_+ - a) \begin{pmatrix} b \\ \lambda_- - a \end{pmatrix} \;=\; A_+^*\, A_- \left[|b|^2 + (\lambda_+ - a)(\lambda_- - a)\right] \;. \tag{9.44}$$

Por otra parte, a partir de (9.36) obtenemos:

$$\lambda_\pm \,-\, a \;=\; \frac{1}{2}\left[a' - a \pm \sqrt{(a - a')^2 + 4|b|^2}\right] \;, \tag{9.45}$$

y, en consecuencia:

$$(\lambda_+ - a)(\lambda_- - a) \;=\; -|b|^2 \;, \tag{9.46}$$

que implica el resultado buscado:

$$\langle\lambda_+|\lambda_-\rangle \;=\; 0 \;. \tag{9.47}$$