Bra, Kets, Operatori: scheda riassuntiva

Nota: La presente scheda ha il solo scopo di fornire un supporto al ripasso dei concetti di algebra lineare fondamentali in MQ. Non è da ritenersi esaustiva e soprattutto non può essere considerata autoconsistente da un punto di vista strettamente formale. Tuttavia, i concetti qui riassunti costituiscono l'insieme di strumenti che utilizzeremo per lavorare all'interno della notazione *bra* e *ket* di Dirac.

Il postulato 1 introduce il concetto di stato di un sistema quantistico e identifica tale stato, o funzione d'onda, con un vettore di uno spazio di Hilbert (...che per quel che ci riguarda possiamo pensare semplicemente come uno spazio vettoriale). Dirac introdusse un formalismo per indicare i vettori di stato e gli operatori che agiscono su di essi che risulta molto efficacie e viene per questo diffusamente adottato.

I vettori di stato o funzioni d'onda vengono indicati con la forma $|\quad\rangle$, chiamata *ket.* Un simbolo all'interno del ket identifica un determinato vettore . Lo stato $f(x)$ ad esempio si può indicare $|f\rangle$.

Essendo gli stati dei vettori di uno spazio di Hilbert, valgono le operazioni:

$|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\beta\rangle + |\alpha\rangle = |\gamma\rangle$ (ovvero: la somma di due ket è commutativa ed è un ket)

$c|\alpha\rangle = |\alpha\rangle c = |\beta\rangle$ con c numero complesso (ovvero: se moltiplico un ket per un numero ottengo un ket).

Una *combinazione lineare* di vettori $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, |\gamma\rangle$ ha la forma:

$$a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle + c|\gamma\rangle$$

Un vettore di un certo insieme di vettori si dice linearmente indipendente se non può essere espresso come combinazione lineare degli altri.

Un set di vettori si dice linearmente indipendente se ogni vettore è linearmente indipendente dagli altri.

Un set di vettori linearmente indipendente tale che ogni altro vettore dello spazio può essere espresso come combinazione lineare di vettori del set, si definisce *base* dello spazio vettoriale. Il numero di vettori costituente una base definisce la dimensione dello spazio.

Supponiamo di aver individuato una base dello spazio costituita dai vettori $|e_1\rangle, |e_2\rangle, \dots . |e_N\rangle$, allora un generico vettore $|\alpha\rangle$ dovrà potersi esprimere come:

$$|\alpha\rangle = a_1 |e_1\rangle + a_2 |e_2\rangle + \ \dots a_N |e_N\rangle$$

o anche come:

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_N \end{pmatrix}$$

Il formalismo della meccanica quantistica richiede che lo spazio vettoriale degli stati "viva" nei numeri complessi. I coefficienti a_i sono in generale dei numeri complessi.

Per gestire al meglio dal punto di vista formale la natura complessa degli spazi vettoriali, oltre ai ket, Dirac introduce i *bra.* Ad ogni ket $|\alpha\rangle$ corrisponde un bra $\langle\alpha|$:

$$|\alpha\rangle \Leftrightarrow \langle\alpha|$$

e, attenzione, :

$$c|\alpha\rangle \Leftrightarrow c^*\langle\alpha|$$

Dal punto di vista pratico, possiamo pensare ai bra come ai complessi coniugato dei ket e scriverli come vettori riga:

$$|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_N \end{pmatrix} \Leftrightarrow \langle\alpha| = \left(a_1^* \, a_2^* \dots a_N^*\right)$$

ATTENZIONE quindi, i bra NON sono da considerarsi dei vettori. Sono piuttosto degli operatori in grado di agire sui ket attraverso il prodotto interno.

Il prodotto interno.

Si definisce il prodotto interno tra due vettori $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ e un numero complesso che si indica:

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

e che ha le seguenti proprietà:

1. $\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$
2. $\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0 \;\; (= 0 \; solo \; se \; |\alpha\rangle = 0\,)$
3. $\langle\alpha|(b|\beta\rangle + c|\gamma\rangle) = b\,\langle\alpha|\beta\rangle + c\langle\alpha|\gamma\rangle$

La quantità $\sqrt{\langle\alpha|\alpha\rangle}$ è detta **norma** o modulo di un vettore. Un vettore con norma pari a 1 è detto *normalizzato*.

Due vettori il cui prodotto interno sia nullo sono detti *ortogonali*.

Un set di vettori normalizzati e ortogonali uno rispetto all'altro è detto set ortonormale. Se costituiscono anche una base, allora sarà una *base ortonormale*. Se ho una base ortonormale $(\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \dots, \boldsymbol{e}_N\,)$ vale quindi:

$$\langle \boldsymbol{e}_i | \boldsymbol{e}_j \rangle = \delta_{i,j} =$$

Attenzione! : Per un dato spazio vettoriale in cui sia definito il prodotto interno, è sempre possibile definire una base ortonormale (procedura di Gram-Schmidt).

Definire una base ortonormale ha il grande vantaggio che una buona definizione di prodotto interno tra due vettori è:

$$\langle\alpha|\beta\rangle = a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \cdots + a_N^* b_N$$

(si noti che si tratta del prodotto riga per colonna del bra $\langle\alpha|$ e del ket $|\beta\rangle$!)

Operatori.

In generale, per quello che ci serve, possiamo pensare ad un operatore come ad una macchina che agisce sui ket trasformandoli in altri ket:

$$\boldsymbol{A}|\alpha\rangle = |\beta\rangle$$

Un operatore è **lineare** se:

$$\boldsymbol{A}(a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle) = a(\boldsymbol{A}|\alpha\rangle) + b(\boldsymbol{A}|\beta\rangle)$$

per ogni vettore $|\alpha\rangle$, $|\beta\rangle$ e per ogni scalare a, b.

Gli operatori in uno spazio vettoriale a N dimensioni sono delle matrici NxN e agiscono sui ket con l'usuale prodotto riga per colonna.

Esempio, per N=3:

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}, \quad |\alpha\rangle = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{A}|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} a_{11}\alpha_1 + a_{12}\alpha_2 + a_{13}\alpha_3 \\ a_{21}\alpha_1 + a_{22}\alpha_2 + a_{23}\alpha_3 \\ a_{31}\alpha_1 + a_{32}\alpha_2 + a_{33}\alpha_3 \end{pmatrix}$$

Per un dato operatore $\boldsymbol{A}$, si definisce l'operatore hermitiano coniugato (o aggiunto) e si indica con $\boldsymbol{A}^\dagger$ ("A daga") l'operatore trasposto coniugato. Sempre seguendo l'esempio precedente, si ha:

$$\boldsymbol{A}^\dagger = \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* & a_{31}^* \\ a_{12}^* & a_{22}^* & a_{32}^* \\ a_{13}^* & a_{23}^* & a_{33}^* \end{pmatrix}$$

L'importanza degli operatori daga è evidente quando vogliamo scrivere il bra di $\boldsymbol{A}|\alpha\rangle$. Si ha infatti che:

Il bra associato a $\boldsymbol{A}|\alpha\rangle$ è $\langle\alpha|\boldsymbol{A}^\dagger$

Esempio Vediamolo con un caso semplice : $\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{3} & \boldsymbol{i} \\ \boldsymbol{2i} & \boldsymbol{7+i} \end{pmatrix}$ **e** $|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} \boldsymbol{4} \\ \boldsymbol{i} \end{pmatrix}$

Sarà: $\boldsymbol{A}|\alpha\rangle = \begin{pmatrix} 11 \\ -1+15i \end{pmatrix}$ e quindi il bra corrispondente bra $\langle A\alpha| = (11 \quad (-1-15i))$

Mentre:

$$\langle\alpha|\boldsymbol{A}^\dagger = (4 \quad -i)\begin{pmatrix} 3 & -2i \\ -i & 7-i \end{pmatrix} = (11 \quad (-1-15i))$$

Nel caso in cui si abbia : $\boldsymbol{A}^\dagger = \boldsymbol{A}$, allora $\boldsymbol{A}$ si definisce un **operatore Hermitiano.**

Gli operatori Hermitiani hanno la seguente importantissima proprietà:

$$\langle\beta\ |\boldsymbol{A}\ \alpha\rangle = \langle\beta\boldsymbol{A}\ |\ \alpha\rangle$$

E si è soliti quindi indicare le precedenti formule come: $\langle\beta|\boldsymbol{A}|\alpha\rangle$.

Ovvero, se devo calcolare $\langle\beta\ |\boldsymbol{A}\ \alpha\rangle$, posso fare agire $\boldsymbol{A}$ su $|\alpha\rangle$ e quindi fare il prodotto interno di $|\beta\rangle$ per il risultato ottenuto. Alternativamente, posso fare "agire $\langle\beta|$ su $\boldsymbol{A}$" e procedere con il bra ottenuto a calcolare il prodotto interno con $|\alpha\rangle$….. Il virgolettato significa, nel nostro esempio con N=3,:

$$\langle\beta|\boldsymbol{A} = (b_1^* \ b_2^* \ b_3^*)\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$
$$= (b_1^*\, a_{11} + b_2^* a_{21} + b_3^* a_{31},\ b_1^*\, a_{12} + b_2^* a_{22} + b_3^* a_{32}, b_1^*\, a_{13} + b_2^* a_{23} + b_3^* a_{33}\ )$$

Autovalori e Autovettori.

Ci sono dei ket particolarmente importanti per ogni operatore, tali che:

$$\boldsymbol{A}|\alpha'\rangle = \alpha'|\alpha'\rangle$$

ossia che vengono trasformati in loro stessi moltiplicati per una costante. Questi ket si chiamano **autovettori** o **autostati** dell'operatore e le costanti moltiplicative sono gli **autovalori**.

<u>Come si trovano gli autovalori di una matrice?   Vedi esercizio 3.23 svolto in moodle</u>