Serie 0 Preliminares matemáticos

1. a) A es hermítico $\Rightarrow$ $A^\dagger = A$ $\longrightarrow$ $A|a\rangle = a|a\rangle$, $A|a'\rangle = a'|a'\rangle$

$\langle\alpha|\beta\rangle = \langle\beta|\alpha\rangle^*$

DC $\downarrow$ $\downarrow$ DC

$\langle a|A^\dagger = \langle a|a^*$ $\therefore$

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

1) $\langle a|A^\dagger|a\rangle = a^*\langle a|a\rangle$

2) $\langle a|A|a\rangle = a\langle a|a\rangle$

1) - 2) $\Rightarrow$ $\langle a|A^\dagger - A|a\rangle = (a^* - a)\langle a|a\rangle$

$0 = (a^* - a)\langle a|a\rangle$

$a^* = a$

$\Rightarrow$ los autovalores son reales

b) $A|a'\rangle = a'|a'\rangle$ $\quad a' \neq a$

$A|a\rangle = a|a\rangle$

$$\langle a|A|a'\rangle = (\langle a|)(A|a'\rangle) = a'\langle a|a'\rangle$$
$$= (\langle a|A)|a'\rangle = (\langle a|A^\dagger)|a'\rangle = \langle a|a^*|a'\rangle = a\langle a|a'\rangle$$

$$a'\langle a|a'\rangle = a\langle a|a'\rangle \quad ,$$

pero si $a' \neq a$ $\Rightarrow$ $\langle a|a'\rangle = 0$

$\Rightarrow$ los autovectores correspondientes a autovalores no degenerados son mutuamente ortogonales

c) $A|a'\rangle = a|a'\rangle$

$A|a\rangle = a|a\rangle$ el autovalor es el mismo, pero $|a\rangle \neq |a'\rangle$

$A|b'\rangle = b'|b'\rangle$

$A|b\rangle = b|b\rangle$ $\quad b' \neq b$ $\rightarrow$ $\langle b'|b\rangle = 0$

$$\langle a|A|b'\rangle = b'\langle a|b'\rangle$$
$$= a\langle a|b'\rangle$$
$$\langle a'|A|b'\rangle = b'\langle a'|b'\rangle$$
$$= a\langle a'|b'\rangle$$

$\rightarrow$ $b' = a$ para cualquier b' si $\langle a|b'\rangle \neq 0$

pero $\left.\begin{aligned}\langle a'|A|b\rangle &= b\langle a'|b\rangle \\ &= a\langle a'|b\rangle\end{aligned}\right\}$ $\Rightarrow$ $b = a = b'$ $\Rightarrow$ $b = b'$ pero no son iguales

$$\Rightarrow \langle a|b'\rangle = 0$$

$\Rightarrow$ Los autovectores correspondientes a autov. degenerados deben elegirse ortogonales a los No degenerados.

3.

a) $F_{ij} = \langle \psi_i | F | \psi_j \rangle$ y $F|\psi_i\rangle = \sum_j f_{ji} |\psi_j\rangle$ (Sumo en las filas j)

$$\langle \psi_k | F | \psi_i \rangle = \sum_j f_{ji} \langle \psi_k | \psi_j \rangle$$

$$\boxed{F_{ki} = \sum_j f_{ji} S_{kj}}$$

b) Si la base $\{|\psi_i\rangle\}$ es ortonormal, entonces: $S_{kj} = \delta_{kj}$

$$F_{ki} = \sum_j \delta_{kj} f_{ji} = f_{ki}$$

Coinciden cuando la base es ortonormal

2.

base $\{|\psi_i\rangle\}$ no ortonormal $\langle \psi_i | \psi_j \rangle = S_{ij}$ solapamiento

a)

$$|v_1\rangle = |\psi_1\rangle$$

$$|v_2\rangle = |\psi_2\rangle - \frac{\langle \psi_2 | v_1 \rangle^*}{\langle v_1 | v_1 \rangle} |v_1\rangle = |\psi_2\rangle - \frac{\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^*}{\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle} |\psi_1\rangle = |\psi_2\rangle - \frac{S_{21}^*}{\|\psi_1\|^2} |\psi_1\rangle$$

$$|v_3\rangle = |\psi_3\rangle - \frac{\langle \psi_3 | v_1 \rangle^*}{\langle v_1 | v_1 \rangle} |v_1\rangle - \frac{\langle \psi_3 | v_2 \rangle^*}{\langle v_2 | v_2 \rangle} |v_2\rangle$$

$$\ldots \qquad \frac{S_{31}^*}{\|v_1\|^2} |\psi_1\rangle - \frac{S_{32}^* - S_{21} S_{31}^* / \|\psi_1\|^2}{\|v_2\|^2}$$

comprobación:

$$\langle v_1 | v_2 \rangle = \langle \psi_1 | v_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle - \frac{\langle \psi_2 | v_1 \rangle^* \cancel{\langle v_1 | v_1 \rangle}}{\cancel{\langle v_1 | v_1 \rangle}} = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle - \langle v_1 | \psi_2 \rangle = 0$$

$$\langle v_2 | v_2 \rangle = \left(\langle \psi_2 | - \frac{\langle \psi_2 | v_1 \rangle}{\langle v_1 | v_1 \rangle} \langle v_1 | \right) \left(|\psi_2\rangle - \frac{\langle \psi_2 | v_1 \rangle^*}{\langle v_1 | v_1 \rangle} |v_1\rangle \right)$$

$$\langle v_2 | v_2 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle - \frac{|\langle \psi_2 | v_1 \rangle|^2}{\langle v_1 | v_1 \rangle} - \frac{|\langle \psi_2 | v_1 \rangle|^2}{\langle v_1 | v_1 \rangle} + \frac{|\langle \psi_2 | v_1 \rangle|^2 \cancel{\langle v_1 | v_1 \rangle}}{\langle v_1 | v_1 \rangle^{\cancel{2}}}$$

$$\langle v_2 | v_2 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_2 \rangle - \frac{|\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle|^2}{\langle v_1 | v_1 \rangle}$$

...

término enésimo

$$\boxed{|v_n\rangle = |\psi_n\rangle - \frac{\langle \psi_n | v_1 \rangle^*}{\langle v_1 | v_1 \rangle} |v_1\rangle - \ldots - \frac{\langle \psi_n | v_{n-1} \rangle^*}{\langle v_{n-1} | v_{n-1} \rangle} |v_{n-1}\rangle}$$

Comprobación:

$$\langle v_2 | v_3 \rangle = \left(\langle \psi_2 | - \frac{\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle}{\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle} \langle \psi_1 | \right) \left(|\psi_3\rangle - \frac{\langle \psi_3 | \psi_1 \rangle^*}{\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle} |\psi_1\rangle - \frac{\langle \psi_3 | v_2 \rangle^*}{\langle v_2 | v_2 \rangle} |v_2\rangle \right)$$

$$= \left(\langle \psi_2 | - \frac{S_{21}}{\|v_1\|^2} \langle v_1 | \right) \left(|\psi_3\rangle - \frac{S_{31}^*}{\|v_1\|^2} |v_1\rangle - \frac{\langle \psi_3 | v_2 \rangle^*}{\|v_2\|^2} |v_2\rangle \right)$$

$$= \langle \psi_2 | \psi_3 \rangle - \frac{S_{31}^*}{\|v_1\|^2} \langle \psi_2 | v_1 \rangle - \frac{\langle v_2 | \psi_3 \rangle}{\|v_2\|^2} \langle \psi_2 | v_2 \rangle - \frac{S_{21}}{\|v_1\|^2} \langle v_1 | \psi_3 \rangle + \frac{S_{21} S_{31}^* \cancel{\langle v_1 | v_1 \rangle}}{\|v_1\|^{\cancel{4}\,2}}$$

$$+ \underbrace{\frac{S_{21} \langle v_2 | \psi_3 \rangle \langle v_1 | v_2 \rangle}{\|v_1\|^2 \|v_2\|^2}}_{=0} = \langle \psi_2 | \psi_3 \rangle - \frac{S_{13} S_{21}}{\|v_1\|^2} - \frac{\langle v_2 | \psi_3 \rangle \langle \psi_2 | v_2 \rangle}{\|v_2\|^2} - \cancel{\frac{S_{21} S_{13}}{\|v_1\|^2}} + \cancel{\frac{S_{21} S_{13}}{\|v_1\|^2}}$$

$$= \langle\psi_2|\psi_3\rangle - \frac{S_{13}S_{21}}{\|v_1\|^2} - \frac{\langle v_2|\psi_3\rangle}{\|v_2\|^2}\left(\langle v_2| + \frac{S_{21}\langle v_1|}{\|v_1\|^2}\right)|v_2\rangle$$

$$= S_{23} - \frac{S_{13}S_{21}}{\|v_1\|^2} - \langle v_2|\psi_3\rangle \qquad \langle v_1|v_2\rangle = 0$$

$$\langle v_2|v_3\rangle = S_{23} - \cancel{\frac{S_{13}S_{21}}{\|v_1\|^2}} - \langle\psi_2|\psi_3\rangle + \cancel{\frac{S_{21}S_{13}}{\|v_1\|^2}} = S_{23} - S_{23} = 0 \Rightarrow$$

$$|v_2\rangle \perp |v_3\rangle$$

b)

$$|\psi_i'\rangle = \sum_j S_{ij}^{-1/2}|\psi_j\rangle$$

$$\langle\psi_k'|\psi_i'\rangle = \sum_\ell S_{k\ell}^{-1/2\,\dagger}\langle\psi_\ell| \sum_j S_{ij}^{-1/2}|\psi_j\rangle$$

$$= \sum_{\ell j} \frac{1}{(S_{\ell k}^{1/2})^*}\frac{1}{S_{ij}^{1/2}}\langle\psi_\ell|\psi_j\rangle$$

$$\langle\psi_k|\psi_\ell\rangle\langle\psi_i|\psi_j\rangle$$

4.

i. Sea P_{12} el operador permutación $\Rightarrow$

$$P_{12}|\chi_i(1)\chi_j(2)\rangle = |\chi_j(1)\chi_i(2)\rangle$$

$$\rightarrow (P_{12})^2|\chi_i(1)\chi_j(2)\rangle = |\chi_i(1)\chi_j(2)\rangle \Rightarrow (P_{12})^2 = \mathbb{1}$$

$$P_{12}.P_{12}.P_{12}^{-1} = \mathbb{1}.P_{12}^{-1}$$

$$P_{12} = P_{12}^{-1}$$

$$P_{12}|\chi_i\chi_j\rangle = |\chi_j\chi_i\rangle$$

$$\downarrow \langle\chi_i\chi_j|P_{12}^\dagger = \langle\chi_j\chi_i| \rightarrow P_{12}^\dagger \text{ permuta } ij \text{ en el bra} \Rightarrow$$

$$\langle\chi_i\chi_j|P_{12}^\dagger P_{12}|\chi_i\chi_j\rangle = \langle\chi_j\chi_i|\chi_j\chi_i\rangle = 1 \Rightarrow P_{12}^\dagger P_{12} = \mathbb{1}$$

$$\Rightarrow \boxed{P_{12} \text{ es unitario}}$$

ii.

$$A = \frac{1}{(N!)^{1/2}}\sum_P (-1)^p P$$

6. Dos matrices equivalentes o similares están conectadas por

$$UAU^{-1} = B \quad \Rightarrow \quad A, B \text{ son similares } \left(\begin{smallmatrix}\text{base no}\\ \text{ortonormal}\end{smallmatrix}\right)$$

donde $U|a_\ell\rangle = |b_\ell\rangle$ y $A|a_\ell\rangle = a_\ell |a_\ell\rangle$

$$UAU^{-1}U|a_\ell\rangle = UA|a_\ell\rangle = a_\ell U|a_\ell\rangle$$

$$UAU^{-1}\left(U|a_\ell\rangle\right) = a_\ell\left(U|a_\ell\rangle\right)$$

$$UAU^{-1}|b_\ell\rangle = a_\ell |b_\ell\rangle$$

$$B|b_\ell\rangle = a_\ell |b_\ell\rangle \rightarrow \boxed{\begin{array}{l} a_\ell \text{ es autovalor de } B = UAU^{-1} \\ a_\ell \text{ es autovalor de } A \end{array}}$$

Como tienen

7.

$$\text{traza}(A) = \sum_k \langle a_k | A | a_k \rangle \qquad U|a_k\rangle = |b_k\rangle$$

$$tr(A)_{|a\rangle} = \sum_k \langle a_k | U^+ A U | a_k \rangle \qquad |b_k\rangle =$$

$$= \sum_{k,i,j} \langle a_k | a_i \rangle \langle b_i | A | b_j \rangle \langle a_j | a_k \rangle \qquad |b_k\rangle = \underbrace{\sum_i |b_i\rangle\langle a_i|}_{\equiv U} a_k\rangle = U|a_k\rangle$$

$$= \sum_{k,i,j} \delta_{ki} \langle b_i | A | b_j \rangle \delta_{jk}$$

$$tr(A)_{|a\rangle} = \sum_k \langle b_k | A | b_k \rangle = tr(A)_{|b\rangle}$$

$\Rightarrow$ la traza es invariante ante una transformación de similaridad.

Para la demostración del determinante necesitamos demostrar otras previas

$$A^{-1} A = \mathbb{1} \rightarrow$$

$$\det(A^{-1}A) = \det(\mathbb{1}) = 1$$

$$\det(A^{-1}) . \det(A) = 1 \Rightarrow \det(A^{-1}) = \frac{1}{\det(A)}$$

Como $U^+U = \mathbb{1} \Rightarrow U^+U = U^{-1}U = \mathbb{1} \Rightarrow$

$U^+ = U^{-1}$ por unitariedad

$$\det(U^+ A U) = \det(U^+) . \det(A) . \det(U)$$

$$= \det(U^{-1}) . \det(A) . \det(U)$$

$$= \cancel{\frac{1}{\det(U)}} . \det(A) . \cancel{\det(U)} = \det(A)$$

$\Rightarrow$ el determinante es invariante ante una transformación de similaridad.

8. A matriz no degenerada $\Rightarrow$ $A|a_i\rangle = a_i|a_i\rangle$ con $a_i \neq a_j$
$A|a_j\rangle = a_j|a_j\rangle$

Según álgebra $\rightarrow |a_i\rangle$ Li $\Rightarrow \sum_{i=1}^{N} c_i|a_i\rangle = 0 \iff c_i = 0 \ \forall\ i = 1, 2, \dots, N$

sean algunos no LI $\Rightarrow$ $(N-m)$ NO LI
$$\sum_{k=m+1}^{N} c_k|a_k\rangle = -\sum_{i=1}^{M} c_i|a_i\rangle = \sum_{k=1}^{M} c'_k|a_k\rangle$$

Ponemos los LD en función de los LI $\Rightarrow$
$$\sum_{M+1}^{N} c_k|a_k\rangle = \sum_{1}^{M} c'_k|a_k\rangle$$

, donde los c'_k no son todos nulos. Luego cualquier LD puede ponerse en función de los LI $\Rightarrow$ tomando el $M+1$ será
$$\hat{A}\left(c_{M+1}|a_{M+1}\rangle\right) = c_{M+1}\, a_{M+1}|a_{M+1}\rangle = \sum_{k=1}^{M} c'_k\, a_k|a_k\rangle \quad [1]$$

pero también
$$c_{M+1}\, a_{M+1}|a_{M+1}\rangle = \sum_{k=1}^{M} c'_k\, a_{M+1}|a_k\rangle \quad [2]$$

Restando [1] de [2]
$$\sum_{k=1}^{M} c'_k(a_{M+1} - a_k)|a_k\rangle = 0$$

pero una CL de estos M vectores $|a_k\rangle$ no puede ser nula a menos de que $c'_k(a_{m+1} - a_k) = 0 \ \forall k$ porque son todos LI $\Rightarrow$ $c'_k = 0 \ \forall k$ pues $a_{M+1} - a_k \neq 0$ por hipótesis $\Rightarrow$ absurdo porque supusimos c'_k no todos nulos $\Rightarrow$ Los N vectores son Li

11. Transformación U unitaria $\Rightarrow$ $U^{+}U = \mathbb{1}$

$$U|\alpha\rangle = |\alpha'\rangle \rightarrow \langle\alpha|U^{+} = \langle\alpha'|$$
$$U|\beta\rangle = |\beta'\rangle \rightarrow \langle\beta|U^{+} = \langle\beta'|$$

$$\langle\alpha'|\beta'\rangle = \langle\alpha|U^{+}U|\beta\rangle = \langle\alpha|\mathbb{1}|\beta\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle \Rightarrow$$

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

$\Rightarrow$ EL producto interno de dos vectores es invariante ante una transformación unitaria de los mismos.

10. Matriz U:

$$(UA)_{ij} = \sum_k U_{ik}A_{kj}\,\delta_{ij}$$

$$[(UA)_{ij}]^{+} = \sum_k A_{jk}U_{ki}\,\delta_{ji}$$

$$(A^{+}U^{+})_{ij} = \sum_k A_{jk}U_{ki}\,\delta_{ji}$$

$$(AU^{+})_{ij}$$

$$(AU^{+}\cdot UA)_{ij} = \sum_{k\ell} A_{jk}U_{ki}\,\delta_{ji}\,U_{i\ell}A_{\ell j}\,\delta_{ij}$$

$$(U^{2})_{ij} = \sum_k U_{ik}U_{kj}$$

$$(UA)_{ij} = \sum_k U_{ik}A_{kj}$$

$$(UA\cdot UA)_{ij} = \sum_k (UA)_{ik}(UA)_{kj}$$

$$(UA^{2})_{ij} = \sum_{k,\ell,m} U_{i\ell}A_{\ell k}U_{km}A_{mj}$$