Tema IV: Operadores lineales

José D. Edelstein

Universidade de Santiago de Compostela

FÍSICA MATEMÁTICA

Santiago de Compostela, marzo de 2011

Representaciones de un operador. Operador inverso. Operador adjunto, hermítico, unitario. Proyectores. Valores propios y espectro. Diagonalización simultánea.

Operadores lineales y antilineales

Sea V un espacio vectorial sobre Ω. Una aplicación u operador $\mathcal{O}$ se dirá que es lineal si $\forall |\mathbf{u}\rangle, |\mathbf{v}\rangle \in \mathcal{D}(\mathcal{O}) \subset V$ (*dominio* de definición de $\mathcal{O}$) y $\forall\, a \in \Omega$,

$$\mathcal{O}\,(|\mathbf{u}\rangle + |\mathbf{v}\rangle) = \mathcal{O}\,|\mathbf{u}\rangle + \mathcal{O}\,|\mathbf{v}\rangle \qquad \mathcal{O}\,(a\,|\mathbf{u}\rangle) = a\,\mathcal{O}\,(|\mathbf{u}\rangle)\ ,$$

y llamaremos $\mathcal{R}(\mathcal{O}) := \mathcal{O}\,(\mathcal{D}(\mathcal{O})) \subset V$ al *recorrido* de $\mathcal{O}$.

Para simplificar escribimos $\mathcal{O}\,|\mathbf{u}\rangle = \mathcal{O}\,(|\mathbf{u}\rangle)$. Si por el contrario $\mathcal{O}$ verifica

$$\mathcal{O}\,(|\mathbf{u}\rangle + |\mathbf{v}\rangle) = \mathcal{O}\,|\mathbf{u}\rangle + \mathcal{O}\,|\mathbf{v}\rangle \qquad \mathcal{O}\,(a\,|\mathbf{u}\rangle) = a^\star\,\mathcal{O}\,(|\mathbf{u}\rangle)\ ,$$

diremos que es antilineal.

Sea $\mathcal{L}(V)$ el conjunto de las aplicaciónes lineales de $\mathcal{D}(\mathcal{O})$ en $\mathcal{R}(\mathcal{O})$; admite una estructura de espacio vectorial sobre Ω, sin más que definir:

$$(\mathcal{O}_1 + \mathcal{O}_2)\,|\mathbf{u}\rangle := \mathcal{O}_1\,|\mathbf{u}\rangle + \mathcal{O}_2\,|\mathbf{u}\rangle \qquad (a\,\mathcal{O})\,|\mathbf{u}\rangle := a\,(\mathcal{O}\,|\mathbf{u}\rangle)\ .$$

En particular, el operador identidad, $\mathbb{I}$, verifica $\mathbb{I}\,|\mathbf{v}\rangle = |\mathbf{v}\rangle$, $\forall\,|\mathbf{v}\rangle \in V$.

Operadores lineales y antilineales

Llamamos operador cero, $\mathbb{O}$, a aquel que cumple $\mathbb{O}\,|\mathbf{u}\rangle = |\mathbf{0}\rangle \in V$, $\forall\,|\mathbf{u}\rangle \in V$.

Si no se especifica lo contrario, supondremos que $\mathcal{D}(\mathcal{O}) = V$. En ese caso,

$$(\mathcal{O}_1\,\mathcal{O}_2)\,|\mathbf{u}\rangle := \mathcal{O}_1\,(\mathcal{O}_2\,|\mathbf{u}\rangle)\ ,$$

la composición de operadores hace de $\mathcal{L}(V)$ un álgebra de operadores.

Se utilizan de manera equivalente las dos notaciones: $|\mathcal{O}\,\mathbf{v}\rangle := \mathcal{O}\,|\mathbf{v}\rangle$.

Sea $\mathcal{H}$ un espacio de Hilbert y $\mathcal{O} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$, definimos la norma de $\mathcal{O}$ mediante

$$\|\mathcal{O}\| = \sup \frac{\|\mathcal{O}\,|\mathbf{v}\rangle\|}{\||\mathbf{v}\rangle\|}\ .$$

Decimos que $\mathcal{O}$ es un operador acotado si $\|\mathcal{O}\| < \infty$.

Sea $\mathcal{O} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ un operador lineal acotado sobre $\mathcal{H}$. Dados dos vectores $|\mathbf{v}\rangle$ y $|\mathbf{w}\rangle$, definimos el elemento de matriz:

$$\langle\mathbf{w}|\,\mathcal{O}\,|\mathbf{v}\rangle \in \Omega\ .$$

Representación de un operador

Recordemos que hemos visto dos bases del espacio dual:

- la base canónica dual $\langle \mathbf{e}^i|$ $\qquad \langle \mathbf{e}^i|\mathbf{e}_j\rangle = \delta^i{}_j$,
- la base adjunta $\langle \mathbf{e}_i| = |\mathbf{e}_i\rangle^\dagger$ $\qquad \langle \mathbf{e}_i|\mathbf{e}_j\rangle \equiv (|\mathbf{e}_i\rangle, |\mathbf{e}_j\rangle) = g_{ij}$.

La relación entre ambas bases es $\langle \mathbf{e}_i| = g_{ij}\,\langle \mathbf{e}^j|$, y si $|\mathbf{v}\rangle = v^i\,|\mathbf{e}_i\rangle$,

$$\langle \mathbf{v}| = v^{i\star}\langle \mathbf{e}_i| = v_i\,\langle \mathbf{e}^i| \qquad \Longrightarrow \qquad v_i^\star = g_{ij}\,v^j \ .$$

En una base ortonormal $g_{ij} = \delta_{ij}$ podemos establecer una relación diagonal

$$\langle \mathbf{e}_i| = \langle \mathbf{e}^i| \qquad \Longleftrightarrow \qquad v_i = v^{i\star} \ .$$

Sea $\mathbf{O}$ un cambio de base. Si $\mathcal{H}$ es un espacio de Hilbert complejo, $\Omega = \mathbb{C}$, la matriz de productos escalares se transforma de la manera siguiente

$$g_{i'j'} = \langle \mathbf{e}_{i'}|\mathbf{e}_{j'}\rangle = \langle O^i{}_{i'}\,\mathbf{e}_i|O^j{}_{j'}\,\mathbf{e}_j\rangle = (O^i{}_{i'})^\star\,g_{ij}\,O^j{}_{j'} \ ,$$

o, en forma matricial, $g' = \mathbf{O}^\dagger\,g\,\mathbf{O}$.

Operadores como elementos de $\mathcal{T}^1{}_1$

Un operador es una aplicación que tiene vectores por argumento e imagen,

$$\mathcal{O} : |\mathbf{v}\rangle \longrightarrow |\mathbf{v}'\rangle = \mathcal{O}\left(|\mathbf{v}\rangle\right) .$$

En este sentido, se trata claramente de un tensor de rango $(1;1)$.

Dada una base $\{|\mathbf{e}_i\rangle\}$ de V, lo más natural es representar a $\mathcal{O} \in \mathcal{L}(V)$ de la manera siguiente:

$$\mathcal{O} = \mathcal{O}^i{}_j \, |\mathbf{e}_i\rangle \langle \mathbf{e}^j| := \mathcal{O}^i{}_j \, |\mathbf{e}_i\rangle \otimes \langle \mathbf{e}^j| .$$

No usamos índices i', j' ya que $\mathcal{O}$ es transformación activa y no cambio de base. Las componentes $\mathcal{O}^i{}_j$ expresan la acción del operador sobre la base:

$$\mathcal{O} : |\mathbf{e}_i\rangle \longrightarrow |\mathbf{e}_i'\rangle = \mathcal{O}\,|\mathbf{e}_i\rangle = \mathcal{O}^k{}_j \, |\mathbf{e}_k\rangle \langle \mathbf{e}^j|\mathbf{e}_i\rangle = \mathcal{O}^k{}_j \, |\mathbf{e}_k\rangle \, \delta^j{}_i = \mathcal{O}^k{}_i \, |\mathbf{e}_k\rangle ,$$

y, por lo tanto, se recuperan utilizando la base canónica dual:

$$\mathcal{O}^j{}_i = \langle \mathbf{e}^j| \, \mathcal{O} \, |\mathbf{e}_i\rangle .$$

Operadores como elementos de $\mathcal{T}^1{}_1$

Es fácil ver cómo transforma $\mathcal{O}$ frente a un cambio de base. Si $|\mathbf{e}_{i'}\rangle = O^i{}_{i'}\,|\mathbf{e}_i\rangle$, los $\mathcal{O}^i{}_j$ transforman como las componentes de un tensor $(1;1)$:

$$\mathcal{O}^{i'}{}_{j'} = O^{i'}{}_i\,\mathcal{O}^i{}_j\,O^j{}_{j'} \qquad \Longleftrightarrow \qquad \mathcal{O}' = \mathbf{O}^{-1}\,\mathcal{O}\,\mathbf{O}\ .$$

Tras caracterizar un operador $\mathcal{O}$, su acción sobre cualquier elemento de $\mathcal{H}$, $|\mathbf{v}\rangle = v^i\,|\mathbf{e}_i\rangle$, por linealidad,

$$|\mathbf{v}'\rangle = \mathcal{O}\,|\mathbf{v}\rangle = v^i\,\mathcal{O}\,|\mathbf{e}_i\rangle = v^i\,\mathcal{O}^j{}_i\,|\mathbf{e}_j\rangle = v'^j\,|\mathbf{e}_j\rangle\ .$$

Por lo tanto, las componentes del nuevo vector

$$v'^j = \mathcal{O}^j{}_i\,v^i \qquad \Longleftrightarrow \qquad \mathbf{v}' = \mathcal{O}\cdot\mathbf{v}\ ,$$

son funciones lineales de las del antiguo.

Análogamente, el elemento de matriz de $\mathcal{O}$ entre dos vectores arbitrarios $|\mathbf{v}\rangle$ y $|\mathbf{w}\rangle$ de $\mathcal{H}$ es

$$\langle\mathbf{w}|\,\mathcal{O}\,|\mathbf{v}\rangle = \langle\mathbf{w}|\mathcal{O}\,\mathbf{v}\rangle = w_j^\star\,\mathcal{O}^j{}_i\,v^i\ .$$

Ejemplos de operadores

- Identidad:

  El operador identidad, $\mathbb{I}$, puede escribirse como

  $$\mathbb{I} = \delta^i{}_j \, |\mathbf{e}_i\rangle \, \langle\mathbf{e}^j| = |\mathbf{e}_i\rangle\langle\mathbf{e}^i| \qquad \Longleftrightarrow \qquad \mathbb{I}^i{}_j = \delta^i{}_j \ ,$$

  en una base discreta, $\{|\mathbf{e}_i\rangle\}_{i=1,2,3,\ldots}$ de V.

- Operador Escalera:

  Dada una base discreta, $\{|\mathbf{e}_i\rangle\}_{i=1,2,3,\ldots}$ de V, podemos definir la acción del operador escalera, $\mathbb{T}_{\pm 1}$,

  $$\mathbb{T}_{\pm 1} \, |\mathbf{e}_i\rangle = c_{(i\pm 1)} \, |\mathbf{e}_{i\pm 1}\rangle \qquad \Longleftrightarrow \qquad \mathbb{T}_{\pm 1}{}^j{}_i = c_{(i\pm 1)} \, \delta^j{}_{i\pm 1} \ ,$$

  donde $c_{(i\pm 1)}$ son *constantes*. Claramente,

  $$\mathbb{T}_{\pm 1} = \mathbb{T}_{\pm 1}{}^j{}_i \, |\mathbf{e}_j\rangle \, \langle\mathbf{e}^i| = \sum_{i\geq 1} c_{(i\pm 1)} \, |\mathbf{e}_{i\pm 1}\rangle \, \langle\mathbf{e}^i|$$

  Dado que $\mathbb{T}_{-1} \, |\mathbf{e}_1\rangle = |\mathbf{0}\rangle$, imponemos $c_{(0)} = 0$.

Representación covariante de un operador

Si $\mathcal{O} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ es un operador lineal, podemos tomar los elementos de matriz

$$\mathcal{O}_{ij} = \langle \mathbf{e}_i | \, \mathcal{O} \, | \mathbf{e}_j \rangle \ ,$$

asociados a una representación de la forma siguiente

$$\mathcal{O} = \mathcal{O}_{ij} \, |\mathbf{e}^i\rangle \, \langle \mathbf{e}^j| := \mathcal{O}_{ij} \, |\mathbf{e}^i\rangle \otimes \langle \mathbf{e}^j| \qquad \Longrightarrow \qquad \mathcal{O}_{ij} = g^\star_{ik} \, \mathcal{O}^k{}_j \ ,$$

debido a la (anti)linealidad del producto escalar.

Si el producto escalar es no-degenerado $\det g_{ij} \neq 0$, existe la relación inversa

$$\mathcal{O}^k{}_j = g^{ik} \, \mathcal{O}_{ij} \qquad\qquad g^{ki} \, g_{ij} = \delta^k{}_j \ .$$

Los *elementos de matriz* transforman como el tensor métrico:

$$\mathcal{O}_{i'j'} = \langle \mathbf{e}_{i'} | \, \mathcal{O} \, | \mathbf{e}_{j'} \rangle = \ (O^i{}_{i'})^\star \langle \mathbf{e}_i | \, \mathcal{O} \, | \mathbf{e}_j \rangle \, O^j{}_{j'} = \ (O^i{}_{i'})^\star \, \mathcal{O}_{ij} \, O^j{}_{j'} \ .$$

En notación matricial, $\mathcal{O}' = \mathbf{O}^\dagger \, \mathcal{O} \, \mathbf{O}$, donde $\mathbf{O}^\dagger = \mathbf{O}^{t\star}$. Notar la diferencia con la otra representación del mismo operador, $\mathcal{O}^i{}_j$, $\mathcal{O}' = \mathbf{O}^{-1} \, \mathcal{O} \, \mathbf{O}$.

La traza invariante y el operador cero

Sólo para $\mathbb{T}^i{}_j$ tiene la traza un significado invariante. En efecto, $\mathrm{Tr}\,\mathbb{T} := \mathbb{T}^i{}_i$ es un escalar y, por lo tanto, invariante bajo cambios de base:

$$\mathbb{T}^{i'}{}_{i'} = O^{i'}{}_i\,\mathbb{T}^i{}_j\,O^j{}_{i'} = \; O^j{}_{i'}\,O^{i'}{}_i\,\mathbb{T}^i{}_j = \; \delta^j{}_i\,\mathbb{T}^i{}_j = \; \mathbb{T}^i{}_i \; .$$

Lema: Sea $\mathcal{O} \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ ($\mathcal{H}$ un espacio de Hilbert complejo). Si $\langle \mathbf{v}|\mathcal{O}\,\mathbf{v}\rangle = 0$, $\forall\,|\mathbf{v}\rangle \in \mathcal{H}$, entonces $\mathcal{O} = \mathbb{O}$.

Demostración: Si $\langle \mathbf{v}|\mathcal{O}\,\mathbf{v}\rangle = 0$, $\forall\,|\mathbf{v}\rangle \in \mathcal{H}$, entonces

$$\langle \mathbf{v}+\mathbf{w}|\,\mathcal{O}\,(\mathbf{v}+\mathbf{w})\rangle = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad \langle \mathbf{v}|\mathcal{O}\,\mathbf{w}\rangle + \langle \mathbf{w}|\mathcal{O}\,\mathbf{v}\rangle = 0 \; ,$$

mientras que

$$\langle \mathbf{v}+i\,\mathbf{w}|\mathcal{O}\,(\mathbf{v}+i\,\mathbf{w})\rangle = 0 \qquad \Longrightarrow \qquad \langle \mathbf{v}|\mathcal{O}\,\mathbf{w}\rangle - \langle \mathbf{w}|\mathcal{O}\,\mathbf{v}\rangle = 0 \; .$$

Es decir, $\langle \mathbf{v}|\mathcal{O}\,\mathbf{w}\rangle = 0$, $\forall\,|\mathbf{v}\rangle, |\mathbf{w}\rangle \in \mathcal{H}$. En particular, tomando $|\mathbf{v}\rangle = \mathcal{O}\,|\mathbf{w}\rangle$,

$$\|\mathcal{O}\,|\mathbf{w}\rangle\| = 0 \qquad \Longleftrightarrow \qquad \mathcal{O}\,|\mathbf{w}\rangle = |\mathbf{0}\rangle \qquad \Longleftrightarrow \qquad \mathcal{O} = \mathbb{O} \; .$$

Si $\mathcal{H}$ es un espacio de Hilbert sobre $\mathbb{R}$, la demostración del lema falla.

Base ortonormal y representaciones de un operador

Por ejemplo, en $\mathcal{H} = \mathbb{R}^2$ con el producto escalar euclídeo, el operador $\mathbb{R}_{\frac{\pi}{2}}$ que rota cualquier vector, $|\mathbf{v}\rangle := (x, y)$, un ángulo $\frac{\pi}{2}$ en torno al origen,

$$\mathbb{R}_{\frac{\pi}{2}} : (x, y) \to (-y, x) \ ,$$

es claramente no-nulo, sin embargo verifica

$$\langle \mathbf{v} | \mathbb{R}_{\frac{\pi}{2}} \mathbf{v} \rangle = 0 \qquad \forall \, |\mathbf{v}\rangle \in \mathcal{H} \ .$$

Recordemos que Gramm-Schmidt da una base ortonormal en la que subir y bajar índices se reduce a la conjugación compleja,

$$g_{ij} = \langle \mathbf{e}_i | \mathbf{e}_j \rangle = \delta_{ij} \qquad \Longrightarrow \qquad w_j = w^{i\star} \, \delta_{ij} = w^{j\star} \ ,$$

y para los elementos de matriz de $\mathcal{O}$, a la identidad:

$$\mathcal{O}_{ij} = \delta_{ik} \, \mathcal{O}^k{}_j = \mathcal{O}^i{}_j \ .$$

En una base ortonormal no se diferencian las dos representaciones de $\mathcal{O}$.

Si $\Omega = \mathbb{R}$, g_{ij} forma las componentes de un $(0; 2)$-tensor simétrico. Si la base es ortonormal, $w_i = w^i$ y $A_{ij} = A^i{}_j$.

Representación continua: identidad

Si utilizamos una base continua $\{|\mathbf{w}_\alpha\rangle\} \in V$, con $\alpha \in \mathbb{R}$, (*e.g.*, las bases $|x\rangle$ ó $|p\rangle$), también tenemos elementos de matriz

$$\mathcal{O}^\alpha{}_\beta = \langle \mathbf{w}^\alpha | \, \mathcal{O} \, | \mathbf{w}_\beta \rangle \ ,$$

y una representación continua

$$\mathcal{O} = \int d\alpha \, d\beta \, \mathcal{O}^\alpha{}_\beta \, |\mathbf{w}_\alpha\rangle \langle \mathbf{w}^\beta| \ .$$

Veamos algunos ejemplos:

- Operador Identidad: Análogamente a lo encontrado antes,

$$\mathbb{I} = \int d\alpha \, d\beta \, \delta(\alpha - \beta) \, |\mathbf{w}_\alpha\rangle \langle \mathbf{w}^\beta| = \int d\alpha \, |\mathbf{w}_\alpha\rangle \langle \mathbf{w}^\alpha| \ ,$$

en una base continua. Así por ejemplo, en las bases de posición y momento:

$$\mathbb{I} = \int dx \, |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}| = \int dp \, |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| \qquad \text{ó} \qquad \mathbb{I} = \int d^3x \, |\vec{\mathbf{x}}\rangle \langle \vec{\mathbf{x}}| \ .$$

Representación continua: traslación

- Operador de Traslación: Sea la base continua $\{|\mathbf{x}\rangle\}$ y la traslación, $\mathbb{T}_a$,

$$\mathbb{T}_a\,|\mathbf{x}\rangle = c_{(x+a)}\,|\mathbf{x}+\mathbf{a}\rangle \ ,$$

con un cambio de escala dado por el número $c_{(x)}$. Los elementos de matriz:

$$\mathbb{T}_a{}^{x'}{}_x = c_{(x')}\,\delta(x'-(x+a))$$

y, por lo tanto, admite una expansión

$$\mathbb{T}_a = \int dx\,dx'\;\mathbb{T}_a{}^{x'}{}_x|\mathbf{x}'\rangle\,\langle\mathbf{x}| = \int dx\;c_{(x+a)}\,|\mathbf{x}+\mathbf{a}\rangle\,\langle\mathbf{x}| \ .$$

La acción de $\mathbb{T}_a$ sobre $|\mathbf{f}\rangle \in \mathcal{H}$ en la base de posiciones, $f(x) = \langle\mathbf{x}|\mathbf{f}\rangle$,

$$\langle\mathbf{x}|\,\mathbb{T}_a\,|\mathbf{f}\rangle = \int dy\;c_{(y+a)}\,\langle\mathbf{x}|\mathbf{y}+\mathbf{a}\rangle\,\langle\mathbf{y}|\mathbf{f}\rangle = \int dy\;c_{(y+a)}\,\delta(x-(y+a))\,f(y) \ ,$$

de modo que $\mathbb{T}_a\,|\mathbf{f}\rangle = |\mathbf{f_a}\rangle$:

$$\langle\mathbf{x}|\,\mathbb{T}_a\,|\mathbf{f}\rangle = \langle\mathbf{x}|\mathbf{f_a}\rangle = c_{(x)}\,f(x-a) \ ,$$

que representa la traslación de la función $f(x)$.

Representación continua: posición

- Operador Posición: Tomemos el operador de traslación $\mathbb{T}_0$ y $c_{(x)} = x$.

El operador resultante se denomina posición:

$$\mathbf{X} = \int dx\; x\, |\mathbf{x}\rangle\, \langle \mathbf{x}|\;.$$

La acción de este operador es diagonal sobre la base de posiciones:

$$\mathbf{X}\, |\mathbf{x}\rangle = x\, |\mathbf{x}\rangle \qquad\qquad \mathbf{X}^{x'}{}_{x} = \langle \mathbf{x}'|\, \mathbf{X}\, |\mathbf{x}\rangle = x\, \delta(x' - x)\;.$$

Sobre cualquier elemento $|\mathbf{f}\rangle \in \mathcal{H}$ es fácil de calcular en esta base

$$|\mathbf{X}\,\mathbf{f}\rangle := \mathbf{X}\, |\mathbf{f}\rangle = \left(\int dx\; x\, |\mathbf{x}\rangle\, \langle \mathbf{x}|\right) \int dx'\; f(x')\, |\mathbf{x}'\rangle = \int dx'\; x'\, f(x')\, |\mathbf{x}'\rangle\;,$$

o, tomando el producto dual con $\langle \mathbf{x}|$,

$$f(x) = \langle \mathbf{x}|\mathbf{f}\rangle \qquad \Longrightarrow \qquad \langle \mathbf{x}|\mathbf{X}\,\mathbf{f}\rangle = x\, f(x)\;.$$

Representación continua: momento y cambio de base

• Operador Momento: El operador momento se define como el de posición, pero en la base de momentos:

$$\mathbf{P} = \int dp\, p\, |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| \,.$$

Es decir, su acción es diagonal en esta base

$$\mathbf{P}\,|\mathbf{p}\rangle = p\,|\mathbf{p}\rangle \qquad\qquad \mathbf{P}^{p'}{}_{p} = \langle \mathbf{p}'|\,\mathbf{P}\,|\mathbf{p}\rangle = p\,\delta(p'-p) \,.$$

De forma totalmente análoga al operador de posición, la acción del operador de momento es sencilla en la base de momento:

$$\tilde{f}(p) = \langle \mathbf{p}|\mathbf{f}\rangle \qquad \Longrightarrow \qquad \langle \mathbf{p}|\mathbf{P}\,\mathbf{f}\rangle = p\,\tilde{f}(p) \,.$$

Cambio de base continua: Ante un cambio de base,

$$|\mathbf{w}_{\gamma'}\rangle = \int d\beta\; O^{\beta}{}_{\gamma'}\, |\mathbf{w}\rangle_{\beta} \;,$$

la posición de los índices dicta la transformación de los elementos de matriz.

Cambio de bases continuas: el momento en la base de la posición

Los elementos de matriz se transforman como sigue

$$\mathcal{O}^{\gamma'}{}_{\delta'} = \langle \mathbf{w}^{\gamma'} | \, \mathcal{O} \, | \mathbf{w}_{\delta'} \rangle = \langle \mathbf{w}^{\gamma'} | \left(\int d\alpha \, | \mathbf{w}_\alpha \rangle \langle \mathbf{w}^\alpha | \right) \mathcal{O} \left(\int d\beta \, | \mathbf{w}_\beta \rangle \langle \mathbf{w}^\beta | \right) | \mathbf{w}_{\delta'} \rangle$$

$$= \int d\alpha \, d\beta \, \langle \mathbf{w}^{\gamma'} | \mathbf{w}_\alpha \rangle \, \mathcal{O}^\alpha{}_\beta \, \langle \mathbf{w}^\beta | \mathbf{w}_{\delta'} \rangle = \int d\alpha \, d\beta \, O^{\gamma'}{}_\alpha \, \mathcal{O}^\alpha{}_\beta \, O^\beta{}_{\delta'} \, .$$

La expresión resultante es análoga a la obtenida anteriormente.

Para representar el operador momento $\mathbf{P}$ en la base de posiciones, el cambio de base, recordemos, viene dado por

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \, e^{ipx} = \langle \mathbf{p} | \mathbf{x} \rangle^\star \, .$$

Entonces:

$$\langle \mathbf{x} | \, \mathbf{P} \, | \mathbf{x}' \rangle = \int dp \, dp' \, \langle \mathbf{x} | \mathbf{p} \rangle \, \langle \mathbf{p} | \, \mathbf{P} \, | \mathbf{p}' \rangle \, \langle \mathbf{p}' | \mathbf{x}' \rangle = \int dp \, dp' \, \frac{1}{2\pi} \, e^{i(px - p'x')} \, p \, \delta(p - p')$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int dp \, p \, e^{ip(x-x')} = -\frac{i}{2\pi} \frac{\partial}{\partial x} \int dp \, e^{ip(x-x')} = -i \, \frac{\partial}{\partial x} \, \delta(x - x') \, .$$

Cambio de bases continuas: el momento en la base de la posición

De modo que, en la base de posiciones,

$$\mathbf{P} = -i \int dx\, dx' \, \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x') \, |\mathbf{x}\rangle \, \langle \mathbf{x}'|$$

Sobre una función, $|\mathbf{f}\rangle$, expandida en la base de posiciones:

$$\begin{aligned}
|\mathbf{P}\,\mathbf{f}\rangle &= \left(-i \int dx\, dx' \, \frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x') \, |\mathbf{x}\rangle \, \langle \mathbf{x}'| \right) \int dy \; f(y) \, |\mathbf{y}\rangle \\
&= -i \int dx\, dx' \left(\frac{\partial}{\partial x} \delta(x - x') \right) f(x') \, |\mathbf{x}\rangle \\
&= i \int dx\, dx' \left(\frac{\partial}{\partial x'} \delta(x - x') \right) f(x') \, |\mathbf{x}\rangle \\
&= -i \int dx\, dx' \; \delta(x - x') \left(\frac{\partial}{\partial x'} f(x') \right) \, |\mathbf{x}\rangle = -i \int dx' \, \frac{\partial}{\partial x'} f(x') \, |\mathbf{x}'\rangle \; ,
\end{aligned}$$

o, equivalentemente, $\langle \mathbf{x}|\mathbf{P}\,\mathbf{f}\rangle = -i \, \partial_x f(x)$.

Relaciones de conmutación

La composición de operadores convierte a $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ en álgebra no conmutativa, $\mathcal{A}(\mathcal{H})$, *i.e.*, en general, $\mathbf{A}\,\mathbf{B} \neq \mathbf{B}\,\mathbf{A}$. Por ejemplo, en la base continua $\{|\mathbf{x}\rangle\}$:

$$\langle x|\,\mathbf{X}\,\mathbf{P}\,|f\rangle = \int dx' \langle x|\,\mathbf{X}\,|x'\rangle\,\langle x'|\,\mathbf{P}\,|f\rangle = -i\int dx'\; x\,\delta(x-x')\,\partial_{x'} f(x')$$

$$\Longrightarrow \qquad \langle x|\,\mathbf{X}\,\mathbf{P}\,|f\rangle = -i\,x\,\partial_x f(x)\;,$$

y por otro lado

$$\langle x|\,\mathbf{P}\,\mathbf{X}\,|f\rangle = \int dx' \langle x|\,\mathbf{P}\,|x'\rangle\,\langle x'|\,\mathbf{X}\,|f\rangle = -i\int dx'\;\partial_x \delta(x-x')\,x'\,f(x')$$

$$= i\int dx'\;\partial_{x'}\delta(x-x')\,x'\,f(x') = -i\int dx'\;\delta(x-x')\,\partial_{x'}(x'\,f(x'))$$

$$= -i\int dx'\;\delta(x-x')\,(f(x') + x'\partial_{x'} f(x')) = -if(x) - ix\,\partial_x f(x)\;.$$

Restando, la relación de conmutación define el álgebra de Heisenberg:

$$[\mathbf{X},\mathbf{P}] = i\,\mathbb{I} \qquad\qquad \mathbb{I}\in\mathcal{A}(\mathcal{H})\;.$$

Relaciones de conmutación

El conmutador $[\mathbf{X}, \mathbf{P}]$ es una relación operatorial independiente de la base.

Podemos generalizar esto a una colección de operadores $\vec{\mathbf{X}} = (\mathbf{X}^1, \mathbf{X}^2, \mathbf{X}^3)$ actuando sobre la base continua de posiciones, $\{|\vec{\mathbf{x}}\rangle\}$, para $L^2(\mathbb{R}^3)$

$$\mathbf{X}^i = \int d^3x\; x^i\, |\vec{x}\rangle\, \langle\vec{x}| \qquad \mathbf{X}^i\, |\vec{\mathbf{x}}\rangle = x^i\, |\vec{\mathbf{x}}\rangle \qquad \langle\vec{\mathbf{x}}|\, \mathbf{X}^i\, |\vec{\mathbf{x}}'\rangle = x^i\, \delta(\vec{x} - \vec{x}')\ .$$

En esta base tenemos que

$$\langle\vec{x}|\mathbf{X}^i\, f\rangle = x^i\, f(\vec{x})\ .$$

Análogamente, para el operador momento en la base $|\vec{p}\rangle$,

$$\mathbf{P}^i = \int d^3p\; p^i\, |\vec{p}\rangle\, \langle\vec{p}| \qquad \mathbf{P}^i\, |\vec{\mathbf{p}}\rangle = p^i\, |\vec{\mathbf{p}}\rangle \qquad \langle\vec{\mathbf{p}}|\, \mathbf{P}^i\, |\vec{\mathbf{p}}'\rangle = p^i\, \delta(\vec{p} - \vec{p}')\ ,$$

y, equivalentemente,

$$\langle\vec{p}\,|\mathbf{P}^i\, f\rangle = p^i\, \tilde{f}(\vec{p})\ .$$

Las relaciones de conmutación involucran operadores en la misma dirección

$$[\mathbf{X}^i, \mathbf{P}^j] = i\, \delta^{ij}\, \mathbb{I}\ .$$

La Representación exponencial

Dado un operador acotado $\mathbf{A} \in \mathcal{A}(\mathcal{H})$, definimos el operador $\mathbf{T} = e^{\mathbf{A}}$ mediante la expansión en serie de Taylor

$$\mathbf{T} = \mathbb{I} + \mathbf{A} + \frac{1}{2}\mathbf{A}^2 + \ldots = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!}\mathbf{A}^k \ .$$

La composición de exponenciales de operadores difiere de la multiplicación de números, a menos que estos conmuten entre sí.

Lema: Sean $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathcal{A}(\mathcal{H})$. Si $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0$, entonces

$$e^{\mathbf{A}}\, e^{\mathbf{B}} = e^{\mathbf{A}+\mathbf{B}} \ .$$

Demostración: Sea la familia uniparamétrica de operadores $\mathbf{F}(t) := e^{t\mathbf{A}}\, e^{t\mathbf{B}}$, $t \in \mathbb{R}$. Tenemos que

$$\frac{d\mathbf{F}(t)}{dt} = \mathbf{A}\, e^{t\mathbf{A}}\, e^{t\mathbf{B}} + e^{t\mathbf{A}}\, \mathbf{B}\, e^{t\mathbf{B}} = (\mathbf{A}+\mathbf{B})\, e^{t\mathbf{A}}\, e^{t\mathbf{B}} = (\mathbf{A}+\mathbf{B})\, \mathbf{F}(t) \ ,$$

$$\Rightarrow \qquad \mathbf{F}(t) = \mathbf{F}(0)\, e^{t(\mathbf{A}+\mathbf{B})} = e^{t(\mathbf{A}+\mathbf{B})} \qquad \Rightarrow \qquad \mathbf{F}(1) = e^{\mathbf{A}+\mathbf{B}} = e^{\mathbf{A}}\, e^{\mathbf{B}} \ .$$

Teorema de Baker-Campbell-Hausdorf

Si $[\mathbf{A},\mathbf{B}] \neq \mathbb{O}$, la situación es más complicada. Sean $\mathbf{A},\mathbf{B} \in \mathcal{A}(\mathcal{H})$, tal que $[\mathbf{A},\mathbf{B}]$ conmuta con $\mathbf{A}$ y con $\mathbf{B}$, entonces:

$$e^{\mathbf{A}}\, e^{\mathbf{B}} = e^{\mathbf{A}+\mathbf{B}}\, e^{\frac{1}{2}\,[\mathbf{A},\mathbf{B}]} \,.$$

Demostración: Tomemos $\mathbf{F}(t) := e^{t\mathbf{A}}\, e^{t\mathbf{B}}$ y derivemos; ahora obtenemos

$$\frac{d\mathbf{F}(t)}{dt} = \mathbf{A}\, e^{t\mathbf{A}}\, e^{t\mathbf{B}} + e^{t\mathbf{A}}\,\mathbf{B}\, e^{t\mathbf{B}} = (\mathbf{A} + e^{t\mathbf{A}}\,\mathbf{B}\, e^{-t\mathbf{A}})\,\mathbf{F}(t) \,.$$

La expansión genérica del segundo término,

$$e^{t\mathbf{A}}\,\mathbf{B}\, e^{-t\mathbf{A}} = \mathbf{B} + t[\mathbf{A},\mathbf{B}] + \frac{t^2}{2}\,[\mathbf{A},[\mathbf{A},\mathbf{B}]] + \ldots + \frac{t^n}{n!}\,\overbrace{[\mathbf{A},[\ldots[\mathbf{A}}^{n},\mathbf{B}]\ldots]] \,,$$

se reduce a las dos primeras contribuciones. Entonces:

$$\frac{d\mathbf{F}(t)}{dt} = (\mathbf{A} + \mathbf{B} + t[\mathbf{A},\mathbf{B}])\,\mathbf{F}(t) \,,$$

$$\Rightarrow \quad \mathbf{F}(t) = \mathbf{F}(0)\, e^{(\mathbf{A}+\mathbf{B})t+\frac{1}{2}[\mathbf{A},\mathbf{B}]t^2} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{F}(1) = e^{\mathbf{A}}\, e^{\mathbf{B}} = e^{\mathbf{A}+\mathbf{B}}\, e^{\frac{1}{2}\,[\mathbf{A},\mathbf{B}]} \,.$$

Operador adjunto

Sea el operador $\mathbf{A} = \lambda \left| \mathbf{v} \right\rangle \left\langle \mathbf{w} \right|$,

$$\mathbf{A} \left| \mathbf{u} \right\rangle = \lambda \left\langle \mathbf{w} | \mathbf{u} \right\rangle \left| \mathbf{v} \right\rangle \qquad \forall \left| \mathbf{u} \right\rangle \in \mathcal{H} \, .$$

Definimos el operador adjunto $\mathbf{A}^\dagger$,

$$\mathbf{A}^\dagger = \left(\lambda \left| \mathbf{v} \right\rangle \left\langle \mathbf{w} \right| \right)^\dagger = \lambda^\star \left| \mathbf{w} \right\rangle \left\langle \mathbf{v} \right| \, ,$$

extendiendo la definición de la manera natural a combinaciones lineales.

La operación involucra el cambio de orden en el producto tensorial, sin el cuál no acabaríamos con un operador, sino con un número $\lambda^\star \left\langle \mathbf{v} | \mathbf{w} \right\rangle$.

Cualquier operador puede desarrollarse en una base $\{ \left| \mathbf{e}_i \right\rangle \}$, recordemos, de dos maneras diferentes:

- la representación natural $\mathbf{A} \to A^i{}_j = \left\langle \mathbf{e}^i \right| \mathbf{A} \left| \mathbf{e}_j \right\rangle$, $\qquad \mathbf{A} = A^i{}_j \left| \mathbf{e}_i \right\rangle \left\langle \mathbf{e}^j \right|$,
- la representación covariante $\mathbf{A} \to A_{ij} = \left\langle \mathbf{e}_i \right| \mathbf{A} \left| \mathbf{e}_j \right\rangle$, $\qquad \mathbf{A} = A_{ij} \left| \mathbf{e}^i \right\rangle \left\langle \mathbf{e}^j \right|$.

La conjugación hermítica es diferente en cada representación.

Conjugación hermítica

El caso más sencillo se presenta con la representación covariante,

$$A^\dagger_{ij} = \langle \mathbf{e}_i | \, \mathbf{A}^\dagger \, | \mathbf{e}_j \rangle = \langle \mathbf{e}_j | \, \mathbf{A} \, | \mathbf{e}_i \rangle^\dagger \equiv \langle \mathbf{e}_j | \, \mathbf{A} \, | \mathbf{e}_i \rangle^\star = A^\star_{ji} \ .$$

La matriz que representa al operador es la matriz adjunta $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}^{t\star}$.

En la representación natural, $\mathbf{A} \to A^i{}_j$, la relación es un poco menos sencilla

$$A^{\dagger i}{}_j = \langle \mathbf{e}^i | \, \mathbf{A}^\dagger \, | \mathbf{e}_j \rangle = \langle \mathbf{e}_j | \, \mathbf{A} \, | \mathbf{e}^i \rangle^\dagger = A^\star{}_j{}^i = (g_{jk} \, A^k{}_l \, g^{li})^\star$$

Es más práctico transformar a la representación covariante,

$$A^i{}_j \quad \to \quad A_{ij} = g_{ik} \, A^k{}_j \ .$$

Si la base utilizada es ortonormal, $g_{ij} = \delta_{ij}$, ambas condiciones son idénticas:

$$(\mathbf{A}^\dagger)^i{}_j = (\mathbf{A}^j{}_i)^\star \ .$$

En ese caso, $\mathbf{A}^\dagger$ se representa con la matriz conjugada y traspuesta de la correspondiente a $\mathbf{A}$.

Operador adjunto y producto escalar

La noción de adjunto está ligada al producto escalar definido sobre $\mathcal{H}$,

$$\left(\mathbf{A}^\dagger\,|\mathbf{w}\rangle, |\mathbf{v}\rangle\right) := (|\mathbf{w}\rangle, \mathbf{A}\,|\mathbf{v}\rangle) \ ,$$

que es equivalente a

$$\langle \mathbf{A}^\dagger\,\mathbf{w}|\mathbf{v}\rangle = \langle \mathbf{w}|\mathbf{A}\,\mathbf{v}\rangle \equiv \langle \mathbf{w}|\,\mathbf{A}\,|\mathbf{v}\rangle \ .$$

De hecho, veamos que la definición dada verifica esta propiedad. Usando

$$\mathbf{A}^\dagger = \left(A^i{}_j\,|\mathbf{e}_i\rangle\,\langle \mathbf{e}^j|\right)^\dagger = A^{i\star}{}_j\,|\mathbf{e}^j\rangle\,\langle \mathbf{e}_i| \ ,$$

en el primer miembro de la ecuación anterior,

$$\langle \mathbf{A}^\dagger\,\mathbf{w}|\mathbf{v}\rangle = \langle \mathbf{v}|\,\mathbf{A}^\dagger\,\mathbf{w}\rangle^\star = \langle \mathbf{v}|\,\mathbf{A}^\dagger\,|\mathbf{w}\rangle^\star = \ (A^{i\star}{}_j)^\star\,\langle \mathbf{v}|\mathbf{e}^j\rangle^\star\,\langle \mathbf{e}_i|\mathbf{w}\rangle^\star$$

$$= \ A^i{}_j\,\langle \mathbf{e}^j|\mathbf{v}\rangle\,\langle \mathbf{w}|\mathbf{e}_i\rangle = \ A^i{}_j\,\langle \mathbf{w}|\mathbf{e}_i\rangle\,\langle \mathbf{e}^j|\mathbf{v}\rangle = \langle \mathbf{w}|\,\mathbf{A}\,\mathbf{v}\rangle \ .$$

En resumen, las reglas del operador adjunto se reducen a:

$$(\lambda)^\dagger = \lambda^\star \qquad |\mathbf{v}\rangle^\dagger = \langle \mathbf{v}| \qquad \langle \mathbf{w}|^\dagger = |\mathbf{w}\rangle \ ,$$

Operador hermítico

además de invertir el orden de los elementos. En particular,

$$\langle \mathbf{A}\,\mathbf{v}| = |\mathbf{A}\,\mathbf{v}\rangle^\dagger := (\mathbf{A}\,|\mathbf{v}\rangle)^\dagger = \langle \mathbf{v}|\,\mathbf{A}^\dagger \ ,$$

todos los miembros de esta igualdad se definen en términos del tercero.

Un operador $\mathbf{A} \in \mathcal{A}(\mathcal{H})$, se dice que es hermítico con respecto al producto escalar $(\,,\,)$ definido en $\mathcal{H}$, si coincide con su adjunto

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger \ .$$

Claramente, un operador hermítico verifica que

$$\langle \mathbf{A}\,\mathbf{w}|\mathbf{v}\rangle = \langle \mathbf{w}|\mathbf{A}\,\mathbf{v}\rangle \qquad\qquad \forall\,|\mathbf{v}\rangle, |\mathbf{w}\rangle \in \mathcal{H} \ .$$

Lo más interesante: esto implica que cualquier elemento de matriz diagonal:

$$\langle \mathbf{v}|\,\mathbf{A}\,\mathbf{v}\rangle^\star = \langle \mathbf{A}\,\mathbf{v}|\mathbf{v}\rangle = \langle \mathbf{v}|\,\mathbf{A}\,\mathbf{v}\rangle \ \in \ \mathbb{R} \qquad\qquad \forall\,|\mathbf{v}\rangle \in \mathcal{H} \ .$$

En Mecánica cuántica estos elementos de matriz tienen la interpretación de valores esperados de operaciones de medida, que deben ser reales.

Un operador antihermítico verifica

$$\mathbf{A}^\dagger = -\mathbf{A} \; .$$

A partir de un operador hermítico, $\mathbf{B} = \mathbf{B}^\dagger$, podemos formar uno antihermítico $\mathbf{A} = i\,\mathbf{B}$, y viceversa: hay una relación unívoca entre ambos conjuntos.

La exponencial un operador (anti)hermítico, $\mathbf{A} := e^{\mathbf{B}}$, $\mathbf{B} = \pm\mathbf{B}^\dagger$, verifica

$$\mathbf{A}^\dagger = \left(e^{\mathbf{B}}\right)^\dagger = \left(\mathbb{I} + \mathbf{B} + \frac{1}{2}\,\mathbf{B}^2 + \ldots\right)^\dagger = \mathbb{I} \pm \mathbf{B} + \frac{1}{2}\,\mathbf{B}^2 + \ldots = e^{\pm\mathbf{B}} \; .$$

- Si $\mathbf{B}$ es hermítico, $\mathbf{A}$ también, $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}$,
- Si $\mathbf{B}$ es antihermítico, $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}^{-1}$.

Un operador $\mathcal{O}$ siempre se puede descomponer en la forma $\mathcal{O} = \mathbf{A} + \mathbf{B}$, donde $\mathbf{A}$ es hermítico y $\mathbf{B}$ es antihermítico. De hecho:

$$\mathcal{O} = \frac{\mathcal{O} + \mathcal{O}^\dagger}{2} + \frac{\mathcal{O} - \mathcal{O}^\dagger}{2} := \mathbf{A} + \mathbf{B} \; .$$

Operador unitario

Dado un operador lineal $\mathbf{A} \in \mathcal{A}(V)$, el operador inverso se define mediante

$$\mathbf{A}^{-1}\,\mathbf{A} = \mathbf{A}\,\mathbf{A}^{-1} = \mathbb{I}\,.$$

Un operador invertible, $\mathbf{U}$, se dice que es unitario con respecto a $(,)$ en $\mathcal{H}$, si $\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^{-1}$. Es una biyección lineal, $\mathbf{U}\colon \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ que conserva $(,)$:

$$\langle \mathbf{U}\,\mathbf{v} | \mathbf{U}\,\mathbf{w} \rangle = \langle \mathbf{v} | \mathbf{w} \rangle \qquad\qquad \forall\,|\mathbf{v}\rangle, |\mathbf{w}\rangle \in \mathcal{H}\,.$$

En efecto,

$$\langle \mathbf{U}\,\mathbf{v} | \mathbf{U}\,\mathbf{w} \rangle = \langle \mathbf{v} |\, \mathbf{U}^\dagger\, \mathbf{U}\,\mathbf{w} \rangle = \langle \mathbf{v} | \mathbf{w} \rangle\,.$$

$\mathbf{U}$ deja invariante a la matriz de productos escalares (con respecto a la cuál $\mathbf{U}^\dagger$ es el conjugado hermítico de $\mathbf{U}$),

$$g'_{ij} = \langle \mathbf{e}'_i | \mathbf{e}'_j \rangle = \langle \mathbf{U}\,\mathbf{e}_i | \mathbf{U}\,\mathbf{e}_j \rangle = \langle \mathbf{e}_i | \mathbf{e}_j \rangle = g_{ij}\,.$$

En particular, transforma toda base ortonormal de $\mathcal{H}$ en otra. Un operador unitario es *isométrico*: $\|\mathbf{U}\,|\mathbf{v}\rangle\| = \||\mathbf{v}\rangle\|$, $\forall\,|\mathbf{v}\rangle \in \mathcal{H}$ (norma invariante).

Operador unitario

Dada una base $\{|\mathbf{e}_i\rangle\}$, la forma de $\mathbf{U}$ en la representación natural es:

$$g'_{ij} = \langle \mathbf{U}\,\mathbf{e}_i | \mathbf{U}\,\mathbf{e}_j \rangle = \langle U^k{}_i\,\mathbf{e}_k | U^l{}_j\,\mathbf{e}_l \rangle = U^{k\star}{}_i\,\langle \mathbf{e}_k | \mathbf{e}_l \rangle\,U^l{}_j = U^{k\star}{}_i\,g_{kl}\,U^l{}_j = g_{ij}\ .$$

En notación matricial,

$$\mathbf{U}^\dagger\,\mathbf{g}\,\mathbf{U} = \mathbf{g}\ .$$

En una base ortonormal $g_{ij} = \delta_{ij}$ y la ecuación anterior se reduce a

$$\mathbf{U}^\dagger\,\mathbf{U} = \mathbb{I}\ .$$

Una matriz que represente a $\mathbf{U}$ tiene un determinante de modulo uno. Para verlo, basta tomar determinantes y recordar que $\det\,\mathbf{U}^t = \det\,\mathbf{U}$,

$$\det(\mathbf{U}^{t\star}\,\mathbf{g}\,\mathbf{U}) = (\det\,\mathbf{U})^\star\,\det\,\mathbf{g}\,\det\,\mathbf{U} = |\det\,\mathbf{U}|^2\,\det\,\mathbf{g} = \det\,\mathbf{g}\ ,$$

$$\Longrightarrow \qquad |\det\,\mathbf{U}|^2 = 1 \quad \Longleftrightarrow \quad \det\,\mathbf{U} = e^{i\theta} \quad \theta \in [0, 2\pi)\ .$$

La representación covariante $\mathbf{U} \to U_{ij}$ es más sencilla, ya que $\mathbf{U}^\dagger \to U^\dagger_{ij} = U^\star_{ji}$ y $\mathbf{U}^{-1} \to U^{-1}_{ij} \implies U^\dagger_{ij} = U^{-1}_{ij}$.

Proyector

Recordemos que si $V = V_1 \vec{\oplus} V_2$, entonces existe una única descomposición $|\mathbf{v}\rangle = |\mathbf{v}_1\rangle + |\mathbf{v}_2\rangle$, $\forall\, |\mathbf{v}\rangle \in V$, con $|\mathbf{v}_j\rangle \in V_j$.

La aplicación lineal $\mathcal{P}_{V_j} : |\mathbf{v}\rangle \to |\mathbf{v}_j\rangle$, se llama proyector de V sobre V_j.

Proposición: $\mathcal{P}_{V_j}$ es proyector sobre $V_j \subset V$ $\Leftrightarrow$ es idempotente: ${\mathcal{P}_{V_j}}^2 = \mathcal{P}_{V_j}$.

Demostración:

$\Rightarrow$ Es evidente.

$\Leftarrow$ Dado $\mathcal{P}_{V_j}$ idempotente, definamos las imágenes

$$V_j := \mathrm{Im}(\mathcal{P}_{V_j}) \qquad\qquad V_j^\perp := \mathrm{Im}(\mathbb{I} - \mathcal{P}_{V_j})\ .$$

Entonces, $\forall\, |\mathbf{v}\rangle \in V$,

$$|\mathbf{v}\rangle = \mathcal{P}_{V_j}\,|\mathbf{v}\rangle + (\mathbb{I} - \mathcal{P}_{V_j})\,|\mathbf{v}\rangle = |\mathbf{v}_j\rangle + |\mathbf{v}_j^\perp\rangle\ ,$$

con $|\mathbf{v}_j\rangle \in V_j$ y $|\mathbf{v}_j^\perp\rangle \in V_j^\perp$. Además, $\mathcal{P}_{V_j}\,|\mathbf{v}\rangle = |\mathbf{v}_j\rangle$ y $(\mathbb{I} - \mathcal{P}_{V_j})\,|\mathbf{v}\rangle = |\mathbf{v}_j^\perp\rangle$.

Proyector ortogonal

Si, además, $V = \mathcal{H}$, y $V_1 \perp V_2$ con respecto a $(,)$, lo especificamos diciendo que $V = V_1 \oplus V_2$.

Si $\mathcal{P}_{V_1} : |\mathbf{v}\rangle \in V \to |\mathbf{v}_1\rangle \in V_1$ es un proyector tal que $V = V_1 \oplus V_2$ (es decir $V_1 \perp V_2$, decimos que $\mathcal{P}_{V_1}$ es un proyector ortogonal sobre V_1.

Los proyectores ortogonales son una especialización de los generales.

Proposición: Un operador $\mathcal{P}$ es proyector ortogonal sobre $M \in \mathcal{H}$ si y sólo si es idempotente y hermítico ($\mathcal{P}^2 = \mathcal{P} = \mathcal{P}^\dagger$).

Demostración: La idempotencia es resultado de la condición de proyector: sólo nos ocuparemos de demostrar que ortogonalidad $\iff$ $\mathcal{P} = \mathcal{P}^\dagger$.

$\Rightarrow$ Si $\mathcal{P}$ es un proyector ortogonal sobre M, entonces $\forall\, |\mathbf{v}\rangle, |\mathbf{w}\rangle \in \mathcal{H}$ tenemos que $|\mathbf{v}\rangle = |\mathbf{v}_1\rangle + |\mathbf{v}_2\rangle$ y $|\mathbf{w}\rangle = |\mathbf{w}_1\rangle + |\mathbf{w}_2\rangle$ son descomposiciones únicas donde $\{\mathcal{P}\,|\mathbf{v}\rangle = |\mathbf{v}_1\rangle, \mathcal{P}\,|\mathbf{w}\rangle = |\mathbf{w}_1\rangle\} \in M \perp \{|\mathbf{v}_2\rangle, |\mathbf{w}_2\rangle\} \in M^\perp$. Por lo tanto

$$(|\mathbf{v}\rangle, \mathcal{P}|\mathbf{w}\rangle) = (|\mathbf{v}_1\rangle + |\mathbf{v}_2\rangle, |\mathbf{w}_1\rangle) = (|\mathbf{v}_1\rangle, |\mathbf{w}_1\rangle) = (|\mathbf{v}_1\rangle, |\mathbf{w}_1\rangle + |\mathbf{w}_2\rangle) = (\mathcal{P}|\mathbf{v}\rangle, |\mathbf{w}\rangle)\,,$$

de donde se deduce que $\mathcal{P} = \mathcal{P}^\dagger$.

Representación de un proyector

$\Leftarrow$ Si $\mathcal{P} = \mathcal{P}^2 = \mathcal{P}^\dagger$, la descomposición $|\mathbf{v}\rangle = \mathcal{P}\,|\mathbf{v}\rangle + (\mathbb{I} - \mathcal{P})\,|\mathbf{v}\rangle$ es ortogonal:

$$(\mathcal{P}\,|\mathbf{v}\rangle, (\mathbb{I} - \mathcal{P})\,|\mathbf{w}\rangle) = (|\mathbf{v}\rangle, \mathcal{P}^\dagger\,(\mathbb{I} - \mathcal{P})\,|\mathbf{w}\rangle) = (|\mathbf{v}\rangle, \mathcal{P}\,(\mathbb{I} - \mathcal{P})\,|\mathbf{w}\rangle) = 0\ .$$

Sean $\{|\mathbf{e}_A\rangle\}_{A\in\mathcal{I}}$ una base de $\mathcal{H}$, $\mathcal{I}_1$ e $\mathcal{I}_2$ dos conjuntos complementarios de índices, $\mathcal{I} = \mathcal{I}_1 \cup \mathcal{I}_2$.

Cada subconjunto de vectores $\{|\mathbf{e}_{(k)\,i}\rangle\}_{i\in\mathcal{I}_k}$ genera un subespacio $M_k \subset \mathcal{H}$ $k = 1, 2$, con $\mathcal{H} = M_1 \vec{\oplus} M_2$. Entonces, representamos a los proyectores $\mathcal{P}_{M_k}$:

$$\mathcal{P}_{M_k} = \sum_{i\in\mathcal{I}_k} |\mathbf{e}_{(k)\,i}\rangle\langle\mathbf{e}^i_{(k)}| \qquad\qquad {\mathcal{P}_{M_k}}^2 = \mathcal{P}_{M_k} \qquad \mathcal{P}_{M_2} = \mathbb{I} - \mathcal{P}_{M_1}\,.$$

Si $\{|\mathbf{e}_A\rangle\}_{A\in\mathcal{I}}$ es ortonormal, entonces $\mathcal{P}_{M_k}$ son proyectores ortogonales:

$$\langle\mathcal{P}_{M_1}\,\mathbf{v}|\mathcal{P}_{M_2}\,\mathbf{w}\rangle = \langle\mathbf{v}|\,{\mathcal{P}_{M_1}}^\dagger\,\mathcal{P}_{M_2}\,|\mathbf{w}\rangle = \sum_{i\in\mathcal{I}_1}\sum_{j\in\mathcal{I}_2}\langle\mathbf{v}|\mathbf{e}^i_{(1)}\rangle\langle\mathbf{e}_{(1)\,i}|\mathbf{e}_{(2)\,j}\rangle\langle\mathbf{e}^j_{(2)}|\mathbf{w}\rangle = 0\ ,$$

que puede verse del hecho de que $\mathcal{P}_{M_k}$ son hermíticos,

$$\mathcal{P}_{M_k} = \sum_{i\in\mathcal{I}_k} |\mathbf{e}_{(k)\,i}\rangle\langle\mathbf{e}^i_{(k)}| = \sum_{i\in\mathcal{I}_1} |\mathbf{e}^i_{(k)}\rangle\langle\mathbf{e}_{(k)\,i}| = {\mathcal{P}_{M_k}}^\dagger\ .$$

$|\mathbf{v}\rangle$ es un vector propio de un operador lineal $\mathbf{A}$, con valor propio $\lambda \in \mathbb{C}$ si

$$\mathbf{A}\,|\mathbf{v}\rangle = \lambda\,|\mathbf{v}\rangle \ .$$

El conjunto $\{\lambda\} \in \mathbb{C}$ de todos los valores propios se denomina espectro.

Un valor propio λ_r es g_r veces degenerado si es posible encontrar g_r vectores propios linealmente independientes, $\{|\mathbf{v}_i\rangle\}_{i=1,\ldots,g_r}$.

En este caso, los vectores $\{|\mathbf{v}_i\rangle\}$ generan un subespacio vectorial $V_\lambda \subset V$ de dimensión g_r. En efecto, un vector $|\mathbf{v}\rangle \in V_\lambda$,

$$\mathbf{A}\,|\mathbf{v}\rangle = \mathbf{A}\left(\sum_{i=1}^{g_r} c^i\,|\mathbf{v}_i\rangle\right) = \sum_{i=1}^{g_r} c^i\,\mathbf{A}\,|\mathbf{v}_i\rangle = \lambda_r \sum_{i=1}^{g_r} c^i\,|\mathbf{v}_i\rangle = \lambda_r\,|\mathbf{v}\rangle \ .$$

Es frecuente utilizar la notación

$$V_\lambda = \mathrm{Ker}\,(\mathbf{A} - \lambda\,\mathbb{I}) \ ,$$

es decir, $|\mathbf{v}\rangle \in V_\lambda \quad \Longleftrightarrow \quad |\mathbf{v}\rangle \in V$ y $(\mathbf{A} - \lambda\,\mathbb{I})\,|\mathbf{v}\rangle = |\mathbf{0}\rangle$.

Supongamos que $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$ es un operador hermítico. Entonces:

(i) Los valores propios son reales.

Si $|\mathbf{v}\rangle$ es vector propio (normalizado: $\langle \mathbf{v}|\mathbf{v}\rangle = 1$) con autovalor λ,

$$\lambda = \lambda \langle \mathbf{v}|\mathbf{v}\rangle = \langle \mathbf{v}| \mathbf{A} |\mathbf{v}\rangle = \langle \mathbf{v}| \mathbf{A}^\dagger |\mathbf{v}\rangle^\star = \langle \mathbf{v}| \mathbf{A} |\mathbf{v}\rangle^\star = (\lambda \langle \mathbf{v}|\mathbf{v}\rangle)^\star = \lambda^\star \ ,$$

por lo tanto, $\lambda \in \mathbb{R}$.

(ii) Dos vectores propios de $\mathbf{A}$, $|\mathbf{v}_1\rangle$ y $|\mathbf{v}_2\rangle$, asociados a autovalores diferentes, $\lambda_1 \neq \lambda_2$, son ortogonales:

$$0 = \langle \mathbf{v}_1| (\mathbf{A} - \mathbf{A}) |\mathbf{v}_2\rangle = \langle \mathbf{v}_1| \mathbf{A} |\mathbf{v}_2\rangle - \langle \mathbf{v}_2| \mathbf{A} |\mathbf{v}_1\rangle^\star = (\lambda_2 - \lambda_1) \langle \mathbf{v}_1|\mathbf{v}_2\rangle \ ,$$

por lo que, si $\lambda_1 \neq \lambda_2$, necesariamente $|\mathbf{v}_1\rangle \perp |\mathbf{v}_2\rangle$.

Si el espectro de un operador $\mathbf{A}$ está dado por un conjunto de autovalores no degenerados, $\{\lambda_n\}_{n=1,2,\dots}$, entonces podemos normalizar sus autovectores:

$$\langle \mathbf{v}_n|\mathbf{v}_m\rangle = \delta_{nm} \ .$$

Observables

Si algún autovalor, λ_n, es g_n veces degenerado,

$$\mathbf{A}\,|\mathbf{v}_n^i\rangle = \lambda_n\,|\mathbf{v}_n^i\rangle \qquad i = 1,\ldots,g_n \qquad\qquad \langle\mathbf{v}_n^i|\mathbf{v}_m^j\rangle = \delta_{nm}\,\delta_{ij}\ ,$$

pudiendo ortonormalizar dentro del subespacio propio $V_{\lambda_n} \subset V$.

El operador hermítico **A** es un observable, si el conjunto de vectores propios forma una base de $\mathcal{H}$. Esta condición equivale a la relación de cierre,

$$\mathbb{I} \;=\; \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |\mathbf{v}_n^i\rangle\,\langle\mathbf{v}_n^i|\ .$$

Si los autovectores $|\mathbf{v}_n^i\rangle$ forman una base ortonormal del subespacio propio V_{λ_n}, podemos escribir el proyector sobre dicho subespacio, $\mathcal{P}_n$, en la forma

$$\mathcal{P}_n \;=\; \sum_{i=1}^{g_n} |\mathbf{v}_n^i\rangle\,\langle\mathbf{v}_n^i|\ .$$

Debido a la ortogonalidad es inmediato comprobar que ${\mathcal{P}_n}^2 = \mathcal{P}_n$.

Resolución espectral

Si $\{\lambda_n\}_{n=1,2,\ldots}$ forma el espectro de un observable $\mathbf{A}$, podemos representar dicho operador en la forma conocida como resolución espectral,

$$\mathbf{A} = \sum_n \lambda_n \mathcal{P}_n = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \lambda_n \left|\mathbf{v}_n^i\right\rangle \left\langle\mathbf{v}_n^i\right| \, .$$

En general, el espectro de un operador $\mathbf{A}$ se divide en una parte discreta

$$\mathbf{A}\left|\mathbf{v}_n^i\right\rangle = \lambda_n \left|\mathbf{v}_n^i\right\rangle \qquad n = 1, 2, \ldots \quad i = 1, 2, 3, \ldots, g_n$$

y una parte continua

$$\mathbf{A}\left|\mathbf{v}_\nu\right\rangle = \lambda(\nu)\left|\mathbf{v}_\nu\right\rangle \qquad \nu_1 \leq \nu \leq \nu_2 \, ,$$

que pueden tomarse ortonormales

$$\left\langle\mathbf{v}_n^i|\mathbf{v}_m^j\right\rangle = \delta_{nm}\,\delta_{ij} \qquad \left\langle\mathbf{v}_\nu|\mathbf{v}_{\nu'}\right\rangle = \delta(\nu - \nu') \qquad \left\langle\mathbf{v}_n^i|\mathbf{v}_\nu\right\rangle = 0 \, .$$

$\mathbf{A}$ es un observable si forma una base ortonormal de todo $\mathcal{H}$.

Resolución espectral

Entonces, tenemos la relación de cierre

$$\mathbb{I} = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |\mathbf{v}_n^i\rangle \langle \mathbf{v}_n^i| + \int d\nu \, |\mathbf{v}_\nu\rangle \langle \mathbf{v}_\nu| \, .$$

El operador **A** puede escribirse como

$$\mathbf{A} = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \lambda_n \, |\mathbf{v}_n^i\rangle \langle \mathbf{v}_n^i| + \int d\nu \, \lambda(\nu) \, |\mathbf{v}_\nu\rangle \langle \mathbf{v}_\nu| \, .$$

Un proyector hermítico sobre $M \subset \mathcal{H}$, $\mathcal{P}_M$, es ortogonal. Sus autovalores son $\lambda_v = 1$, $\forall \, |\mathbf{v}\rangle \in M$, y $\lambda_w = 0$, $\forall \, |\mathbf{w}\rangle \in M^\perp$ ($\langle \mathbf{w}|\mathbf{v}\rangle = 0$),

$$\mathcal{P}_M \, |\mathbf{v}\rangle = |\mathbf{v}\rangle \qquad\qquad \mathcal{P}_M \, |\mathbf{w}\rangle = 0 \, .$$

Por lo tanto, la resolución espectral de $\mathcal{P}_M$ es, precisamente,

$$\mathcal{P}_M = \sum_{i=1}^{g_n} |\mathbf{v}_i\rangle \langle \mathbf{v}_i| \, .$$

Espectro de operadores unitarios y valor esperado

Si $|\mathbf{v}\rangle$ es autovector de $\mathbf{U}$, entonces

$$\| |\mathbf{v}\rangle \| = \| \mathbf{U} |\mathbf{v}\rangle \| = \| \lambda |\mathbf{v}\rangle \| = |\lambda| \, \| |\mathbf{v}\rangle \| \ .$$

Los autovalores de un operador unitario, entonces, tienen la forma

$$|\lambda| = 1 \qquad \Longrightarrow \qquad \lambda = e^{i\alpha} \ .$$

Sea $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$. Se define el valor esperado de $\mathbf{A}$ en un estado $|\mathbf{v}\rangle \in \mathcal{H}$:

$$\langle \mathbf{A} \rangle_{|\mathbf{v}\rangle} := \frac{\langle \mathbf{v} | \mathbf{A} | \mathbf{v} \rangle}{\langle \mathbf{v} | \mathbf{v} \rangle} \qquad |\mathbf{0}\rangle \neq |\mathbf{v}\rangle \in \mathcal{H} \ .$$

- $\langle \mathbf{A} \rangle_{|\mathbf{v}\rangle}$ es una función real de $|\mathbf{v}\rangle$,
- $\langle \mathbf{A} \rangle_{\alpha|\mathbf{v}\rangle} = \langle \mathbf{A} \rangle_{|\mathbf{v}\rangle}$.

Por lo tanto, el valor esperado puede considerarse en $\{ |\mathbf{v}\rangle \in \mathcal{H} : \ \| |\mathbf{v}\rangle \| = 1 \}$.

Teorema: propiedad variacional del espectro de un operador hermítico

Sea $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$ un operador lineal hermítico sobre $\mathcal{H}$ complejo y $|\mathbf{v}_0\rangle$ un vector propio de $\mathbf{A}$ con autovalor λ_0. Entonces, $\langle \mathbf{A} \rangle_{|\mathbf{v}\rangle}$ como función de $|\mathbf{v}\rangle$ tiene valor estacionario en $|\mathbf{v}_0\rangle$, y en ese punto $\langle \mathbf{A} \rangle_{|\mathbf{v}_0\rangle} = \lambda_0$.

Demostración: Sea $\{|\mathbf{e}_j\rangle\}_1^\infty$ una base ortogonal numerable. Consideremos $\langle \mathbf{A} \rangle_{|\mathbf{v}\rangle}$ como función de las componentes de $|\mathbf{v}\rangle$ en dicha base. Por un lado,

$$\frac{\partial}{\partial v_j} \langle \mathbf{v} | \, \mathbf{A} \, | \mathbf{v} \rangle = \frac{\partial}{\partial v_j} (v_l \, A^l{}_k \, v^k) = \frac{\partial v_l}{\partial v_j} A^l{}_k \, v^k + v_l \, A^{lk} \, \frac{\partial v_k^\star}{\partial v_j} = A^j{}_k v^k \; ,$$

donde utilizamos $\frac{\partial z^*}{\partial z} = 0$: el teorema sólo es válido si $\mathcal{H}$ es complejo.

$$\frac{\partial}{\partial v_j} \langle \mathbf{v} | \mathbf{v} \rangle = \frac{\partial v_i}{\partial v_j} \, v^i + v^{\star i} \, \frac{\partial v_i^\star}{\partial v_j} = v^j \; .$$

Luego, $\langle \mathbf{A} \rangle_{|\mathbf{v}\rangle}$ como función de $|\mathbf{v}\rangle$ tiene valor estacionario en un vector $|\mathbf{v}_0\rangle$,

$$\left. \frac{\partial}{\partial v_j} \langle \mathbf{A} \rangle_{|\mathbf{v}\rangle} \right|_{|\mathbf{v}_0\rangle} = \frac{A^j{}_k \, v_0^k \, \langle \mathbf{v}_0 | \mathbf{v}_0 \rangle - \langle \mathbf{v}_0 | \, \mathbf{A} \, | \mathbf{v}_0 \rangle \, v_0^j}{\langle \mathbf{v}_0 | \mathbf{v}_0 \rangle^2} = 0 \quad \Leftrightarrow \quad A^j{}_k \, v_0^k = \langle \mathbf{A} \rangle_{|\mathbf{v}_0\rangle} \, v_0^j \; ,$$

que es la ecuación de autovalores con $|\mathbf{v}\rangle = |\mathbf{v}_0\rangle$ y $\lambda_0 = \langle \mathbf{A} \rangle_{|\mathbf{v}_0\rangle}$.

Diagonalización de un operador hermítico

Sea $\{|\mathbf{e}_i\rangle\}$ una base ortonormal y $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger$, cuya representación en dicha base viene dada por la matriz $A^i{}_j = A^{j\star}_{\ i}$.

En la base normalizada $\{|\mathbf{v}_m\rangle\}$ de autovectores de $\mathbf{A}$, éste se representa con la matriz diagonal $A^m{}_n = \lambda_m \, \delta^m{}_n$.

$\{|\mathbf{v}_m\rangle\}$ puede tomarse como una base ortonormal por lo que $|\mathbf{v}_m\rangle = \mathbf{U}\,|\mathbf{e}_i\rangle$.

Otra manera de ver que el cambio de base es unitario es escribir

$$(U^{-1})^m{}_i \, A^i{}_j \, U^j{}_n = \lambda_n \, \delta^m{}_n \ .$$

Tomando la conjugación hermítica de las matrices y teniendo en cuenta que $A^i{}_j = (A^\dagger)^i{}_j$ y que $\lambda_n = \lambda_n{}^\star$, obtenemos que

$$(U^{-1})^m{}_i = (U^\dagger)^m{}_i \ ,$$

por lo que el cambio de base se efectúa mediante una matriz unitaria.

Veamos que dos operadores hermíticos que conmutan, son diagonalizables de forma simultánea en alguna base.

Diagonalización simultánea de dos operadores que conmutan

Lema: Sean $\mathbf{T}$ y $\mathbf{S}$ operadores que conmutan. Si $|\mathbf{v}\rangle$ es vector propio de $\mathbf{T}$, $\mathbf{S}\,|\mathbf{v}\rangle$ también es autovector de $\mathbf{T}$ con idéntico autovalor.

Demostración: Si $\mathbf{T}\,|\mathbf{v}\rangle = \lambda\,|\mathbf{v}\rangle$, aplicando $\mathbf{S}$ por la izquierda,

$$\mathbf{S}\,\mathbf{T}\,|\mathbf{v}\rangle = \mathbf{S}\,\lambda\,|\mathbf{v}\rangle\ .$$

Como $[\mathbf{S},\mathbf{T}] = 0$, llegamos a que $\mathbf{T}\,(\mathbf{S}\,|\mathbf{v}\rangle) = \lambda\,(\mathbf{S}\,|\mathbf{v}\rangle)$.

Pueden darse dos situaciones:

- Si λ es no degenerado, $\mathbf{S}\,|\mathbf{v}\rangle$ y $|\mathbf{v}\rangle$ son necesariamente colineales.
- Si λ es degenerado, entonces $\mathbf{S}\,|\mathbf{v}\rangle \in V_\lambda$, al igual que $|\mathbf{v}\rangle$.

En resumen, si $\mathbf{T}$ y $\mathbf{S}$ conmutan, todo subespacio propio de $\mathbf{T}$ es globalmente invariante bajo la acción de $\mathbf{S}$.

Corolario: Si $\mathbf{T}$ y $\mathbf{S}$ conmutan, $\mathbf{T}$ es hermítico y $|\mathbf{v}_1\rangle$ y $|\mathbf{v}_2\rangle$ son autovectores de $\mathbf{T}$ con valores propios $\lambda_1 \neq \lambda_2$, entonces $\langle\mathbf{v}_1|\,\mathbf{S}\,|\mathbf{v}_2\rangle = 0$.

Diagonalización simultánea de dos operadores que conmutan

Demostración: Si $|\mathbf{v}_2\rangle$ es autovector de $\mathbf{T}$ con autovalor λ_2, también lo es $\mathbf{S}\,|\mathbf{v}_2\rangle$ con idéntico autovalor. Por lo tanto, es ortogonal a $|\mathbf{v}_1\rangle$.

Teorema: Si dos observables $\mathbf{T}$ y $\mathbf{S}$ conmutan, podemos construir una base ortonormal de $\mathcal{H}$, constituida por vectores propios comunes a $\mathbf{S}$ y a $\mathbf{T}$.

Demostración: Consideremos por simplicidad un espectro discreto. Por ser $\mathbf{T}$ hermítico, admite una base ortonormal $\{|\mathbf{e}_n^i\rangle\}$ de vectores propios, con autovalores $\lambda_n \in \mathbb{R}$, $i = 1, 2, \ldots, d_n$, siendo d_n la degeneración de λ_n.

Si los ordenamos, $\{|\mathbf{e}_1^1\rangle, \ldots, |\mathbf{e}_1^{d_1}\rangle\}; \{|\mathbf{e}_2^1\rangle, \ldots, |\mathbf{e}_2^{d_2}\rangle\}; \{|\mathbf{e}_3^1\rangle, \ldots, |\mathbf{e}_3^{d_3}\rangle\}, \ldots$, la matriz que representa a $\mathbf{S}$ en esta base es diagonal en bloques cuadrados de dimensión $d_n \times d_n$, que denominaremos $\mathbf{S}^{(n)}$.

Cada bloque da la acción de $\mathbf{S}$ sobre $\mathcal{H}_{\lambda_n}$, con elementos $S_{ij}^{(n)} = \langle \mathbf{e}_n^i|\,\mathbf{S}\,|\mathbf{e}_n^j\rangle$.

El hecho de que fuera de estos bloques, todos los elementos de matriz de $\mathbf{S}$ sean nulos se desprende del lema anterior,

$$\langle \mathbf{e}_n^i|\,\mathbf{S}\,|\mathbf{e}_m^j\rangle = 0 \qquad n \neq m\,.$$

Diagonalización simultánea de dos operadores que conmutan

Ahora, dos situaciones pueden darse:

- Si λ_n es no degenerado, entonces $d_n = 1$ y $|\mathbf{e}_n^1\rangle$ es automáticamente autovector de **S** también.
- Si λ_n es degenerado, $d_n > 1$, el bloque $S_{ij}^{(n)}$ no es en general diagonal.

  Sin embargo, restringido a $\mathcal{H}_{\lambda_n}$, **T** es proporcional al operador identidad, $T_{ij}^{(n)} = \lambda_n \, \delta_{ij}$.

  En consecuencia, la elección de base ortonormal de $\mathcal{H}_{\lambda_n}$ es arbitraria e inocua para la forma de **T** en $\mathcal{H}_{\lambda_n}$.

  Aunque no sea diagonal, la matriz **S** es hermítica, $S_{ij}^{(n)} = S_{ji}^{(n)\star}$.

  Podemos efectuar dentro de $\mathcal{H}_{\lambda_n}$ un cambio de base que diagonalice la submatriz S_{ij}^{n}, mediante $|\mathbf{e'}_n^i\rangle = \mathbf{U}\,|\mathbf{e}_n^i\rangle$.

  Una vez hecho esto, en cada $\mathcal{H}_{\lambda_n}$ tenemos una base que diagonaliza simultáneamente a los operadores **T** y **S** en $\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\lambda_1} \oplus \ldots \oplus \mathcal{H}_{\lambda_m}$.

Postulados de la medida en la mecánica cuántica

Primer postulado: En un instante fijo t_0, el estado de un sistema físico está descrito por un vector, $|\psi\rangle$, unitario, $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, perteneciente al espacio de Hilbert de estados $\mathcal{H}$.

Segundo postulado: toda magnitud física medible, está dada por un operador observable (hermítico) **A**.

Tercer postulado: Los resultados de una medición dan como resultado uno de los valores propios, λ_n, de **A**.

Cuarto postulado: La probabilidad de obtener λ_n en una medición es

$$\mathfrak{p}_\psi(\lambda_n) = |\langle \mathbf{u}_n|\psi\rangle|^2 \ ,$$

si λ_n es no degenerado; $|\mathbf{u}_n\rangle$ es el autovector asociado.

Si λ_n es d_n veces degenerado y $|\mathbf{u}_n^i\rangle$ es una base ortonormal de V_{λ_n},

$$\mathfrak{p}_\psi(\lambda_n) = \sum_{i=1}^{d_n} |\langle \mathbf{u}_n^i|\psi\rangle|^2 \ .$$

Colapso de la función de onda

Es más elegante utilizar el operador de proyección

$$\mathcal{P}_n = \sum_{i=1}^{g_n} |\mathbf{u}_n^i\rangle\langle\mathbf{u}_n^i| \ ,$$

para reescribir la probabilidad de obtener λ_n en una medición como

$$\mathfrak{p}_\psi(\lambda_n) = \langle\psi|\, \mathcal{P}_n \,|\psi\rangle = \|\mathcal{P}_n \,|\psi\rangle\|^2 \ .$$

Quinto postulado: (colapso de la función de onda) si el resultado de una medida ha sido λ_n, el estado del sistema inmediatamente después de la medición viene dado por $|\psi_n\rangle \in \mathcal{H}$,

$$|\psi\rangle \qquad \xrightarrow{\lambda_n} \qquad |\psi_n\rangle := \frac{\mathcal{P}_n \,|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\, \mathcal{P}_n \,|\psi\rangle}} \ ,$$

donde explícitamente hemos normalizado $\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1$ (teoría unitaria).

Valor medio y probabilidades

Sea $\{\lambda_n\}$ el espectro de posibles medidas del observable $\mathbf{A}$. Si en el instante t_0 sabemos con certeza que el estado del sistema es $|\psi\rangle$, el valor medio de un *ensamble de medidas* viene dado por

$$\langle \mathbf{A} \rangle_\psi = \sum_n \lambda_n \, \mathfrak{p}_\psi(\lambda_n) = \sum_n \lambda_n \langle\psi| \mathcal{P}_n |\psi\rangle = \langle\psi| \sum_n \lambda_n \mathcal{P}_n |\psi\rangle = \langle\psi| \mathbf{A} |\psi\rangle \, .$$

Tomemos un par de estados $|\psi_1\rangle$ y $|\psi_2\rangle$, unitarios y ortogonales,

$$\langle\psi_1|\psi_1\rangle = \langle\psi_2|\psi_2\rangle = 1 \qquad \langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0 \, .$$

La probabilidad de medir un autovalor λ_n de $\mathbf{A}$ en cualquiera de ellos es

$$\mathfrak{p}_{\psi_i}(\lambda_n) = |\langle \mathbf{u}_n|\psi_i\rangle|^2 \, .$$

Las cantidades $\langle \mathbf{u}_n|\psi\rangle$ son números complejos denominadas amplitudes de probabilidad. Es importante la distinción entre éstas y las probabilidades.

Supongamos que el sistema se encuentra, con absoluta certeza, en una superposición de los dos estados anteriores, $|\psi\rangle = \alpha_1 |\psi_1\rangle + \alpha_2 |\psi_2\rangle$.

Estados puros y mezcla estadística

La probabilidad de encontrar λ_n como resultado de medir $\mathbf{A}$ viene dada por

$$\mathfrak{p}_\psi(\lambda_n) = |\langle \mathbf{u}_n|\psi\rangle|^2 = \langle \alpha_1\,\psi_1 + \alpha_2\,\psi_2|\mathbf{u}_n\rangle\;\langle \mathbf{u}_n|\alpha_1\,\psi_1 + \alpha_2\,\psi_2\rangle$$

$$= |\alpha_1|^2\,|\langle \mathbf{u}_n|\psi_1\rangle|^2 + |\alpha_2|^2\,|\langle \mathbf{u}_n|\psi_2\rangle|^2 + 2\,\mathrm{Re}\,\left[(\alpha_1\,\alpha_2^\star)\,\langle \mathbf{u}_n|\psi_1\rangle\,\langle \mathbf{u}_n|\psi_2^\star\rangle\right].$$

El último sumando es denominado término de interferencia y es característico de una superposición coherente.

Esto es muy diferente de una mezcla estadística: si $|\psi\rangle$ lo fuese de $|\psi_1\rangle$ y $|\psi_2\rangle$ con pesos $|\alpha_1|^2$ y $|\alpha_2|^2$, esperaríamos la suma ponderada de probabilidades

$$\mathfrak{p}_\psi(\lambda_n) = |\alpha_1|^2\,\mathfrak{p}_{\psi_1}(\lambda_n) + |\alpha_2|^2\,\mathfrak{p}_{\psi_2}(\lambda_n) = |\alpha_1|^2\,|\langle \mathbf{u}_n|\psi_1\rangle|^2 + |\alpha_2|^2\,|\langle \mathbf{u}_n|\psi_2\rangle|^2\,.$$

En el razonamiento anterior partimos de un estado del sistema representado por un cierto vector $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ *con certeza absoluta*. Esto equivale a $\mathfrak{p}(|\psi\rangle) = 1$ y $\mathfrak{p}(|\varphi\rangle) = 0$, $\forall\,|\varphi\rangle \neq |\psi\rangle$.

En realidad son escasas las situaciones en las que podemos asignar a un sistema físico un $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$. Cuando es así hablamos de un estado puro.

Estados puros y mezcla estadística

No debemos pensar que las probabilidades estadísticas no juegan ningún papel en la mecánica cuántica.

En general, existe una cierta indeterminación acerca del estado que emerge de un aparato de medida, debido principalmente a su eficiencia limitada.

En este caso, parametrizamos nuestra ignorancia asignando al sistema una colección $\{\mathfrak{p}_\alpha, |\psi_\alpha\rangle\}$ de estados, $\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}$, y probabilidades de que el sistema se halle en ellos, $\sum_\alpha \mathfrak{p}_\alpha = 1$.

Sería un error intentar asignar al sistema una superposición de la forma

$$|\psi\rangle = \sum_\alpha \mathfrak{p}_\alpha \, |\psi_\alpha\rangle \ ,$$

pues conduce a resultados incorrectos debido a los términos de interferencia.

En conclusión, no podemos asignar un elemento de $\mathcal{H}$ a un sistema que sea una mezcla estadística de estados.

El operador densidad

El operador densidad, ρ, es la herramienta apropiada para esta situación,

$$\rho = \sum_\alpha \mathfrak{p}_\alpha \, |\psi_\alpha\rangle \langle\psi_\alpha| = \sum_\alpha \mathfrak{p}_\alpha \, \mathcal{P}_\alpha \; .$$

La descripción mediante el operador densidad incluye el caso de estado puro, sin más que asignar las probabilidades asociadas a una certeza,

$$\mathfrak{p}_{\alpha_1} = 1 \qquad \mathfrak{p}_{\alpha_{k\neq 1}} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \rho = \rho_{\alpha_1} := |\psi_{\alpha_1}\rangle \langle\psi_{\alpha_1}| = \mathcal{P}_{\alpha_1} \; .$$

Claramente, $\rho : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ es un operador hermítico, $\rho^\dagger = \rho$, que verifica

$$\mathrm{Tr}\,\rho = \langle \mathbf{e}^k | \, \rho \, | \mathbf{e}_k \rangle = \sum_\alpha \mathfrak{p}_\alpha \, \langle \mathbf{e}^k | \psi_\alpha \rangle \langle \psi_\alpha | \mathbf{e}_k \rangle = \sum_\alpha \mathfrak{p}_\alpha \, \langle \psi_\alpha | \mathbf{e}_k \rangle \langle \mathbf{e}^k | \psi_\alpha \rangle$$

$$= \sum_\alpha \mathfrak{p}_\alpha \langle \psi_\alpha | \, \mathbb{I} \, | \psi_\alpha \rangle = \sum_\alpha \mathfrak{p}_\alpha \langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle = \sum_\alpha \mathfrak{p}_\alpha = 1 \; .$$

Sin embargo, ρ es un proyector sólo cuando tenemos un estado puro.

De hecho, podemos verificar que

$$\rho^{2} = \sum_{\alpha,\beta} \mathfrak{p}_\alpha\, \mathfrak{p}_\beta \, |\psi_\alpha\rangle\, \langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle\, \langle\psi_\beta| = \sum_{\alpha} \mathfrak{p}_\alpha^2\, |\psi_\alpha\rangle\, \langle\psi_\alpha| \neq \rho\,,$$

puesto que $\mathfrak{p}_\alpha^2 < \mathfrak{p}_\alpha$.

El operador ρ es un proyector sólo para un estado puro. Es esta propiedad la que distingue la matriz densidad de un estado puro y un estado mezcla.

La información contenida en la matriz densidad en estados mezcla equivale a aquella que contiene el vector para un estado puro.

De hecho, si $\mathbf{A}$ es un observable y $\{|\mathbf{u}_n^i\rangle\}$ la base ortonormal, $\mathbf{A}\,|\mathbf{u}_n^i\rangle = \lambda_n\,|\mathbf{u}_n^i\rangle$, la probabilidad de medir λ_n es la suma ponderada de probabilidades:

$$\begin{aligned}\mathfrak{P}(\lambda_n) &= \sum_\alpha \mathfrak{p}_\alpha\, \mathfrak{p}_{\psi_\alpha}(\lambda_n) = \sum_\alpha \mathfrak{p}_\alpha \sum_{i=1}^{d_n} |\langle \mathbf{u}_n^i|\psi_\alpha\rangle|^2 \\ &= \sum_{i=1}^{d_n} \langle \mathbf{u}_n^i| \left(\sum_\alpha \mathfrak{p}_\alpha\, |\psi_\alpha\rangle\, \langle\psi_\alpha|\right) |\mathbf{u}_n^i\rangle = \sum_{i=1}^{d_n} \langle \mathbf{u}_n^i|\, \rho\, |\mathbf{u}_n^i\rangle\end{aligned}$$

El valor medio en un estado mezcla

Es decir que la probabilidad de medir λ_n en un estado mezcla resulta

$$\mathfrak{P}(\lambda_n) = \sum_{i=1}^{d_n} \langle \mathbf{u}_n^i | \mathbf{e}_k \rangle \langle \mathbf{e}^k | \rho | \mathbf{u}_n^i \rangle = \langle \mathbf{e}^k | \rho \left(\sum_{i=1}^{d_n} | \mathbf{u}_n^i \rangle \langle \mathbf{u}_n^i | \right) | \mathbf{e}_k \rangle = \mathrm{Tr}\left(\rho \, \mathcal{P}_n \right) ,$$

donde $\mathcal{P}_n$ es el proyector sobre el subespacio $V_{\lambda_n} \subset \mathcal{H}$.

Igualmente, podemos calcular el valor medio de **A** como la suma ponderada de los medidos sobre los estados puros que componen la mezcla,

$$\langle \mathbf{A} \rangle_\rho = \sum_\alpha \mathfrak{p}_\alpha \langle \psi_\alpha | \mathbf{A} | \psi_\alpha \rangle = \sum_\alpha \mathfrak{p}_\alpha \langle \psi_\alpha | \mathbf{A} | \mathbf{e}_k \rangle \langle \mathbf{e}^k | \psi_\alpha \rangle$$

$$= \langle \mathbf{e}^k | \left(\sum_\alpha \mathfrak{p}_\alpha | \psi_\alpha \rangle \langle \psi_\alpha | \right) \mathbf{A} | \mathbf{e}_k \rangle = \mathrm{Tr}\left(\rho \, \mathbf{A} \right)$$

De hecho, las fórmulas son equivalentes considerando el proyector $\mathcal{P}_n$ como un caso particular de observable.

Producto tensorial de operadores

Sean $\mathbf{A}$ y $\mathbf{B}$ dos operadores lineales definidos sobre $V^{(1)}$ y $V^{(2)}$. Entonces, definimos el operador $\mathbf{A}\otimes\mathbf{B}$ que actúa sobre $V = V^{(1)}\otimes V^{(2)}$ como

$$\mathbf{A}\otimes\mathbf{B}\,|\mathbf{v}\rangle := \mathbf{A}\,|\mathbf{v}_1\rangle\otimes\mathbf{B}\,|\mathbf{v}_2\rangle = |\mathbf{w}\rangle\ ,$$

y linealmente sobre sumas de vectores de V.

Dada una base $\{|\mathbf{e}_{i,\alpha}\rangle\}$ para $V^{(1)}\otimes V^{(2)}$, encontramos una expresión para la matriz $A\otimes B$ que representa al operador $\mathbf{A}\otimes\mathbf{B}$ en dicha base, a partir de las matrices A y B que representan a $\mathbf{A}$ y $\mathbf{B}$ en las bases respectivas,

$$\begin{aligned}\mathbf{A}\otimes\mathbf{B}\,|\mathbf{e}_{j,\beta}\rangle &= \mathbf{A}\,|\mathbf{e}^{(1)}_j\rangle\otimes\mathbf{B}\,|\mathbf{e}^{(2)}_\beta\rangle = A^i{}_j\,|\mathbf{e}^{(1)}_i\rangle\otimes B^\alpha{}_\beta\,|\mathbf{e}^{(2)}_\alpha\rangle\\ &= A^i{}_j\,B^\alpha{}_\beta\,|\mathbf{e}^{(1)}_i\rangle\otimes|\mathbf{e}^{(2)}_\alpha\rangle = (A\otimes B)^{i,\alpha}{}_{j,\beta}\,|\mathbf{e}_{i,\alpha}\rangle\ .\end{aligned}$$

La matriz resultante se denomina producto de Kronecker de A y B. Si éstas tienen dimensiones d_2 y d_2, $A\otimes B$ es una matriz de dimensión $d_1\,d_2$,

$$(A\otimes B)^{i,\alpha}{}_{j,\beta} = A^i{}_j\,B^\alpha{}_\beta \qquad\qquad 1\le i,j\le d_1,\ 1\le\alpha,\beta\le d_2\ .$$

Producto tensorial de operadores

Con esta prescripción, si $d_1 = d_2 = 2$, la matriz $A \otimes B$ adopta la forma

$$A \otimes B = \begin{pmatrix} A^1{}_1\, B & A^1{}_2\, B \\ & \\ A^2{}_1\, B & A^2{}_2\, B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^1{}_1\, B^1{}_1 & A^1{}_1\, B^1{}_2 & A^1{}_2\, B^1{}_1 & A^1{}_2\, B^1{}_2 \\ A^1{}_1\, B^2{}_1 & A^1{}_1\, B^2{}_2 & A^1{}_2\, B^2{}_1 & A^1{}_2\, B^2{}_2 \\ A^2{}_1\, B^1{}_1 & A^2{}_1\, B^1{}_2 & A^2{}_2\, B^1{}_1 & A^2{}_2\, B^1{}_2 \\ A^2{}_1\, B^2{}_1 & A^2{}_1\, B^2{}_2 & A^2{}_2\, B^2{}_1 & A^2{}_2\, B^2{}_2 \end{pmatrix} .$$

La representación matricial de la composición de dos operadores tensoriales,

$$(A \otimes B) \cdot (A' \otimes B') = (A \cdot A') \otimes (B \cdot B') \,,$$

donde el punto denota la multiplicación de matrices. Sin embargo, la matriz asociada a la suma de dos operadores tensoriales:

$$(A \otimes B) + (A' \otimes B') \neq (A + A') \otimes (B + B') \,.$$

Análogamente, un vector, $|\mathbf{v}\rangle \otimes |\mathbf{w}\rangle$, se escribe como

$$|\mathbf{v}\rangle \otimes |\mathbf{w}\rangle = v^i\, w^j\, |\mathbf{e}_i^{(1)}\rangle \otimes |\mathbf{e}_j^{(2)}\rangle = \left(v^1\, w^1, v^1\, w^2, v^2\, w^1, v^2\, w^2\right) \begin{pmatrix} |\mathbf{e}_{1,1}\rangle \\ |\mathbf{e}_{1,2}\rangle \\ |\mathbf{e}_{2,1}\rangle \\ |\mathbf{e}_{2,2}\rangle \end{pmatrix} .$$

Ejemplo: sistema de dos espines

Las variables de estado son vectores de $V \otimes V$, donde $V \sim \mathbb{C}^2$. Llamemos a los vectores de la base canónica de V, $|+\rangle$ y $|-\rangle$.

Sean las matrices de Pauli:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

El observable básico es el operador de espín en cada sitio, definido mediante

$$\vec{\sigma}_1 = \vec{\sigma} \otimes \mathbb{I} \qquad \vec{\sigma}_2 = \mathbb{I} \otimes \vec{\sigma} \; .$$

que son operadores sobre $V \otimes V$ con acción no trivial sobre cada factor.

El hamiltoniano que describe la interacción de los espines viene dado por

$$\mathbf{H} := \frac{J}{4} (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 - \mathbb{I} \otimes \mathbb{I}) = \frac{J}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} .$$

Ejemplo: sistema de dos espines

Llamamos a los vectores base de $V \otimes V$ usados para expresar $\mathbf{H}$:

$$|+,+\rangle \qquad |+,-\rangle \qquad |-,+\rangle \qquad |-,-\rangle \,.$$

Los autovalores de $\mathbf{H}$ son los niveles de energía del sistema. Tenemos, pues, dos niveles correspondientes: (i) al autovalor $E_0 = 0$, con degeneración triple

$$|1,1\rangle := |+,+\rangle \qquad |1,-1\rangle := |-,-\rangle \qquad \text{y} \qquad |1,0\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle + |-+\rangle\right) ,$$

y otro, (ii) no degenerado que corresponde a $E_1 = -J$ cuyo autovector es

$$|0,0\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|+-\rangle - |-+\rangle\right) .$$

Notar que los primeros son simétricos frente al intercambio de espines y el último es antisimétrico.

Definamos el operador de espín total:

$$\vec{S} := \frac{1}{2}\left(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2\right) = \frac{1}{2}\left(\vec{\sigma} \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes \vec{\sigma}\right) .$$

Ejemplo: sistema de dos espines

Es interesante verificar que $[S_i, S_j] = 2i\,\epsilon_{ijk}\,S_k$.

Podemos verificar que los operadores

$$S_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \qquad \text{y} \qquad \vec{S}^2 := \vec{S}\cdot\vec{S} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix},$$

tiene los mismos autovectores (las tres matrices conmutan entre sí), con los autovalores

$$\vec{S}^2\,|s,m\rangle = s\,(s+1)\,|s,m\rangle \qquad\qquad S_z\,|s,m\rangle = m\,|s,m\rangle\ ,$$

con $m = -s, \ldots, s$ y $s = 0$ o $s = 1$.

Esta construcción puede generalizarse para el acoplo de dos momentos angulares en general.