

Introducción a la Física Cuántica 2015

Espacios de Hilbert y notación de Dirac

Víctor Romero Rochín

En estas notas revisaremos el concepto de espacios de Hilbert usando la notación de Dirac. Dentro de este esquema, en otro escrito, discutiremos la formulación de la mecánica cuántica de una partícula. Esta formulación nos permitirá darle énfasis a lo discutido en clase, concerniente a la relevancia de las observables como las cantidades más importantes de la teoría ... **Advertencia!** La presentación no pretende ser matemáticamente rigurosa, es decir, enunciaremos los resultados sin demostraciones, salvo en casos donde sea fácil hacerlo.

1) *Espacio de Hilbert. Kets y bras.* Un espacio de Hilbert, denotado como \mathcal{H} es un espacio vectorial de dimensión finita o infinita. En esta discusión consideraremos sólo espacios de dimensión infinita. Definimos a un vector arbitrario en el espacio de Hilbert como

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad (1)$$

y lo llamamos “ket”. Para cada vector ket existe un vector dual, denotado como,

$$\langle\psi| \in \mathcal{H} \quad (2)$$

llamado “bra”.

2) *Producto interno.* Sean dos vectores ket $|\psi\rangle$ y $|\phi\rangle$, por tanto, existen $\langle\psi|$ y $\langle\phi|$. Definimos el *producto interno* entre $\langle\phi|$ y $|\psi\rangle$, como

$$\langle\phi||\psi\rangle \equiv \langle\phi|\psi\rangle \in \mathbb{C} \quad (3)$$

es decir, es un producto entre un bra y un ket y su resultado es un número complejo. Imponemos ahora que el producto entre $\langle\psi|$ y $|\phi\rangle$ es el complejo conjugado del anterior,

$$\langle\psi|\phi\rangle = (\langle\phi|\psi\rangle)^*. \quad (4)$$

Veremos más abajo que esta propiedad puede verse como que el bra es el vector *transpuesto conjugado* del ket.

La propiedad (4) implica que el producto interno de un vector consigo mismo, llamado la “norma”, es un número real,

$$\langle \psi | \psi \rangle \in 0 < \mathbb{R} < \infty. \quad (5)$$

Exigimos que la norma de todo vector sea positiva y finita. Debido a que la norma de un vector arbitrario no es cero, decimos es que “normalizable”. Existen dos “excepciones”, una, que existe el vector cero que no es normalizable, y otra, que existen vectores cuya norma no está definida, sin embargo, su producto interno cualquier otro vector sí lo está. Mencionaremos ambos casos adelante, la primera abajo.

Dos propiedades importantes son que la suma de dos kets es otra vez un ket,

$$|\psi\rangle + |\phi\rangle \in \mathcal{H} \quad (6)$$

y la suma de dos bras es un bra,

$$\langle \psi | + \langle \phi | \in \mathcal{H}. \quad (7)$$

Sin embargo, *no* podemos sumar un bra más un ket, no está definido. La otra propiedad es que el producto de un número complejo por un ket o un bra, es también un ket o un bra,

$$a |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad a \langle \psi | \in \mathcal{H}, \quad \text{con } a \in \mathbb{C}. \quad (8)$$

3) *Operadores*. Asociados al espacio de Hilbert \mathcal{H} existen “operadores”, denotados como \hat{A} , tales que su operación sobre cualquier ket es un ket,

$$\hat{A}|\psi\rangle \in \mathcal{H} \quad (9)$$

es decir, podemos escribir

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\chi\rangle \quad (10)$$

Por la definición de producto interno, se sigue que,

$$\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle \in \mathbb{C}. \quad (11)$$

Existe el operador unidad $\hat{1}$, que tiene la obvia operación,

$$\hat{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle. \quad (12)$$

Para cada operador \hat{A} existe su *adjunto* o *transpuesto conjugado*, que denotamos como \hat{A}^\dagger y cuyos elementos de matriz son,

$$\langle \phi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle = \left(\langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle \right)^* . \quad (13)$$

Existe una clase de operadores muy importantes, como discutiremos más adelante, que se llaman *Hermitianos* y que son aquellos que son iguales a su adjunto, es decir, $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$. De la relación anterior, hallamos que satisfacen,

$$\langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle = \left(\langle \psi | \hat{A} | \phi \rangle \right)^* , \quad (14)$$

y en particular, si $|\phi\rangle = |\psi\rangle$, se sigue que,

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \left(\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \right)^* \quad (15)$$

es decir, que

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle \in \mathbb{R} . \quad (16)$$

Este es un resultado muy importante de los operadores Hermitianos, que usaremos después.

Existen varias operaciones importantes de los operadores, sean Hermitianos o no:

i) La suma o producto de dos operadores es un operador, es decir,

$$\left(\hat{A} + \hat{B} \right) | \psi \rangle \in \mathcal{H}, \quad \hat{A}\hat{B} | \psi \rangle \in \mathcal{H} \quad (17)$$

ii) La operación de transponer y conjugar es (muéstrela!),

$$\left(a \hat{A} \hat{B} | \psi \rangle \right)^\dagger = a^* \langle \psi | \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger , \quad (18)$$

donde $a \in \mathbb{C}$. Esta propiedad también se escribe usando sólo operadores, como $\left(a \hat{A} \hat{B} \right)^\dagger = a^* \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$.

En general, los operadores no conmutan, es decir,

$$\hat{A}\hat{B} | \psi \rangle \neq \hat{B}\hat{A} | \psi \rangle \quad \text{en general.} \quad (19)$$

Esto es tan importante de tomar en cuenta que definimos a el *conmutador* de dos operadores como,

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (20)$$

Muestre que si $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ y $\hat{B} = \hat{B}^\dagger$, y no conmutan, entonces su conmutador puede escribirse como,

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C} \quad (21)$$

donde \hat{C} es Hermitiano, es decir $\hat{C} = \hat{C}^\dagger$.

4) *Bases del espacio de Hilbert.* La esencia de que \mathcal{H} es un espacio vectorial, es que existe un número (infinito) de *bases* que permiten describir cualquier estado y cualquier operador en términos de ellas. Existen dos tipos de bases, discretas y continuas, y los vectores de la base forman un conjunto *completo y ortonormal*. Veamos,

Base discreta. Es un conjunto infinito, denumerable de vectores ket, $|\alpha_n\rangle$ con $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$ que satisfacen,

$$\langle \alpha_m | \alpha_n \rangle = \delta_{mn} \quad \text{ortonormalidad} \quad (22)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\alpha_n\rangle \langle \alpha_n| = \hat{1} \quad \text{completez} \quad (23)$$

Base continua. Es un conjunto infinito, continuo de vectores ket, $|\beta\rangle$ con $\beta \in \mathbb{R}$, aunque puede estar acotado, por ejemplo $\beta \in (a, b)$, y que satisfacen,

$$\langle \beta' | \beta \rangle = \delta(\beta - \beta') \quad \text{ortonormalidad} \quad (24)$$

$$\int_a^b |\beta\rangle \langle \beta| d\beta = \hat{1} \quad \text{completez} \quad (25)$$

La propiedad de completez nos permite escribir cualquier vector en términos de la base, por ejemplo,

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \hat{1} |\psi\rangle \\ &= \left(\sum_{n=1}^{\infty} |\alpha_n\rangle \langle \alpha_n| \right) |\psi\rangle \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} |\alpha_n\rangle \langle \alpha_n | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (26)$$

Si definimos $a_n = \langle \alpha_n | \psi \rangle \in \mathbb{C}$, podemos escribir,

$$|\psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n |\alpha_n\rangle, \quad (27)$$

es decir, cualquier vector puede escribirse como una combinación lineal de los elementos de la base. Los coeficientes de dicho desarrollo no son ms que las proyecciones del vector en cuestión sobre los elementos de la base. Esta identificación es consistente con las propiedades de la base, pues si realizamos el producto interno de un elemento cualquiera $\langle \alpha_m |$ con el ket $|\psi\rangle$, obtenemos,

$$\begin{aligned} \langle \alpha_m | \psi \rangle &= \sum_{n=1}^{\infty} a_n \langle \alpha_m | \alpha_n \rangle \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} a_n \delta_{mn} \\ &= a_m. \end{aligned} \quad (28)$$

que es la identificación que habíamos hecho antes. Dado que el vector es normalizable, supongamos que ya está normalizado a 1. Esto implica (verifíquelo!),

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1 \Rightarrow \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 = 1. \quad (29)$$

Al revés también funciona (y es la razón del adjetivo “completo” de la base): Si tomamos un número finito o infinito de números complejos $c_n \in \mathbb{C}$, con $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$, tales que satisfagan

$$\sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 < \infty \quad (30)$$

entonces, la combinación lineal,

$$|\chi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n |\alpha_n\rangle \in \mathcal{H} \quad (31)$$

es decir, es un vector en el espacio de Hilbert.

Si la base es continua, podemos escribir ahora,

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle &= \hat{1} |\psi\rangle \\
 &= \left(\int_a^b |\beta\rangle\langle\beta| \right) |\psi\rangle d\beta \\
 &= \int_a^b |\beta\rangle\langle\beta|\psi\rangle d\beta.
 \end{aligned} \tag{32}$$

tal que podemos identificar al coeficiente, que es una función de β , como $c(\beta) = \langle\beta|\psi\rangle \in \mathbb{C}$. Todo lo demás que hicimos arriba con la base discreta puede hacerse con la base continua. Hágalo.

5. *Bases de los operadores Hermitianos.* Un resultado muy importante es que a cada operador Hermitiano le corresponde una base completa y ortonormal. Esto quiere decir lo siguiente: Sea $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ un operador Hermitiano. Su base asociada es tal que obedece la siguiente relación,

$$\hat{A}|\alpha_n\rangle = \alpha_n|\alpha_n\rangle \quad \forall n = 1, 2, 3, \dots, \infty \tag{33}$$

Es decir, la acción del operador \hat{A} sobre cualquier elemento de la base es igual al mismo elemento multiplicado por un número α_n , tal que la propiedad (16) de los operadores Hermitianos garantiza que es real, $\alpha_n \in \mathbb{R}$. Esto puede comprobarse multiplicando por el bra $\langle\alpha_m|$ y usando la propiedad de ortonormalidad:

$$\langle\alpha_m|\hat{A}|\alpha_n\rangle = \alpha_n \delta_{mn}. \tag{34}$$

Es decir, si $m \neq n$ es cero y si $m = n$ tiene que ser real debido a (16). Este es un resultado de enorme importancia para la interpretación posterior de la teoría. A los vectores $|\alpha_n\rangle$ se les llama los eignevectores de \hat{A} y a los números reales α_n , los eignevalores de \hat{A} .

Una consecuencia crucial. Afirmamos (sin demostrar!) que a cada operador Hermitiano le corresponde una base. Se puede mostrar también que lo contrario es cierto, es decir, que a cada base le corresponde un operador Hermitiano. Por lo tanto, debe ser cierto que cualquier estado $|\psi\rangle$ es parte de alguna base, con un eigenvalor asociado a un operador Hermitiano. El que esto sea cierto se debe a que, como todo vector es una combinación lineal de una base dada, vea (26), se puede construir un número infinito de vectores ortogonales a este siendo todos combinaciones lineales de la base usada.

De estas combinaciones lineales podemos ahora despejar a los elementos de la base usada en términos de los vectores hallados, ortogonales a $|\psi\rangle$, demostrando de esta manera la completez de dicho conjunto construido. Todo esto se debe a que el espacio de Hilbert es un espacio *lineal*.

Corolario muy importante. Si dos operadores Hermitianos conmutan, podemos mostrar que tienen la misma base. Y lo contrario, si dos operadores no conmutan, entonces sus bases son necesariamente diferentes ... intente mostrarlo con la información de estas notas. Use el hecho que si dos bases son diferentes, entonces cualquier elemento de una es combinación lineal de las otras y viceversa.

6. *Representación de los operadores como matrices (infinitas).* Supongamos una base discreta $\{|\alpha_n\rangle, \forall n\}$ del operador \hat{A} . Podemos representar a los vectores ket como vectores columnas de dimensión infinita:

$$|\alpha_1\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\alpha_2\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad |\alpha_n\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad \cdots \quad |\alpha_\infty\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \quad (35)$$

Es decir, al vector m -ésimo $|\alpha_m\rangle$ le corresponde un vector columna con “0” en todas la entradas, excepto en la m -ésima, donde se tiene un “1”. Los vectores bra son los mismos pero en forma de renglon,

$$\begin{aligned} \langle\alpha_1| &\equiv (1 \ 0 \ 0 \ \cdots \ 0 \ \cdots \ 0) \\ \langle\alpha_2| &\equiv (0 \ 1 \ 0 \ \cdots \ 0 \ \cdots \ 0) \\ &\vdots \\ \langle\alpha_n| &\equiv (0 \ 0 \ 0 \ \cdots \ 1 \ \cdots \ 0) \\ &\vdots \\ \langle\alpha_\infty| &\equiv (0 \ 0 \ 0 \ \cdots \ 0 \ \cdots \ 1) \end{aligned} \quad (36)$$

Evidentemente satisfacen ortonormalidad, chéquelo.

Así, cualquier vector $|\psi\rangle$ debe poder escribirse como,

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle &= \sum_{n=1}^{\infty} a_n |\alpha_n\rangle \\
 &= a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \cdots + a_n \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \cdots + a_{\infty} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \\ a_n \\ \vdots \\ a_{\infty} \end{pmatrix} \tag{37}
 \end{aligned}$$

Sea \hat{B} un operador Hermitiano arbitrario (es decir, tal que la base usada no es la base de \hat{B}). Definimos primero,

$$B_{mn} \equiv \langle \alpha_m | \hat{B} | \alpha_n \rangle \quad \forall m, n \tag{38}$$

estos números complejos son diferentes de cero en general, debido a que no es la base de \hat{B} . Por lo tanto, el operador \hat{B} puede representarse como,

$$\hat{B} \equiv \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & \cdots & B_{1n} & \cdots & B_{1\infty} \\ B_{21} & B_{22} & \cdots & B_{2n} & \cdots & B_{2\infty} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ B_{n1} & B_{n2} & \cdots & B_{nn} & \cdots & B_{n\infty} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{\infty 1} & B_{\infty 2} & \cdots & B_{\infty n} & \cdots & B_{\infty \infty} \end{pmatrix} \tag{39}$$

Como $\hat{B} = \hat{B}^\dagger$, se sigue $B_{21} = B_{12}^*$. La representación anterior la podemos

verificar calculando, por ejemplo $\langle \alpha_2 | \hat{B} | \alpha_n \rangle$, veamos,

$$\begin{aligned}
 \langle \alpha_2 | \hat{B} | \alpha_n \rangle &= (0 \ 1 \ 0 \ \cdots \ 0 \ \cdots \ 0) \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & \cdots & B_{1n} & \cdots & B_{1\infty} \\ B_{21} & B_{22} & \cdots & B_{2n} & \cdots & B_{2\infty} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ B_{n1} & B_{n2} & \cdots & B_{nn} & \cdots & B_{n\infty} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{\infty 1} & B_{\infty 2} & \cdots & B_{\infty n} & \cdots & B_{\infty \infty} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \\
 &= (0 \ 1 \ 0 \ \cdots \ 0 \ \cdots \ 0) \begin{pmatrix} B_{1n} \\ B_{2n} \\ B_{3n} \\ \vdots \\ B_{nn} \\ \vdots \\ B_{\infty n} \end{pmatrix} = B_{2n}. \tag{40}
 \end{aligned}$$

Es evidente (chéquelo por favor!) que el operador \hat{A} debe ser de la siguiente forma:

$$\hat{A} \equiv \begin{pmatrix} A_{11} & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & A_{22} & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & A_{nn} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & A_{\infty \infty} \end{pmatrix} \tag{41}$$

y, por lo tanto, $A_{mm} = \alpha_m \ \forall m$. Es decir, el operador \hat{A} es una matriz diagonal en su propia base, cuyos elementos en la diagonal son sus eigenvalores.

Es evidente, entonces que al objeto $\langle \alpha_m | \hat{B} | \alpha_n \rangle = B_{mn}$ le llamemos el “elemento de matriz mn de \hat{B} en la base de \hat{A} ” ... todo lo que aprendió en Algebra Lineal lo puede usar aquí!