Observables. Conjunto completo de observables que conmutan.

Las magnitudes físicas van a estar representadas siempre mediante operadores hermíticos. Como veremos, los resultados que podemos obtener al medir una magnitud física son los autovalores del operador que la representa. Como los operadores hermíticos tienen autovalores reales, nos aseguramos que los resultados que se obtienen al medir magnitudes físicas serán siempre reales. Tan importantes como los autovalores serán los autovectores correspondientes, que nos servirán para calcular probabilidades de obtener un determiando resultado al medir una magnitud física. Por tanto, es importante que podamos construir una base del espacio de estados formada por autovectores del operador que representa a una determianda magnitud física. Aquí es donde entra en juego un nuevo concepto y es el de observable. En un espacio de estados de dimensión finita todos los operadores hermíticos son observables, en el sentido de que pueden representar a una magnitud física. Sin embargo, si el espacio de estados tiene dimensión infinita, no todos los operadores hermíticos son observables. Diremos que un operador hermítico es un observable cuando se puede construir una base ortonormal del espacio $\mathfrak{E}$ formada por autovectores del operador.

A continuación vamos a ver una serie de propiedades de dos observables que conmutan que nos van a conducir a un resultado significativo y es que se pueden diagonalizar a la vez. Es decir, que podremos encontrar una base del espacio de estados formada por autovectores comunes a los dos.

Vamos a considerar dos observables $\hat{A}$ y $\hat{B}$ que conmutan, de modo que $\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$. Vamos a considerar que el ket $|\psi\rangle$ es un autovector del operador A con autovalor λ. Si al vector $|\psi\rangle$ le aplico el operador $\hat{B}$ obtengo un vector distinto $\hat{B}\,|\psi\rangle$. Pues bien, este nuevo vector también es un autovector del operador $\hat{A}$ con el mismo autovalor λ. Vamos a verlo:

$$\hat{A}\left(\hat{B}\,|\psi\rangle\right) = \hat{B}\hat{A}\,|\psi\rangle = \hat{B}\lambda\,|\psi\rangle = \lambda\left(\hat{B}\,|\psi\rangle\right)$$

Pueden ocurrir dos casos:

- Que el autovalor λ sea no-degenerado, en cuyo caso el vector $\hat{B}\,|\psi\rangle$ tiene que ser proporcional a $|\psi\rangle$, ya que el vector $|\psi\rangle$ es el único con autovalor λ, salvo una constante multiplicativa. Por tanto:
$$\hat{B}\,|\psi\rangle = \mu\,|\psi\rangle$$
es decir, que el ket $|\psi\rangle$ también es autovector del operador $\hat{B}$.

- Que el autovalor λ sea degenerado. En este caso lo único que podemos decir es que el ket $\hat{B}\,|\psi\rangle$ pertenece al subespacio $\mathfrak{E}_\lambda$ de autovectores con autovalor λ. La dimensión de este subespacio es el grado de degeneración del autovalor λ.

Vamos a considerar ahora una base ortonormal en la que el operador $\hat{A}$ es diagonal. Por simplicidad supondremos que el espectro de autovalores de $\hat{A}$ es discreto y está formado por los números λ_i, con $i = 1, 2, \cdots$. Para cada autovalor λ_i puede haber más de un vector con el mismo autovalor (si el autovalor es degenerado), de modo que para distinguir los distintos autovectores con el mismo autovalor utilizaremos otro índice $j = 1, 2, \cdots, g_i$, donde g_i es el grado de degeneración del autovalor λ_i. Los autovectores los notaremos de la forma $\left\{\left|\psi_i^j\right\rangle\right\}$, de modo que forman una base ortonormal del espacio de estados y:

$$\hat{A}\left|\psi_i^j\right\rangle = \lambda_i\left|\psi_i^j\right\rangle, \qquad \left\langle\psi_i^j\middle|\psi_l^m\right\rangle = \delta_{i,l}\;\delta_{j,m}$$

En esta base el operador $\hat{A}$ será diagonal. Podemos ver cómo será la matriz que representa al operador $\hat{A}$:

$$\hat{A} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \cdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{A}_2 & & & \\ \vdots & & \ddots & & \\ \mathbf{0} & & & \mathbf{A}_i & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

donde $\mathbf{A}_i = \lambda_i \mathbf{I}$ es una matriz cuadrada $g_i \times g_i$, igual a λ_i por la matriz identidad y los $\mathbf{0}$ representan matrices (no necesariamente cuadradas) cuyos elementos son todos nulos. Cada una de las matrices $\mathbf{A}_i$ representa al operador $\hat{A}$ en el subespacio $\mathfrak{E}_{\lambda_i}$ en el que se encuentran todos los autovectores de $\hat{A}$ con el mismo autovalor λ_i. Es evidente que $\dim \mathfrak{E}_{\lambda_i} = g_i$.

Anteriormente vimos que dos autovectores de un operador hermítico con distinto autovalor son ortogonales, y acabamos de ver que $\hat{B}\left|\psi_i^j\right\rangle$ es autovector de $\hat{A}$ con autovalor λ_i, de modo que $\left\langle\psi_l^m\middle|\hat{B}\middle|\psi_i^j\right\rangle$ será nulo a menos que $i = l$, ya que $\hat{B}\left|\psi_i^j\right\rangle$ es autovector de $\hat{A}$ con autovalor λ_i y $\left|\psi_l^m\right\rangle$ con autovalor λ_l. Si el autovalor es distinto automáticamente son ortogonales. De aquí se deduce que la matriz que representa a $\hat{B}$ tiene la siguiente forma:

$$\hat{B} \equiv \begin{pmatrix} \mathbf{B}_1 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \cdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{B}_2 & & & \\ \vdots & & \ddots & & \\ \mathbf{0} & & & \mathbf{B}_i & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

Donde $\mathbf{B}_i$ es una matriz cuadrada $g_i \times g_i$ que representa al operador $\hat{B}$ en el subespacio $\mathfrak{E}_{\lambda_i}$. Por tanto, basta con diagonalizar todas las matrices $\mathbf{B}_i$ para que $\hat{A}$ y $\hat{B}$ queden diagonalizados simultáneamente ya que al diagonalizar $\mathbf{B}_i$ en el subespacio $\mathfrak{E}_{\lambda_i}$ la matriz $\mathbf{A}_i$ no pierde su forma ya que seguirá siendo proporcional a la matriz identidad.

Con esto queda demostrado que si tenemos dos observables que conmutan los podemos diagonalizar a la vez y podemos obtener una base del espacio de estados formada por autovectores comunes a los dos observables.

Vamos a introducir, por último, el concepto de conjunto completo de observables que conmutan (CCOC). Supongamos que tenemos un observable $\hat{A}$ en el espacio de estados $\mathfrak{E}$. Vamos a suponer que resolvemos el problema de autovalores del operador. Si el espectro es discreto podemos etiquetar los autovalores con un subíndice real discreto, n, de la forma λ_n. Vamos a suponer que todos los autovalores son no-degenerados, de modo que para cada autovalor existe un único autovector (salvo un factor multiplicativo) que satisface la ecuación de autovalores. Si normalizamos los autovectores habremos construido una ortonormal del espacio de estados formada por autovectores del operador $\hat{A}$. Es más, podemos etiquetar los vectores de la base utilizando como etiqueta los autovalores, de la forma $\{|\lambda_n\rangle\}$, ya que para cada autovalor existe un único autovector normalizado (salvo un factor de fase arbitrario). En este caso se dice que el observable $\hat{A}$ es en sí un CCOC, ya que sus autovalores pueden ser utilizados para etiquetar los vectores de la base formada por autovectores de $\hat{A}$ sin que haya confusión.

Si algún autovalor de $\hat{A}$ es degenerado, podemos seguir formando una base ortonormal del espacio de estados con autovectores del operador, pero ya no podremos utilizar los autovalores para etiquetar los vectores de la base de forma unívoca, ya que habrá más de un vector con la misma etiqueta. En este caso se dice que $\hat{A}$ no forma un CCOC.

Ahora bien, supongamos que encontramos otro observable $\hat{B}$ que conmuta con $\hat{A}$. En este caso podemos construir una base de autovectores comunes a los observables $\hat{A}$ y $\hat{B}$. Supongamos que $\hat{B}$ también tiene espectro discreto formado por los números μ_m. Vamos a suponer que diagonalizamos los dos observables a la vez y que construimos una base ortonormal discreta formada por autovectores comunes a los dos. Cada vector de la base será autovector de $\hat{A}$ con autovalor λ_n y autovector de $\hat{B}$ con autovalor μ_m. Podemos de nuevo utilizar los autovalores de $\hat{A}$ y de $\hat{B}$ para etiquetar los vectores de la base que hemos encontrado, de la forma $\{|\lambda_n, \mu_m\rangle\}$. Si no hay dos vectores de esta base con las mismas etiquetas se dice que $\hat{A}$ y $\hat{B}$ forman un CCOC, porque podemos utilizar los autovalores de $\hat{A}$ y de $\hat{B}$ para etiquetar los vectores de una base formada por autovectores comunes a los dos operadores de forma unívoca. Para que esto ocurra, basta con que en cada subespacio $\mathfrak{E}_{\lambda_n}$ el operador $\hat{B}$ no tenga autovalores degenerados (esto no implica que $\hat{B}$ tenga todos sus autovalores no degenerados). Si por el contrario, dentro de la base $\{|\lambda_n, \mu_m\rangle\}$ hay más de un vector con las mismas etiquetas se dice que $\hat{A}$ y $\hat{B}$ no forman un CCOC.

En ese caso podemos buscar otro operador $\hat{C}$ que conmute con $\hat{A}$ y con $\hat{B}$ y seguir el mismo procedimiento.

En resumen, un CCOC es un conjunto de observables que conmutan todos entre sí y de modo que podemos construir una base del espacio de estados formada por autovectores comunes a todos ellos y etiquetar de forma unívoca los vectores de esta base utilizando como etiquetas los autovalores. Como veremos más adelante, el concepto de CCOC es muy importante en mecánica cuántica. Para un problema concreto pueden existir varios CCOCs. Por ejemplo, en el caso de una partícula libre el operador $\hat{\mathbf{r}}$ constituye por si solo un CCOC, sin embargo no es el único que existe, ya que el operador $\hat{\mathbf{p}}$ también constituye un CCOC.

Operador de posición.

Uno de los operadores más importantes y que ya apareció al principio del tema es el operador de posición $\hat{x}$. Lo primero que tenemos que hacer es ver cómo actúa el operador de posición, para lo cual nos basamos en cómo actúa el operador $\hat{x}$ en la representación coordenadas.

Supongamos un ket $|\psi\rangle$. Las componentes de este ket en la representación coordenadas vienen dadas por la función $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$. Sabemos cómo actúa el operador $\hat{x}$ en la representación cordenadas:

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x)$$

Es decir, que sabemos cómo actúa el operador $\hat{x}$ sobre el ket $|\psi\rangle$ expresado en la representación coordenadas (para expresar un ket en la representación coordenadas tenemos que multiplicar a la izquierda por el bra $\langle x|$), es decir,

$$\langle x |\hat{x}| \psi\rangle = x\psi(x) = x \langle x|\psi\rangle$$

Una vez que hemos visto cómo actúa el operador $\hat{x}$ en la representación coordenadas podemos ver el carácter hermítico de este operador. Si el operador $\hat{x}$ es hermítico se debe verificar la siguiente condición:

$$\langle \varphi |\hat{x}| \psi\rangle^* = \langle \psi \left|\hat{x}^\dagger\right| \varphi\rangle = \langle \psi |\hat{x}| \varphi\rangle$$

Vamos a comprobar que de hecho se verifica la igualdad anterior, para lo cual utilizamos la relación de cierre de la base $|x\rangle$ de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \langle \varphi |\hat{x}| \psi\rangle^* &= \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \ \langle \varphi|x\rangle \langle x |\hat{x}| \psi\rangle\right)^* = \left(\int_{-\infty}^{\infty} dx \ \varphi^*(x) x \psi(x)\right)^* = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \ \psi^*(x) x \varphi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \ \langle \psi|x\rangle \langle x |\hat{x}| \varphi\rangle = \langle \psi |\hat{x}| \varphi\rangle \end{aligned}$$

Por tanto el operador $\hat{x}$ es hermítico. ¿Podemos formar una base con autovectores del operador $\hat{x}$? En ese caso, ¿cuáles son los autovectores del operador $\hat{x}$? La respuesta es sencilla ya que son los vectores $|x\rangle$, como cabía esperar. Podemos verlo en la siguiente expresión:

$$\langle x |\hat{x}| \psi\rangle = x \langle x|\psi\rangle$$

Como esta expresión es válida para cualquier ket $|\psi\rangle$ quiere decir que $\langle x| \hat{x} = x \langle x|$, por tanto el bra $\langle x|$ es autovector bra de $\hat{x}$ con autovalor x y como $\hat{x}$ es hermítico el ket correspondiente también lo es, de modo que:

$$\hat{x} |x\rangle = x |x\rangle$$

Por tanto, la base $\{|x\rangle\}$ de la representación coordenadas es la base en la que el operador $\hat{x}$ es diagonal.

Operador momento.

Otro operador importante es el operador momento $\hat{p}$. Podemos hacer lo mismo que con el operador $\hat{x}$ pero utilizando la representación de momentos. En esta representación, el ket $|\psi\rangle$ está representado por la función de onda en la representación de momentos $\langle p|\psi\rangle = \bar{\psi}(p)$. El operador $\hat{p}$ actúa de la forma:

$$\hat{p}\bar{\psi}(p) = p\bar{\psi}(p)$$

O bien:

$$\langle p |\hat{p}| \psi\rangle = p\bar{\psi}(p) = p \langle p|\psi\rangle$$

Haciendo lo mismo que con el operador de posición, llegaremos a las mismas conclusiones: el operador $\hat{p}$ es hermítico y los vectores $|p\rangle$ de la representación de momentos son los autovectores del operador $\hat{p}$ con autovalor p.

Para hacer estas demostraciones podemos utilizar también la representación coordenadas, ya que también sabemos cómo actúa $\hat{p}$ en esta representación:

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$$

Es decir,

$$\langle x\,|\hat{p}|\,\psi\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\,\langle x|\psi\rangle$$

Podemos ver en esta representación que los vectores $|p\rangle$ son autovectores de $\hat{p}$

$$\langle x\,|\hat{p}|\,p\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\,\langle x|p\rangle = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px} = p\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px} = p\,\langle x|p\rangle$$

Como esta igualdad se verifica sea cual sea el bra $\langle x|$ (es decir, sea cual sea el valor de x), llegamos a que:

$$\hat{p}\,|p\rangle = p\,|p\rangle$$

En la demostración anterior hemos usado la igualdad:

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

que apareció anteriormente.