Espacios de Hilbert.

En este apartado vamos a comenzar a estudiar el lenguage apropiado de la mecánica cuántica, como son los espacios de Hilbert. Este nuevo ente matemático junto con la notación de Dirac, que estudiaremos posteriormente, contituyen las herramientas de la mecánica cuántica, que permitirán realizar cálculos complejos de una forma clara.

En los temas anteriores hemos visto que en mecánica cuántica una partícula que se mueve en una sola dimensión viene descrita mediante una función de onda $\psi(x,t)$, de modo que su módulo al cuadrado nos da la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula en la posición x en el instante t. También hemos analizado el hecho de que la función de onda debe satisfacer el principio de superposición lineal, lo cual nos permite explicar los fenómenos de interferencia y difracción para las ondas de materia. Por último, hemos propuesto la ecuación de onda para las ondas de materia y la hemos resuelto para algunos casos sencillos.

Para que una función de onda en un instante determinado, $\psi(x)$, pueda representar realmente a una partícula debe ser normalizable, es decir, la integral en todo el espacio del módulo al cuadrado de la función de onda debe ser un número finito, de modo que multiplicando la función de onda por una constante podamos hacer que verifique la siguiente condición:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \ |\psi(x)|^2 = 1$$

El conjunto de todas las funciones normalizables se denomina en matemáticas L^2. Pues bien, resulta que este conjunto de funciones tiene la estructura de un espacio vectorial, de modo que si dos funciones $\psi_1(x)$ y $\psi_2(x)$ pertenecen a L^2, entonces una combinación lineal arbitraria $\lambda_1\psi_1(x)+\lambda_2\psi_2(x)$, siendo λ_1 y λ_2 números complejos, también es una función que pertenece a L^2. En física, no sólo nos interesan las funciones que sean normalizables, sino que además tenemos que exigir una cierta regularidad a las funciones que vayan a describir a una partícula, como que sean continuas tanto las funciones de onda como sus primeras derivadas. Al subconjunto de funciones L^2 que verifican que además de ser normalizables sean continuas, tanto las funciones como sus primeras derivadas lo denotaremos por $\mathfrak{F}$. El hecho es que este conjunto de funciones también tiene la estructura de un espacio vectorial. Un espacio de Hilbert es una extensión del concepto de espacio vectorial de modo que los elementos de un espacio de Hilbert son funciones $\psi(x)$, y de modo que el conjunto de funciones tenga estructura de espacio vectorial. Tanto L^2 como el subconjunto $\mathfrak{F} \subset L^2$ son espacios de Hilbert.

Producto escalar.

Dentro del espacio de Hilbert vamos a definir un producto escalar entre dos elementos (funciones) del espacio. Si dos funciones $\varphi(x)$ y $\psi(x)$ pertenecen al espacio $\mathfrak{F}$ definimos su producto escalar, que notaremos por $\varphi \bullet \psi$, como la siguiente integral:

$$\varphi \bullet \psi = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(x)\, \psi(x) \ dx$$

La integral anterior siempre converge si las dos funciones pertenecen a $\mathfrak{F}$. Para el caso de funciones de onda en el espacio ordinario de tres dimensiones la integral se extendrerá a todo el espacio. El producto escalar así definido verifica las siguiente propiedades:

$$
\begin{array}{l}
\varphi \bullet \psi = (\psi \bullet \varphi)^* \\
\varphi \bullet (\lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2) = \lambda_1 \varphi \bullet \psi_1 + \lambda_2 \varphi \bullet \psi_2 \\
(\lambda_1 \varphi_1 + \lambda_2 \varphi_2) \bullet \psi = \lambda_1^* \varphi_1 \bullet \psi + \lambda_2 \varphi_2 \bullet \psi
\end{array}
$$

Se dice que el producto escalar es lineal respecto de la segunda función y antilineal respecto de la primera.

Al igual que en el espacio ordinario, si para dos funciones $\varphi(x)$ y $\psi(x)$ se verifica que $\varphi \bullet \psi = 0$, diremos que las dos funciones son ortogonales.

De la misma forma, para toda función $\psi(x)$ que pertenece a $\mathfrak{F}$, podemos definir el número:

$$\psi \bullet \psi = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \ dx$$

que es un número real y definido positivo. A la raiz positiva del número anterior $\sqrt{\psi \bullet \psi}$ lo denominaremos la norma de la función $\psi(x)$. Una función de onda normalizada es, lógicamente, una función cuya norma vale la unidad y si la norma de una función $\psi(x)$ es nula es porque la función es nula para todos los valores de x. Podemos ver que el producto escalar que se ha definido satisface propiedades muy similares a las del producto escalar del espacio ordinario. Como ejemplo, se puede demostrar que se verifica la siguiente desigualdad, conocida como la desigualdad de Schwartz:

$$|\varphi \bullet \psi| \leq \sqrt{\varphi \bullet \varphi}\sqrt{\psi \bullet \psi}$$

Podemos comparar con el producto escalar de dos vectores $\vec{u}$ y $\vec{v}$ del espacio ordinario. También se verifica la siguiente relación análoga:

$$|\vec{u} \cdot \vec{v}| \leq \sqrt{\vec{u} \cdot \vec{u}}\sqrt{\vec{v} \cdot \vec{v}}$$

Si nos fijamos en los cálculos que aparecieron el los primeros temas, continuamente aparecen integrales como las del producto escalar que hemos definido, y de aquí la utilidad de los espacios de Hilbert.

Operadores lineales. Conmutador de dos operadores

Al igual que hemos hecho con el producto escalar, en los espacios de Hilbert podemos definir otros elementos análogos a los que se utilizan en el espacio ordinario, como son los operadores lineales. Podemos definir un operador $\hat{A}$ como una operación que a cada función $\psi(x)$ del espacio de Hilbert le hace corresponder otra función $\psi'(x)$, siendo la correspondencia lineal:

$$\psi(x) \xrightarrow{\hat{A}} \psi'(x)$$

El hecho de que la correspondencia sea lineal nos permite escribir esta relación de forma más sencilla de la forma:

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

De esta forma se hace más evidente el carácter lineal al actuar $\hat{A}$ sobre una combinación lineal de funciones:

$$\hat{A}\left(\lambda_1\psi_1\left(x\right)+\lambda_2\psi_2\left(x\right)\right)=\lambda_1\hat{A}\psi_1\left(x\right)+\lambda_2\hat{A}\psi_2\left(x\right)$$

Habrá ocasiones en las que el resultado de aplicar un operador sobre una función nos dé otra función que ya no pertenezca al mismo espacio de Hilbert. Por ejemplo, si $\psi\left(x\right) \in \mathfrak{F}$, la función $\hat{A}\psi\left(x\right)$ ya no tiene por qué pertenecer a $\mathfrak{F}$.

Ya hemos visto dos ejemplos de estos operadores, como es el caso de los operadores $\hat{x}$ y $\hat{p}$.

Podemos definir el producto de dos operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ como un nuevo operador $\hat{A}\hat{B}$ que actúa aplicando en primer lugar el operador $\hat{B}$ y sobre la función resultante aplicamos el operador $\hat{A}$:

$$\hat{A}\hat{B}\psi(x)=\hat{A}\left[\hat{B}\psi(x)\right]$$

En general, el producto de dos operadores no es conmutativo, de modo que no es lo mismo el operador $\hat{A}\hat{B}$ que el operador $\hat{B}\hat{A}$. La diferencia de estos dos operadores es un nuevo operador que denominaremos conmutador y que notaremos de la siguiente forma:

$$\left[\hat{A},\hat{B}\right]=\hat{A}\hat{B}-\hat{B}\hat{A}$$

Diremos que dos operadores conmutan si su conmutador vale cero.

Como ejemplo, podemos calcular el conmutador de los operadores $\hat{x}$ y $\hat{p}$ viendo cómo actúa el conmutador $[\hat{x},\hat{p}]$ sobre una función arbitraria $\psi\left(x\right)$:

$$\begin{aligned}
\left[\hat{x},\hat{p}\right]\psi(x) &= \left(\hat{x}\hat{p}-\hat{p}\hat{x}\right)\psi(x)=\hat{x}\hat{p}\psi(x)-\hat{p}\hat{x}\psi(x)=x\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\psi(x)-\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)x\psi\left(x\right)= \\
&= -i\hbar x\frac{\partial\psi\left(x\right)}{\partial x}+i\hbar\psi\left(x\right)+i\hbar x\frac{\partial\psi\left(x\right)}{\partial x}=i\hbar\psi\left(x\right)
\end{aligned}$$

Como la igualdad anterior es cierta para cualquier función $\psi(x)$, podemos concluir que:

$$\left[\hat{x},\hat{p}\right]=i\hbar$$

Esta relación será muy importante dentro de la teoría cuántica.