Operadores en notación de Dirac.

La mayor parte de lo que hemos visto hasta ahora se refiere a cómo se representa un estado en notación de Dirac. Ahora nos centraremos en los operadores. Vamos a comenzar por centrarnos en las bases ortonormales discretas, aunque más adelante, lógicamente, veremos también operadores en las representaciones de coordenadas y de momentos.

En primer lugar, vamos a ver cómo se representa un operador en una base ortonormal discreta $\{|u_i\rangle\}$. Supongamos un ket $|\psi\rangle$ y un operador $\hat{A}$, de modo que $\hat{A}|\psi\rangle = |\psi'\rangle$ es un nuevo ket. Los kets $|\psi\rangle$ y $|\psi'\rangle$ estarán representados en la base $\{|u_i\rangle\}$ por sus componentes, que notaremos como c_i y c'_i respectivamente, de modo que:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |u_i\rangle \, , \text{ donde } c_i = \langle u_i|\psi\rangle \, , \qquad \text{y} \qquad |\psi'\rangle = \sum_i c'_i |u_i\rangle \, , \text{ donde } c'_i = \langle u_i|\psi'\rangle \, .$$

Vamos a ver cómo se relacionan las componentes c'_i con las c_i, sabiendo que los dos kets están relacionados de la forma $\hat{A}|\psi\rangle = |\psi'\rangle$:

$$c'_i = \langle u_i|\psi'\rangle = \langle u_i|\hat{A}|\psi\rangle = \sum_j \langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle \langle u_j|\psi\rangle = \sum_j \langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle c_j$$

donde se ha utilizado convenientemente la relación de cierre de la base $\sum_j |u_j\rangle\langle u_j| = 1$. Pues bien, ya podemos ver la relación. Si notamos $A_{ij} = \langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle$, nos queda que:

$$c'_i = \sum_j A_{ij} c_j$$

o bien,

$$\begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \vdots \\ c'_i \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2j} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ A_{i1} & A_{i2} & & A_{ij} & \\ \vdots & \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_j \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad \begin{pmatrix} \langle u_1|\psi'\rangle \\ \langle u_2|\psi'\rangle \\ \vdots \\ \langle u_i|\psi'\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1j} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2j} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ A_{i1} & A_{i2} & & A_{ij} & \\ \vdots & \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle u_j|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Es decir, que si bien los kets $|\psi\rangle$ y $|\psi'\rangle$ están representados por matrices columna en las que colocamos sus componentes, el operador $\hat{A}$ está representado por una matriz en la que colocamos sus elementos de matriz en la base $\{|u_i\rangle\}$: $A_{ij} = \langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle$. Podemos ver que las matrices que representan a los operadores siguen las reglas propias de las matrices. Por ejemplo, supongamos que tenemos un producto de dos operadores $\hat{A}\hat{B}$ y que queremos calcular sus elementos de matriz a partir de las matrices que representan a $\hat{A}$ y a $\hat{B}$:

$$(AB)_{ij} = \langle u_i|\hat{A}\hat{B}|u_j\rangle = \sum_k \langle u_i|\hat{A}|u_k\rangle \langle u_k|\hat{B}|u_j\rangle = \sum_k A_{ik}B_{kj}$$

donde entre los operadores $\hat{A}$ y $\hat{B}$ hemos insertado la relación de cierre de la base. Podemos ver que las matrices que representan a $\hat{A}$ y $\hat{B}$ siguen la regla de multiplicación que corresponde al producto de matrices:

$$\begin{pmatrix} (AB)_{11} & (AB)_{12} & \cdots & (AB)_{1j} & \cdots \\ (AB)_{21} & (AB)_{22} & \cdots & (AB)_{2j} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ (AB)_{i1} & (AB)_{i2} & & (AB)_{ij} & \\ \vdots & \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1k} & \cdots \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2k} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ A_{i1} & A_{i2} & & A_{ik} & \\ \vdots & \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & \cdots & B_{1j} & \cdots \\ B_{21} & B_{22} & \cdots & B_{2j} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ B_{k1} & B_{k2} & & B_{kj} & \\ \vdots & \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}$$

Vamos a ver ahora cómo obtener la matriz que representa al adjunto de un operador. Nos basamos, lógicamente, en la relación $\langle\varphi|\,\hat{A}\,|\psi\rangle^* = \langle\psi|\,\hat{A}^\dagger\,|\varphi\rangle$:

$$A^*_{ij} = \langle u_i|\,\hat{A}\,|u_j\rangle^* = \langle u_j|\,\hat{A}^\dagger\,|u_i\rangle = A^\dagger_{ji}$$

Por tanto, $A^\dagger_{ij} = A^*_{ji}$, es decir que para obtener la matriz que representa al adjunto de un operador $\hat{A}$ tenemos que transponer la matriz que representa al operador y tomar el complejo conjugado de sus elementos:

$$\hat{A}^\dagger \equiv \begin{pmatrix} A^\dagger_{11} & A^\dagger_{12} & \cdots & A^\dagger_{1j} & \cdots \\ A^\dagger_{21} & A^\dagger_{22} & \cdots & A^\dagger_{2j} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ A^\dagger_{i1} & A^\dagger_{i2} & & A^\dagger_{ij} & \\ \vdots & \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^*_{11} & A^*_{21} & \cdots & A^*_{j1} & \cdots \\ A^*_{12} & A^*_{22} & \cdots & A^*_{j2} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ A^*_{1i} & A^*_{2i} & & A^*_{ji} & \\ \vdots & \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}$$

Vamos a ver la representación en la base $\{|u_i\rangle\}$ de un tipo particular de operadores como son los proyectores. Dado el vector $|\psi\rangle$ normalizado, el proyector sobre el vector vale $\hat{P}_\psi = |\psi\rangle\langle\psi|$ recordamos que el ket está representado en la base $\{|u_i\rangle\}$ por una matriz columna mientras que el bra está representado por una matriz fila. Si multiplicamos el bra por el ket me queda un número, pero si lo hacemos al contrario nos queda una matriz:

$$\begin{aligned} \hat{P}_\psi &= |\psi\rangle\langle\psi| \equiv \begin{pmatrix} \langle u_1|\psi\rangle \\ \langle u_2|\psi\rangle \\ \vdots \\ \langle u_i|\psi\rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle\psi|u_1\rangle & \langle\psi|u_2\rangle & \cdots & \langle\psi|u_j\rangle & \cdots \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \langle u_1|\psi\rangle\langle\psi|u_1\rangle & \langle u_1|\psi\rangle\langle\psi|u_2\rangle & \cdots & \langle u_1|\psi\rangle\langle\psi|u_j\rangle & \cdots \\ \langle u_2|\psi\rangle\langle\psi|u_1\rangle & \langle u_2|\psi\rangle\langle\psi|u_2\rangle & \cdots & \langle u_2|\psi\rangle\langle\psi|u_j\rangle & \cdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ \langle u_i|\psi\rangle\langle\psi|u_1\rangle & \langle u_i|\psi\rangle\langle\psi|u_2\rangle & & \langle u_i|\psi\rangle\langle\psi|u_j\rangle & \\ \vdots & \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Como ejemplo, supongamos un espacio de estados de dimensión finita, en particular, $\dim \mathfrak{E} = 3$. Vamos a suponer que en dicho espacio de estados conocemos una base ortonormal discreta formada por tres vectores $\{|u_1\rangle, |u_2\rangle, |u_3\rangle\}$. ¿Cómo están representados estos tres vectores en esta base? ¿Y sus proyectores?

$$|u_1\rangle \equiv \begin{pmatrix} \langle u_1|u_1\rangle \\ \langle u_2|u_1\rangle \\ \langle u_3|u_1\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |u_2\rangle \equiv \begin{pmatrix} \langle u_1|u_2\rangle \\ \langle u_2|u_2\rangle \\ \langle u_3|u_2\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |u_3\rangle \equiv \begin{pmatrix} \langle u_1|u_3\rangle \\ \langle u_2|u_3\rangle \\ \langle u_3|u_3\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Es decir, es nuestra base canónica, la que estamos tomando como referencia. Por otro lado:

$$\begin{aligned}
\hat{P}_{u_1} &= |u_1\rangle\langle u_1| \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
\hat{P}_{u_2} &= |u_2\rangle\langle u_2| \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
\hat{P}_{u_3} &= |u_3\rangle\langle u_3| \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned}$$

La suma de estas tres matrices nos da la matriz identidad: la relación de cierre!

Por último, vamos a ver cómo se cambia de base un operador. Supongamos que conocemos los elementos de matriz de un operador $\hat{A}$ en una determinada base $\{|u_i\rangle\}$, es decir, los números $A_{ij} = \langle u_i|\hat{A}|u_j\rangle$. Vamos a considerar otra base $\{|v_i\rangle\}$. ¿Cómo estarán relacionados los elementos de matriz en esta nueva base ($\langle v_i|\hat{A}|v_j\rangle$) con los anteriores? Lo que tenemos que hacer es partir de $\langle v_i|\hat{A}|v_j\rangle$, que es lo que queremos conocer, e insertar la relación de cierre de la base $\{|u_i\rangle\}$ tanto a la izquierda como a la derecha del operador $\hat{A}$:

$$\begin{aligned}
\langle v_i|\hat{A}|v_j\rangle &= \sum_l \sum_m \langle v_i|u_l\rangle \langle u_l|\hat{A}|u_m\rangle \langle u_m|v_j\rangle = \sum_{l,m} \langle v_i|u_l\rangle \langle u_l|\hat{A}|u_m\rangle \langle v_j|u_m\rangle^* \\
&= \sum_{l,m} C_{il} A_{lm} C^*_{jm} = \sum_{l,m} C_{il} A_{lm} C^*_{jm}
\end{aligned}$$

Si definimos la matriz de cambio de base como aquella cuyos elementos de matriz son los números $C_{ij} = \langle v_i|u_j\rangle$ y que representan un cierto operador $\hat{C}$, resulta que:

$$\langle v_i|\hat{A}|v_j\rangle = \sum_{l,m} C_{il} A_{lm} C^*_{jm} = \sum_{l,m} C_{il} A_{lm} C^\dagger_{mj}$$

Es decir, que para cambiar la representación del operador $\hat{A}$ lo multiplicamos a la izquierda por la matriz de cambio de base y a la derecha por su adjunta. Este tipo de transformaciones para un operador aparecerá en más ocasiones.

Una demostración sencilla que podemos hacer es que si multiplicamos la matriz de cambio de base por su adjunta nos queda la identidad $\hat{C}\hat{C}^\dagger = \hat{I}$:

$$\sum_k C_{ik} C^\dagger_{kj} = \sum_k C_{ik} C^*_{jk} = \sum_k \langle v_i|u_k\rangle \langle v_j|u_k\rangle^* = \sum_k \langle v_i|u_k\rangle \langle u_k|v_j\rangle = \langle v_i|v_j\rangle = \delta_{ij}$$

En cualquier caso, es evidente ya que si cambiamos la identidad de base sigue siendo la identidad: $\hat{C}\hat{I}\hat{C}^\dagger = \hat{C}\hat{C}^\dagger = \hat{I}$.

Autovalores y autovectores de un operador. Operadores hermíticos.

Los conceptos de autovector y autovalor en nuestro espacio de estados $\mathfrak{E}$ son similares a los análogos que se manejan en el espacio ordinario. Lo único es que por el hecho de que tanto las componentes de los vectores ket como los elementos de matriz de los operadores sean números complejos habrá algunas diferencias. También tenemos el epacio dual $\mathfrak{E}^*$ que nos permitirá introducir de forma análoga el concepto de autovector bra.

Dado un operador $\hat{A}$, diremos que un ket $|\psi\rangle$ es un autovector del operador con autovalor λ si se verifica la siguiente condición:

$$\hat{A}\,|\psi\rangle = \lambda\,|\psi\rangle$$

Esta ecuación se denomina ecuación de autovalores del operador $\hat{A}$ y el conjunto de valores que puede tomar el autovalor λ para que la ecuación anterior tenga solución se denomina espectro de autovalores de $\hat{A}$ o, simplemente, espectro de $\hat{A}$. La primera diferencia consiste en que, en general, los autovalores λ serán números complejos.

Los autovectores están definidos salvo una constante multiplicativa, ya que en la ecuación anterior el ket $|\psi\rangle$ aparece en los dos términos, de modo que si multiplicamos los dos miembros de la ecuación anterior por una constante α queda:

$$\alpha\hat{A}\,|\psi\rangle = \alpha\lambda\,|\psi\rangle\,, \text{ o bien, } \hat{A}\,(\alpha\,|\psi\rangle) = \lambda\,(\alpha\,|\psi\rangle)$$

de modo que el vector $\alpha\,|\psi\rangle$ también es autovector de $\hat{A}$ con el mismo autovalor. Este hecho lo podemos utilizar en ocasiones para normalizar los autovectores, pero siempre nos quedará un factor de fase arbitrario.

Si tomamos el hermítico conjugado de los dos miembros de la ecuación de autovalores de $\hat{A}$ nos queda:

$$\hat{A}\,|\psi\rangle = \lambda\,|\psi\rangle\,, \quad \text{hermítico conjugado} \quad \longrightarrow \quad \langle\psi|\,\hat{A}^\dagger = \langle\psi|\,\lambda^* = \lambda^*\,\langle\psi|$$

Es decir, que el vector bra $\langle\psi|$ es un autovector del operador adjunto $\hat{A}^\dagger$ con autovalor λ^*.

Vamos a ver cómo podemos resolver la ecuación de autovalores. El hecho es que para resolver la ecuación habrá que utilizar una representación concreta. Vamos a utilizar una base ortonormal discreta $\{|u_i\rangle\}$, de modo que las componentes de $|\psi\rangle$ en esta base son los números $\langle u_i|\psi\rangle = c_i$ y el operador $\hat{A}$ está representado por sus elementos de matriz $\langle u_i|\,\hat{A}\,|u_j\rangle = A_{ij}$. Para escribir la ecuación de autovalores en la base $\{|u_i\rangle\}$ multiplicamos ambos miembros por la izquierda por el bra $\langle u_i|$ y utilizamos la relación de cierre de la siguiente forma:

$$\langle u_i|\,\hat{A}\,|\psi\rangle = \sum_j \langle u_i|\,\hat{A}\,|u_j\rangle\,\langle u_j|\psi\rangle = \langle u_i|\,\lambda\,|\psi\rangle = \lambda\,\langle u_i|\psi\rangle$$

Por tanto:

$$\sum_j A_{ij}c_j = \lambda c_i$$

Podemos pasar el término de la derecha a la izquierda e incluir todo dentro del sumatorio con el siguiente truco:

$$\sum_j A_{ij}c_j = \lambda c_i = \sum_j \lambda c_j \delta_{ij} \quad \Longrightarrow \quad \sum_j (A_{ij} - \lambda\delta_{ij})\,c_j = 0$$

Este es un sistema de ecuaciones en el que las incógnitas son las componentes c_j. El sistema de ecuaciones es homogéneo ya que todos los términos aparecen multiplicando a las componentes c_j (no hay términos independientes), de modo que sólo tiene solución si se verifica la siguiente condición:

$$\det\left(A_{ij} - \lambda\delta_{ij}\right) = 0$$

Esta ecuación se denomina ecuación característica del operador $\hat{A}$ y nos permite calcular los autovalores λ. De verificarse esta condición el sistema se convierte en compatible indeterminado. La ecuación anterior a veces la veremos como:

$$\det\left(\hat{A} - \lambda\hat{I}\right) = \left|\hat{A} - \lambda\hat{I}\right| = 0$$

donde para calcular el determinante utilizaremos la matriz que representa al operador $\hat{A}$ y la matriz identidad $\hat{I}$ en cualquier base, ya que el determinante de una matriz no depende de la base.

Vamos a considerar la ecuación característica para un espacio de estados de dimensión finita $\dim\mathfrak{E} = N$:

$$\det\left(\hat{A} - \lambda\hat{I}\right) = \begin{vmatrix} A_{11}-\lambda & A_{12} & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22}-\lambda & \cdots & A_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} & \cdots & A_{NN}-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

Esta ecuación es de grado N para el parámetro λ, por tanto existen en general N soluciones complejas que pueden ser iguales o distintas. Una vez que se ha resuelto la ecuación característica se puede proceder a determinar los autovectores. Pueden ocurrir dos casos: que las N raíces sean distintas o que existan algunas raíces iguales.

En el caso en que todas las raíces sean distintas quiere decir que hay N autovalores distintos y para cada autovalor podemos encontrar el autovector correspondiente. Se dice que los autovalores son simples. Para cada autovalor, la ecuación de autovalores del operador se convierte en un sistema de ecuaciones compatible indeterminado (su determinante es nulo), de modo que, al haber sólamente $N-1$ ecuaciones linealmente independientes, podemos eliminar una de las ecuaciones. De las N incógnitas c_i $(i = 1, 2, \cdots, N)$ dejamos una como parámetro y encontramos el resto en función de esta.

En el caso en el que haya raíces de multiplicidad mayor que la unidad ya no es tan sencillo. Supongamos que hay una raíz doble. Si en la ecuación de autovalores para dicho valor de λ hay solamente $N-2$ ecuaciones linealmente podemos encontrar dos autovectores con el mismo autovalor. Eliminamos las dos ecuaciones que dependan linealmente del resto y dejamos dos de las incógnitas como parámetros. En este caso se dice que el autovalor es doblemente degenerado. Ahora bien, si sólamente tenemos $N-1$ ecuaciones linealmente independientes no podremos encontrar dos autovectores con el mismo autovalor y no podremos diagonalizar el operador $\hat{A}$. Para raíces de mayor multiplicidad ocurre lo mismo.

Un tipo muy importante son los operadores hermíticos, ya que son los únicos que pueden representar a una magnitud física. .

Se dice que un operador $\hat{A}$ es hermítico cuando es igual a su adjunto (también se denominan autoadjuntos):

$$\hat{A} = \hat{A}^\dagger$$

Vamos a ver las propiedades particulares que tienen este tipo de operadores.

- En primer lugar, es fácil ver que sus autovalores son números reales. Si tenemos un autovector $|\psi\rangle$ de autovalor λ, de modo que $\hat{A}\,|\psi\rangle = \lambda\,|\psi\rangle$, podemos construir el siguiente elemento de matriz:

$$\langle\psi|\,\hat{A}\,|\psi\rangle$$

Pues bien, si $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, este elemento de matriz es un número real, ya que coincide con su complejo conjugado:

$$\langle\psi|\,\hat{A}\,|\psi\rangle^* = \langle\psi|\,\hat{A}^\dagger\,|\psi\rangle = \langle\psi|\,\hat{A}\,|\psi\rangle\,, \text{ y además } \langle\psi|\,\hat{A}\,|\psi\rangle = \langle\psi|\,\lambda\,|\psi\rangle = \lambda\,\langle\psi|\psi\rangle$$

Como $\langle\psi|\psi\rangle$ es un número real resulta que λ también tiene que ser real.

- Como consecuencia, si $|\psi\rangle$ es un autovalor de $\hat{A}$ con autovalor λ, el bra correspondiente también es un autovector bra con el mismo autovalor. Basta con tomar el hermítico conjugado de la ecuación de autovalores, teniendo en cuenta que $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ y $\lambda = \lambda^*$:

$$\hat{A}\,|\psi\rangle = \lambda\,|\psi\rangle\,, \quad \text{hermítico conjugado} \quad \longrightarrow \quad \langle\psi|\,\hat{A} = \langle\psi|\,\lambda = \lambda\,\langle\psi|$$

- La última propiedad que vamos a ver es que si $|\psi_1\rangle$ es un autovector de $\hat{A}$ con autovalor λ_1 y $|\psi_2\rangle$ es otro autovector de $\hat{A}$ con un autovalor distinto λ_2, encontes $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$, es decir, que los dos autovectores son ortogonales. La demostración es secilla.

  La premisa es:

$$\left.\begin{array}{l}\hat{A}\,|\psi_1\rangle = \lambda_1\,|\psi_1\rangle \\ \hat{A}\,|\psi_2\rangle = \lambda_2\,|\psi_2\rangle\end{array}\right\}, \text{ con } \lambda_1 \neq \lambda_2$$

  Voy a calcular el siguiente elemento de matriz: $\langle\psi_1|\,\hat{A}\,|\psi_2\rangle$:

$$\langle\psi_1|\,\hat{A}\,|\psi_2\rangle = \lambda_2\,\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \lambda_1\,\langle\psi_1|\psi_2\rangle$$

  donde, en la primera igualdad se ha considerado que $|\psi_2\rangle$ es un autovector de $\hat{A}$ con autovalor λ_2 y en la segunda que $\langle\psi_1|$ es un autovector bra con autovalor λ_1. Si $\lambda_1 \neq \lambda_2$, la única forma de verificar la última igualdad es que $\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0$.