

Notación de índices

Hemos presentado el concepto de matriz densidad de forma general, sin asociarlo a ninguna representación particular dentro de un espacio concreto. El concepto matriz nos sugiere poder representar este objeto en términos de componentes, o números definidos en términos de dos índices abstractos, en una especie de generalización de los índices de una matriz, los cuales usaremos para representar este objeto matemático en términos de objetos que viven en cierto espacio. Primero revisaremos el caso discreto, que resulta más sencillo, y luego nos enfocaremos en el caso continuo, que será más útil en el caso de campos.

1 Índices de un operador discreto

Para la construcción de una representación discreta necesitaremos un espacio de Hilbert, y en particular, requeriremos definir:

Definición 1. (*Espacio de Hilbert separable*) Un espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ diremos que es separable si contiene una base ortonormal numerable $\{e_q\}_{q \in \mathcal{Q}}$.

donde aquí el conjunto $\mathcal{Q}$ simplemente es un conjunto de índices abstracto que etiqueta los elementos de la base. Normalmente usamos números naturales como índices, pero podemos usar cualquier conjunto que queramos pero que sea numerable, es decir, puede ser finito o bien infinito numerable (que pueda haber una correspondencia con los números naturales). Esto nos da una representación de un caso discreto.

Si se considera un espacio de Hilbert separable entonces cualquier vector perteneciente a este espacio de Hilbert puede escribirse en términos de esta base ortonormal. Además, esta base nos permite representar todo operador lineal acotado $O: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ matricialmente, con coeficientes:

$$O[q, q'] = \langle e_q, O e_{q'} \rangle \quad (1)$$

con $q, q' \in \mathcal{Q}$. De este modo, esta definición de índices permite definir el producto de dos operadores A y B de la forma:

$$(AB)[q, q''] = \sum_{q' \in \mathcal{Q}} A[q, q'] B[q', q''] \quad (2)$$

Notemos que aquí $(AB)[q, q'']$ es un número complejo, y no el operador, sin embargo, la colección de números para todo q y q'' , a las que llamaremos componentes, define completamente al operador AB .

Ahora, tomemos el operador identidad $\mathbb{I}$, el cual al aplicarse sobre un vector del espacio de Hilbert siempre devuelve el mismo vector. Con esto

$$\mathbb{I}[q, q'] = \langle e_q, \mathbb{I} e_{q'} \rangle = \langle e_q, e_{q'} \rangle = \delta_{q, q'}, \quad (3)$$

pues los vectores base son ortonormales, y aquí la delta de Kronecker corresponde a:

$$\delta_{q, q'} = \begin{cases} 1 & \text{si } q = q' \\ 0 & \text{si } q \neq q' \end{cases} \quad (4)$$

Al usar este operador en la ecuación (2):

$$(A\mathbb{I})[q, q''] = \sum_{q' \in \mathcal{Q}} A[q, q'] \mathbb{I}[q', q''] \quad (5)$$

2 Índices de un operador continuo

Si un operador tiene un espectro continuo entonces no todos sus autovalores estarían asociados a vectores propios de un espacio de Hilbert separable. Para ello, construiremos vectores generalizados, que viven en un espacio más grande. Para ello, tomemos como índices los valores del espectro de un operador de espectro continuo de interés. Llamaremos a estos índices q como hicimos para el caso discreto. Esta construcción está garantizada a través de una construcción abstracta llamada Rigged Hilbert Space. Así, un operador escrito en esta base continua se escribe $O[q, q']$, donde $q, q' \in \mathcal{Q}$, y aquí $\mathcal{Q}$ es el conjunto de índices abstractos continuos. En este caso, el producto de operadores con estos índices continuos viene dado por

$$(AB)[q, q''] = \int_{\mathcal{Q}} dq' A[q, q'] B[q', q''] \quad (6)$$

Recordemos que el operador identidad $\mathbb{I}$ es tal que $A\mathbb{I} = A$. Usando la notación de producto para el caso continuo:

$$(A\mathbb{I})[q, q''] = \int_{\mathcal{Q}} dq' A[q, q'] \mathbb{I}[q', q'']$$

Este resultado será idéntico si $\mathbb{I}[q', q''] = \delta(q' - q'')$, es decir, la delta de Dirac, la cual no es una función en el sentido usual, sino que es otro objeto matemático llamado distribución. Para algunos detalles acerca de distribuciones ver el Apéndice B.

Adicionalmente a la multiplicación, esta notación con índices nos permite definir la traza de un operador A como:

$$\text{Tr}(A) = \sum_{q \in \mathcal{Q}} A[q, q] \quad (7)$$

si los índices son discretos y

$$\text{Tr}(A) = \int_{\mathcal{Q}} dq A[q, q] \quad (8)$$

si los índices son continuos. Para las construcciones que haremos de aquí en adelante nos centraremos sólo en índices continuos, pero en ambos casos, estas definiciones satisfacen las propiedades de traza.

Ahora, a partir de las representaciones de la identidad mediante el espacio de índices $\mathcal{Q}$, es posible definir un segundo espacio de índices asociado, debido a que para el caso continuo podemos escribir la delta de Dirac en su representación de Fourier:

$$\mathbb{I}[q', q''] = \int_{\mathcal{P}} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar} p(q - q'')} \quad (9)$$

donde hemos denotado por $\mathcal{P}$ el conjunto de los p que conforman este nuevo espacio de índices.

Es importante mencionar que al tomar una representación de Fourier para los índices q , para que esto sea posible, necesitamos que el conjunto de índices $\mathcal{Q}$ sea un espacio medible, es decir, debe estar provisto de una medida μ que permita definir integrales de funciones sobre él. En este punto hay que ser cuidadosos, ya que si nuestros índices son por ejemplo coordenadas pertenecientes a $\mathbb{R}^3$, entonces la medida natural es la medida de Lebesgue d^3x y está bien definida matemáticamente. Sin embargo, si usamos campos $\psi(x)$, en ese espacio que es infinito dimensional no existe una medida matemáticamente definida. Aún con eso, se podrá trabajar de igual forma teniendo en cuenta que es sólo una construcción formal.

Con este nuevo conjunto $\mathcal{P}$, también podemos escribir una identidad usando los índices p de la forma $\mathbb{I}[p', p''] = \delta(p' - p'')$.

Tomemos un observable de un sistema físico de interés Q tal que sus autovalores q definen el espacio de índices $\mathcal{Q}$. Como es un observable, entonces éste es autoadjunto. Usando como índices sus propios autovalores, la forma natural de describir el operador es:

$$Q[q, q'] = q\delta(q - q') \quad (10)$$

Del mismo modo, si tomamos otro observable P tal que sus autovalores p definen el espacio de índices $\mathcal{P}$ que se construye mediante (9), la forma natural de describir ese operador con sus índices p es:

$$P[p, p'] = p\delta(p - p') \quad (11)$$

Escribamos $P[q, q']$, es decir, el operador P con los índices del espacio $\mathcal{Q}$ y calcularemos el conmutador entre los operadores Q y P :

$$(QP)[q, q''] - (PQ)[q, q''] = \int_{\mathcal{Q}} dq' Q[q, q'] P[q', q''] - \int_{\mathcal{Q}} dq' P[q, q'] Q[q', q''] \quad (12)$$

Sin embargo los índices naturales de P son aquellos del espacio $\mathcal{P}$. Para ello, usaremos la identidad con índices q para escribir:

$$P[q', q''] = \int_{\mathcal{Q}} dq \mathbb{I}[q', q] P[q, q''] = \int_{\mathcal{P}} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}pq'} \int_{\mathcal{Q}} dq e^{-\frac{i}{\hbar}pq} P[q, q''] \quad (13)$$

La transformada inversa de Fourier permite escribir esa integral en q como:

$$P[q', q''] = \int_{\mathcal{P}} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}pq'} P[p, q''] \quad (14)$$

Ahora, como P es un observable, debe cumplirse que $P^\dagger = P$, por tanto al trasponer y conjugar la ecuación (14), tenemos que luego de insertar otra identidad $\int_{\mathcal{Q}} dq \mathbb{I}[q'', q]$:

$$\overline{P[q'', q]} = \int_{\mathcal{P}} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}pq''} \int_{\mathcal{Q}} dq \mathbb{I}[q'', q] \overline{P[q, p]} \quad (15)$$

donde en nuestra notación la barra representa la conjugación de un número complejo. Luego, usando la representación de Fourier de la identidad:

$$\overline{P[q'', q]} = \int_{\mathcal{P}} \frac{dp}{2\pi\hbar} \int_{\mathcal{P}} \frac{dp'}{2\pi\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}pq''} e^{\frac{i}{\hbar}p'q''} \overline{P[p', p]} \quad (16)$$

Ahora volvemos a trasponer y conjugar, y usando la ecuación (11):

$$P[q', q''] = \int_{\mathcal{P}} \frac{dp}{2\pi\hbar} p e^{\frac{i}{\hbar}p(q' - q'')} \quad (17)$$

Usando entonces las ecuaciones (10) y (17) en la ecuación (12):

$$(QP)[q, q''] - (PQ)[q, q''] = (q - q'') \int_{\mathcal{P}} \frac{dp}{2\pi\hbar} p e^{\frac{i}{\hbar}p(q - q'')} \quad (18)$$

Podemos reescribir la integral en p en (18) como:

$$\int_{\mathcal{P}} \frac{dp}{2\pi\hbar} p e^{\frac{i}{\hbar}p(q - q'')} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial(q - q'')} \int_{\mathcal{P}} \frac{dp}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}p(q - q'')} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial(q - q'')} \delta(q - q'') \quad (19)$$

Usando (19) en el lado derecho de (18) e integrando por partes se obtiene:

$$(q - q'') \int_{\mathcal{P}} \frac{dp}{2\pi\hbar} p e^{\frac{i}{\hbar} p(q - q'')} = i\hbar \delta(q - q'') \quad (20)$$

Por tanto, podemos reescribir la ecuación (18) como:

$$(QP)[q, q''] - (PQ)[q, q''] = i\hbar \mathbb{I}[q, q''] \quad (21)$$

o en forma de operadores:

$$[Q, P] = i\hbar \mathbb{I} \quad (22)$$

De este modo, la relación entre los operadores Q y P cuyos autovalores definen los dos conjuntos de índices $\mathcal{Q}$ y $\mathcal{P}$ queda determinada por la ecuación (22). Diremos Q y P son variables conjugadas u operadores canónicamente conjugados si esta relación se satisface. Usualmente el Hamiltoniano se escribe en términos de variables conjugadas como éstas, por lo que las relaciones desarrolladas acá serán útiles.