

5 Formalismo General de la mecánica cuántica

5.1 El espacio de Hilbert

En los capítulos anteriores hemos trabajado básicamente con la función de onda compleja de una partícula $\Psi(\mathbf{r}, t)$ donde asumimos que $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r$ era la probabilidad de encontrar en el tiempo t a la partícula en el elemento de volumen d^3r ubicado en \mathbf{r} y dada esta interpretación teníamos que asumir que

$$\int |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3r = 1, \quad (96)$$

es decir, hay certeza de encontrar a la partícula en algún lado.

Esto indica que las funciones candidatas a representar el estado de una partícula son de (módulo al) cuadrado integrable, **conjunto que se denomina \mathcal{L}^2** con una norma (el tiempo es un parámetro en cuántica NR y lo omitimos)

$$\|\psi\| = \sqrt{\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d^3r}$$

que tendrá la estructura de un espacio de Hilbert (espacios vectoriales de dimensión arbitraria), que puede ser en algun caso un conjunto infinito no numerable de funciones de onda (espectro continuo).

Como no puede existir discontinuidad de $\psi(\mathbf{r})$ en un punto, dada su interpretación, deberá ser continua e infinitamente diferenciable. Ya hemos visto que podía ser que la derivada tuviera un salto finito si el potencial tenía un salto infinito, pero para comprobar dicha discontinuidad tendríamos que ir a un punto y los experimentos siempre tiene una precisión diferente de cero. **A este subespacio de \mathcal{L}^2 se lo denomina como \mathcal{F}** . Veamos porque decimos que es un **subespacio vectorial**:

- Si $\psi_1, \psi_2 \in \mathcal{F}, \lambda_{1,2} \in \mathbb{C}$

$$\begin{aligned} \psi &= \lambda_1 \psi_1 + \lambda_2 \psi_2 \Rightarrow \int |\psi(\mathbf{r})|^2 d^3r = |\lambda_1|^2 \int |\psi_1(\mathbf{r})|^2 d^3r + |\lambda_2|^2 \int |\psi_2(\mathbf{r})|^2 d^3r \\ &+ 2 \operatorname{Re} \lambda_1 \lambda_2^* \int \psi_1(\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r})^* d^3r \\ &\leq |\lambda_1|^2 \int |\psi_1(\mathbf{r})|^2 d^3r + |\lambda_2|^2 \int |\psi_2(\mathbf{r})|^2 d^3r + 2 |\lambda_1| |\lambda_2| \int |\psi_1(\mathbf{r}) \psi_2(\mathbf{r})^*| d^3r = \\ &\leq |\lambda_1|^2 \int |\psi_1(\mathbf{r})|^2 d^3r + |\lambda_2|^2 \int |\psi_2(\mathbf{r})|^2 d^3r + 2 |\lambda_1| |\lambda_2| \int |\psi_1(\mathbf{r})| |\psi_2(\mathbf{r})| d^3r \\ (|\psi_1(\mathbf{r})| - |\psi_2(\mathbf{r})|)^2 &\geq 0 \Rightarrow 2 |\psi_1(\mathbf{r})| |\psi_2(\mathbf{r})| \leq |\psi_1(\mathbf{r})|^2 + |\psi_2(\mathbf{r})|^2 \\ \Rightarrow \int |\psi(\mathbf{r})|^2 d^3r &\leq |\lambda_1|^2 \int |\psi_1(\mathbf{r})|^2 d^3r + |\lambda_2|^2 \int |\psi_2(\mathbf{r})|^2 d^3r + |\lambda_1| |\lambda_2| \left(\int |\psi_1(\mathbf{r})|^2 d^3r + \int |\psi_2(\mathbf{r})|^2 d^3r \right) \end{aligned} \quad (97)$$

con lo que la combinación lineal pertenece a \mathcal{F} , pues dicha combinación lineal que es a su vez continua y diferenciable, resulta también de cuadrado integrable. Es decir, \mathcal{F} es cerrado frente a la suma de funciones y producto por escalares.

- Existe un **producto interno**

$$(\phi, \psi) = \int \phi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})d^3r \quad (98)$$

y tiene las siguientes propiedades

1. $(\phi, \psi) = (\psi, \phi)^*$
2. $(\phi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\phi, \psi_1) + \lambda_2(\phi, \psi_2)$ lineal
3. $(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2, \phi) = \lambda_1^*(\psi_1, \phi) + \lambda_2^*(\psi_2, \phi)$ antilineal
4. $\exists \|\psi\| = \sqrt{(\psi, \psi)}$
5. $|(\phi, \psi)| \leq \|\phi\| \times \|\psi\|$ en modulo del producto interno menor que producto de las normas

- Podemos definir **operadores lineales** que actuan dentro del subespacio

$$\begin{aligned} \hat{L} : \mathcal{F} &\rightarrow \mathcal{F} \\ \hat{L}(\lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) &= \lambda_1\hat{L}\psi_1 + \lambda_2\hat{L}\psi_2. \end{aligned} \quad (99)$$

Hasta ahora hemos usado en forma abundante tres operadores, el operador posición

$$\hat{\mathbf{r}}\psi(\mathbf{r}) = \mathbf{r}\psi(\mathbf{r}),$$

el operador derivación

$$\hat{\nabla}\psi(\mathbf{r}) = (\partial_x, \partial_y, \partial_z)\psi(\mathbf{r})(\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla)$$

y sus componentes individuales, y el de paridad

$$\Pi\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r})$$

cuando analizabamos los potenciales simétricos.

Es directo definir la combinación lineal de operadores y el producto

$$\begin{aligned} (\lambda_1\hat{L}_1 + \lambda_2\hat{L}_2)\psi &= \lambda_1\hat{L}_1\psi + \lambda_2\hat{L}_2\psi, \\ \hat{L}_1\hat{L}_2\psi &= \hat{L}_1(\hat{L}_2\psi), \end{aligned}$$

y como podemos multiplicar cambiando el orden es importante conocer el conmutador

$$[\hat{L}_1, \hat{L}_2] = \hat{L}_1\hat{L}_2 - \hat{L}_2\hat{L}_1.$$

- **Bases** : Se denomina base de \mathcal{F} a un conjunto de funciones

$$B = \{u_{\mathcal{I}}(\mathbf{r}), \mathcal{I} \equiv i \in \mathbb{N} \text{ ó } \alpha \text{ continuo ó mixto}\}$$

que cumplen las siguientes condiciones

1. Toda función de \mathcal{F} puede expandirse en la forma

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i u_i(\mathbf{r}) + \int d\alpha c(\alpha) u_\alpha(\mathbf{r})$$

2. $u_i \in \mathcal{F}, u_\alpha \notin \mathcal{F}$ es decir estas últimas no son de cuadrado integrable. Es importante notar que resulta útil introducir bases de cuadrado no integrable pero que no pueden representar estados físicos, sólo pueden ser consideradas como intermediarias. La función que desarrollan sí, debe ser de cuadrado integrable.
3. Son conjuntos ortonormales respecto al producto interno definido arriba

$$\begin{aligned} (u_i, u_j) &= \int u_i^*(\mathbf{r}) u_j(\mathbf{r}) d^3 r = \delta_{ij}, \\ (u_\alpha, u_\beta) &= \int u_\alpha^*(\mathbf{r}) u_\beta(\mathbf{r}) d^3 r = \delta(\alpha - \beta), \\ (u_i, u_\alpha) &= 0. \end{aligned} \quad (100)$$

4. Los coeficientes del desarrollo pueden obtenerse como

$$\begin{aligned} c_i &= (u_i, \psi) = \int u_i^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3 r, \\ c(\alpha) &= (u_\alpha, \psi) = \int u_\alpha^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3 r. \end{aligned} \quad (101)$$

5. El producto escalar entre dos funciones cualesquiera desarrolladas en la misma base puede expresarse como (asumiendo la ortonormalidad de la base)

$$(\phi, \psi) = \sum_i b_i^* c_i + \int d\alpha b(\alpha)^* c(\alpha), \quad (102)$$

$$\phi = \sum_i b_i u_i(\mathbf{r}) + \int d\alpha b(\alpha) u_\alpha(\mathbf{r}) \quad , \quad \psi = \sum_i c_i u_i(\mathbf{r}) + \int d\alpha c(\alpha) u_\alpha(\mathbf{r}) \quad (103)$$

donde la norma es un caso particular

6. Se cumple la relación de clausura

$$\sum_i u_i(\mathbf{r}) u_i^*(\mathbf{r}') + \int d\alpha u_\alpha(\mathbf{r}) u_\alpha^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (104)$$

esto se demuestra escribiendo

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \sum_i \int u_i^*(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 r' u_i(\mathbf{r}) + \int d\alpha \int u_\alpha^*(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 r' u_\alpha(\mathbf{r}) \\ &= \int \left[\sum_i u_i^*(\mathbf{r}') u_i(\mathbf{r}) + \int d\alpha u_\alpha^*(\mathbf{r}') u_\alpha(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}') d^3 r' = \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d^3 r'. \end{aligned}$$

Ejemplos:

a) Comencemos con un problema que tiene como resultado una **base discreta infinita** (conjunto numerable) como lo es el pozo cuadrado infinito unidimensional

$$u_n(x) = \begin{cases} 0, & x < 0 \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen}(n\pi/L), & x \in [0, L], n = 1, 2, 3, \dots \\ 0, & x > L \end{cases} \quad (105)$$

donde obviamente el producto vectorial entre estas funciones y todas las integrales que las involucren quedarán remitidas al intervalo $[0, L]$. Este problema no tiene espectro continuo y entonces la base es puramente discreta.

$$(u_n, u_k) = \int_0^L u_n^*(x) u_k(x) dx = \frac{2}{L} \int_0^L \underbrace{\text{sen} \frac{n\pi}{L} x \text{sen} \frac{k\pi}{L} x}_{-\frac{1}{2} [\cos(\frac{n\pi}{L} + \frac{k\pi}{L})x - \cos(\frac{n\pi}{L} - \frac{k\pi}{L})x]} dx = \frac{\text{sen}(n-k)\pi}{(n-k)\pi} = \begin{cases} 0, & n \neq k \\ 1, & n = k \end{cases} = \delta_{n,k}$$

b) Un 2do ejemplo lo tenemos en el pozo finito de potencial que también hemos discutido donde aquí **la base es mixta**. Para $-U_0 < E < 0$ tendremos la parte discreta de dimensión finita de estados ligados

$$B = \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i k_I, k_{II} x}, k_I = i\sqrt{(2mE/\hbar^2)}, k_{II} = \sqrt{(2m(E+U_0)/\hbar^2)}, E > 0; u_n(x), n = 0, 1, \dots, n_{max}, E_n < 0 \right\}$$

$$u_n(x) = \begin{cases} A e^{\kappa_I x}, & x < 0, \kappa_I = \sqrt{(-2mE_n)/\hbar^2} \\ B \cos k_{II} x, & 0 < x < L, k_{II} = \sqrt{(2m(E_n+U_0))/\hbar^2} \\ C e^{-\kappa_I x}, & x > L \\ B = \frac{\kappa_I + i k_{II}}{2i k_{II}} A, C = (k_{II}^2 + \kappa_I^2) \text{sen} 2k_{II} L / 2k_2 \kappa_I A \end{cases}$$

Donde E_n se obtiene de resolver una ecuación trascendente. Notemos que por ejemplo para el continuo

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (e^{\pm i k_{I,II}(E)x})^* e^{\pm i k_{I,II}(E')x} dx = \delta(k_{I,II}(E) - k_{I,II}(E')) = \frac{\delta(E - E')}{|dk_{I,II}/dE|_{E'}}$$

y que para el discreto tendremos

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} u_n^*(x) u_{n'}(x) dx &= \int_{-\infty}^0 A^* A' e^{(\kappa_I(E_n) + \kappa_I(E_{n'}))x} dx + \int_{-\infty}^0 C^* C' e^{(\kappa_I(E_n) + \kappa_I(E_{n'}))x} dx \\ &+ \int_0^L B^* B' \underbrace{\cos k_{II}(E_n)x \cos k_{II}(E_{n'})x}_{1/2 [\cos[k_{II}(E_n) + k_{II}(E_{n'})]x + \cos[k_{II}(E_n) - k_{II}(E_{n'})]x]} dx \\ &= \frac{A^* A' + C^* C'}{\kappa_I(E_n) + \kappa_I(E_{n'})} + B B' \left[\frac{\text{sen}(k_{II}(E_n) - k_{II}(E_{n'}))L}{2(k_{II}(E_n) - k_{II}(E_{n'}))} + \frac{\text{sen}(k_{II}(E_n) + k_{II}(E_{n'}))L}{2(k_{II}(E_n) + k_{II}(E_{n'}))} \right] \end{aligned}$$

y habrá que ver cuanto da exactamente reemplazando $C, B = f(A)$ de arriba, pero sabemos que si dos autofunciones satisfacen la ec. de Schrödinger y multiplicando cada ecuación por la otra autofunción y restando tendremos

$$\begin{aligned}
-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 u_{n,n'}(x)}{dx^2} + U(x)u_{n,n'}(x) &= E_{n,n'} u_{n,n'}(x) \\
(E_n - E_{n'})u_n u_{n'} &= \hbar^2/2m (u_n d^2 u_{n'}/dx^2 - u_{n'} d^2 u_n/dx^2) \\
\int_{-\infty}^{\infty} (u_n d^2 u_{n'}/dx^2 - u_{n'} d^2 u_n/dx^2) dx &= \underbrace{u_n u_{n'}' - u_{n'} u_n'}_{\rightarrow 0} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \overbrace{(u_n' u_{n'} - u_{n'}' u_n)}^0 dx = 0 \\
\int_{-\infty}^{\infty} (E_n - E_{n'})u_n u_{n'} dx &= 0
\end{aligned}$$

ya que **se cumple que den cero en el infinito pues son estados ligados**, y por lo tanto se ve que serán ortogonales para $n \neq n'$ sin hacer la cuenta en particular.

c) También hemos usado la base continua de ondas planas para construir un paquete de ondas, aquí

$$B = \left\{ u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \right\} \quad (106)$$

que como es bien sabido son autoestados del impulso y no son de cuadrado integrable, sabemos que cualquier función puede desarrollarse en ellas mediante la transformada de Fourier

$$\psi(\mathbf{r}) = \int c(\mathbf{p}) u_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) d^3 p, \quad c(\mathbf{p}) = (u_{\mathbf{p}}, \psi) = \int u_{\mathbf{p}}^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d^3 r,$$

y ya concemos las relaciones de ortogonalidad. Las funciones de esta base representarían estados con un impulso definido. Finalmente teniedo en cuenta que se cumple

$$\psi(\mathbf{r}) = \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \psi(\mathbf{r}_0) d^3 r_0 \quad (107)$$

podríamos introducir una base de estados localizados en un punto

$$B = \{ u_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \}$$

que son funciones reales, de cuadrado no integrable, y el coeficiente del desarrollo sería

$$c(\mathbf{r}_0) = (u_{\mathbf{r}_0}, \psi) = \int \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \psi(\mathbf{r}) d^3 r.$$

Es importante mencionar que tanto los estados de impulso definido como los de una partícula localizada no pueden ser estados físicos de una partícula pues no son de cuadrado integrable y además desde el punto de vista experimental son no realizables debido a la precisión finita de los aparatos de medida. Son idealizaciones de uso matemático intermedio. Así en óptica se utilizan mucho las ondas planas monocromáticas que son imposibles de generar con total exactitud.

Podríamos resumir en forma esquemática lo que hemos visto en la siguiente figura, donde para diferenciar a las bases continuas le asignamos w a la función .

	Base discreta $\{u_i(\mathbf{r})\}$	Base continua $\{w_\alpha(\mathbf{r})\}$
Ortogonalidad	$(u_i, u_j) = \delta_{ij}$	$(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$
Clausura	$\sum_i u_i(\mathbf{r}) u_i^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$	$\int d\alpha w_\alpha(\mathbf{r}) w_\alpha^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$
Completitud	$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i u_i(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \int d\alpha c(\alpha) w_\alpha(\mathbf{r})$
Coefficientes	$c_i = (u_i, \psi) = \int d^3r u_i^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})$	$c(\alpha) = (w_\alpha, \psi) = \int d^3r w_\alpha^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r})$
Producto	$(\varphi, \psi) = \sum_i b_i^* c_i$	$(\varphi, \psi) = \int d\alpha b^*(\alpha) c(\alpha)$
$\ \psi\ ^2$	$(\psi, \psi) = \sum_i c_i ^2$	$(\psi, \psi) = \int d\alpha c(\alpha) ^2$

Figura 19: Bases

5.2 Espacio de estados y notación de Dirac

Hasta el momento hemos dicho que el estado de un sistema está caracterizado por una función de onda de cuadrado integrable. En el caso de una partícula hemos visto que dicha función de onda puede expandirse en diferentes bases y hemos hallado las componentes de dicha función de onda en dichas bases ya sea discreta o continua o mixta. Así como un punto del espacio tridimensional puede tener distintos tipos de coordenadas, cartesianas, esféricas, cilíndricas etc. Podemos pensar que el sistema está descrito por un estado $|\psi\rangle$ (ket) pertenecientes a un espacio abstracto \mathcal{E}_r (correspondiente a sistemas con función de onda) llamado espacio de los estados, cuyas componentes en la base de posición es $\psi(\mathbf{r}_0)$, en la base de impulsos $c(\mathbf{p})$, en la base del pozo c_n etc. Además esto permite generalizar la descripción ($\mathcal{E}_r \rightarrow \mathcal{E}$) a sistemas donde no podemos hacer una descripción con una función de onda dependiente de la posición, sistemas con grados de libertad internos como el espín en experimento de Stern-Gerlach.

Lo que se postula en mecánica cuántica, según Dirac, es que este ket $|\psi\rangle$ contiene la información completa del estado del sistema y todo lo que podemos preguntarnos sobre el sistema estará contenido en el ket.

Veamos como formalizar esto. Para el caso de una partícula descrita completamente por una función de onda $\psi(\mathbf{r})$ tenemos correspondencia uno a uno con un estado $|\psi\rangle$ donde ésta será la componente en una cierta base, $u_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$. O sea \mathcal{F} y \mathcal{E}_r , deberán ser isomórficos. Ahora Definimos el producto interno

$$\begin{aligned} \phi, \psi & \text{ en } \mathcal{F} \longleftrightarrow \begin{pmatrix} |\phi\rangle, |\psi\rangle \\ (\phi), (\psi) \end{pmatrix} \text{ en } \mathcal{E}_r \end{aligned} \quad (108)$$

y tiene las mismas propiedades. O sea le asignamos al producto interno entre dos kets de \mathcal{E}_r un número complejo que es el que daría el producto interno con sus funciones de onda correspondientes.

Así como definimos un isomorfismo

$$\mathcal{F} \rightarrow \mathcal{E}_r, \psi \rightarrow |\psi\rangle, (\phi, \psi) \rightarrow (|\phi\rangle, |\psi\rangle)$$

podemos además y más generalmente definir una funcional lineal

$$\phi : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{C}, \phi(|\psi\rangle) \equiv \langle \phi | \psi \rangle = (|\phi\rangle, |\psi\rangle).$$

O sea con cada estado $|\phi\rangle$ se puede definir un funcional ($f(\overbrace{\mathbf{u}}^{\text{vector}}) \rightarrow \overbrace{c}^{\text{número}}$) $\langle \phi |$ (bra) que asigna al un ket el producto escalar por él $\langle \phi | \psi \rangle$, bracket.

La conexión en el caso particular de sistemas con función de onda es pues,

$$\psi(\mathbf{r}) = (u_{\mathbf{r}}, \psi) \rightarrow (|u_{\mathbf{r}}\rangle, |\psi\rangle) = \langle u_{\mathbf{r}} | \psi \rangle,$$

y hablaremos más sobre esto mas abajo.

Se puede ver que el conjunto de los funcionales tiene la estructura de un espacio vectorial (\mathcal{E}^*) y se denomina dual de \mathcal{E}

$$|\phi\rangle \in \mathcal{E} \rightarrow \langle \phi | \in \mathcal{E}^*. \quad (109)$$

donde toda esta notación fue introducida por Dirac.

Como ya vimos el producto escalar en \mathcal{F} y así en $\mathcal{E}_{\mathbf{r}}$ es antilineal cuando el primer ket es una combinación lineal es decir entonces deberemos tener

$$\begin{aligned} \lambda_1 |\phi_1\rangle + \lambda_2 |\phi_2\rangle &\rightarrow \lambda_1^* \langle \phi_1 | + \lambda_2^* \langle \phi_2 | \\ |\lambda\phi\rangle &= \lambda |\phi\rangle \\ \langle \lambda\phi | &= \lambda^* \langle \phi | \\ \langle \phi | \psi \rangle &= \langle \psi | \phi \rangle^* \\ \langle \psi | \psi \rangle &> 0, \in \mathbb{R}. \end{aligned} \quad (110)$$

Hemos visto que \mathcal{F} y $\mathcal{E}_{\mathbf{r}}$ son isomorfos, y que a cada ket de \mathcal{E} le corresponde un bra de \mathcal{E}^* , **la pregunta que resta hacer es si $\mathcal{E}, \mathcal{E}^*$ son isomorfos?**, es decir si a cada bra le corresponde un ket. Ya hemos visto que aunque una función no sea de cuadrado integrable podemos definir el producto escalar por ella. Por ejemplo

$$\begin{aligned} (u_{\mathbf{p}}, \psi) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r e^{-i\mathbf{p}/\hbar \cdot \mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}), \\ (u_{\mathbf{r}_0}, \psi) &= \int d^3r \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \psi(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (111)$$

es decir podemos definir los bras $\langle u_{\mathbf{p}} \equiv \mathbf{p} |$ $\langle u_{\mathbf{r}_0} \equiv \mathbf{r}_0 |$ porque existe los productos escalares por ellos pero no existirían los kets pues no hay correspondencia en \mathcal{E} con funciones de \mathcal{F} porque no son de cuadrado integrable. Sin embargo podemos asumir que existen kets "generalizados" $|\mathbf{p}\rangle, |\mathbf{r}_0\rangle$ que no podrán representar estados físicos reales porque no podemos generar una partícula con un impulso exacto \mathbf{p} o una posición exacta \mathbf{r} .

5.3 Operadores lineales

Similarmente como lo hicimos en \mathcal{F} , podemos definir operadores lineales $\hat{L} : \mathcal{E} \rightarrow \mathcal{E}$ que tengan propiedades similares. Dada la nueva notación de Dirac podemos llamar **elemento de matriz del operador entre dos estados $|\phi\rangle, |\psi\rangle$ al número**

$$(|\phi\rangle, \hat{L}|\psi\rangle) = \langle\phi|(\hat{L}|\psi\rangle).$$

5.3.1 Ejemplos

Podemos introducir el operador

$$\hat{P}_{\psi\phi} = |\psi\rangle\langle\phi|, \hat{P}_{\phi\psi} = |\phi\rangle\langle\psi|$$

=(aveces denominado producto externo) que sería un operador que genera un ket actuando a izquierda o un bra actuando a derecha da una ket "produciendo una rotación hacia $|\psi\rangle$ " o sea para cualquier $|\chi\rangle$ obtenemos

$$\begin{aligned} \hat{P}_{\psi\phi}(|\chi\rangle) &= |\psi\rangle\langle\phi|\chi\rangle = \langle\phi|\chi\rangle|\psi\rangle, \\ \hat{P}_{\phi\psi}(\langle\chi|) &= \langle\chi|\phi\rangle\langle\psi| = \langle\phi|\chi\rangle^*\langle\psi|. \end{aligned} \quad (112)$$

También podemos introducir un operador importante que es el de proyección para todo ket normalizado que sería

$$\begin{aligned} |\psi\rangle, \quad & \langle\psi|\psi\rangle = 1 \\ P_\psi &= |\psi\rangle\langle\psi|, \end{aligned} \quad (113)$$

que al ser aplicado sobre cualquier otro ket $|\phi\rangle$ satisface

$$P_\psi|\phi\rangle = |\psi\rangle\langle\psi|\phi\rangle = \langle\psi|\phi\rangle|\psi\rangle \quad (114)$$

y

$$\begin{aligned} P_\psi|\psi\rangle &= |\psi\rangle, \\ \langle\phi|\psi\rangle = 0 &\Rightarrow P_\psi|\phi\rangle = 0, \end{aligned}$$

que como sucede con vectores tridimensionales tiene la interpretación geométrica de ser la proyección ortogonal sobre $|\psi\rangle$ y cumple con las propiedades usuales de un proyector

$$P_\psi^2 = P_\psi. \quad (115)$$

También se puede extender esta definición a un subespacio generado por el conjunto ortonormal

$$\{|\psi_i\rangle, i = 1, k \mid \langle\psi_i \mid \psi_j\rangle = \delta_{ij}\}, \mathcal{E}_k = \left\{ \sum_i c_i |\psi_i\rangle \right\},$$

definiendo el proyector sobre \mathcal{E}_k como

$$P_k = \sum_{i=1}^k |\psi_i\rangle \langle\psi_i|, \quad (116)$$

ya que

$$P_k |\phi\rangle = \sum_{i=1}^k \langle\psi_i \mid \phi\rangle |\psi_i\rangle \in \mathcal{E}_k.$$

5.3.2 Acción sobre un bra

Podemos definir para $|\phi\rangle, \hat{L}$ fijos, una nueva funcional de \mathcal{E}^* ,

$$\langle\phi \mid \hat{L} : \mathcal{E} \rightarrow \mathbb{C} \mid (\langle\phi \mid \hat{L}) \mid \psi\rangle = \langle\phi \mid (\hat{L} \mid \psi)\rangle,$$

o sea que $\langle\phi \mid \hat{L}$ es un nuevo bra. Que es una correspondencia lineal es decir

$$(\lambda_1 \langle\phi_1 \mid + \lambda_2 \langle\phi_2 \mid) \hat{L} = \lambda_1 \langle\phi_1 \mid \hat{L} + \lambda_2 \langle\phi_2 \mid \hat{L}, \quad (117)$$

y así estamos definiendo la acción de un operador lineal sobre los bras, y vemos que también es lineal.

Por otro lado es claro a partir de la definición

$$(\langle\phi \mid \hat{L}) \mid \psi\rangle = \langle\phi \mid (\hat{L} \mid \psi)\rangle$$

que meter un paréntesis cuando definimos el elemento de matriz de un operador es irrelevante y entonces directamente ponemos

$$\langle\phi \mid \hat{L} \mid \psi\rangle.$$

Ejemplo: $\hat{P}_{\psi\phi} = |\psi\rangle \langle\phi|$ actuando por derecha sobre un bra da otro bra "rotado hacia $\langle\phi|$ ".

Debemos observar que no siempre $\hat{L} \mid \psi\rangle$ y $\langle\psi \mid \hat{L}$ son uno dual del otro.

5.3.3 Adjunto de un operador

Definido un operador lineal en \mathcal{E} $\hat{L}|\psi\rangle = |\psi'\rangle$ podríamos definir una funcional (**operador adjunto**) en \mathcal{E}^* que genere en correspondiente bra, o sea $\langle\psi|\hat{L}^\dagger = \langle\hat{L}\psi|$

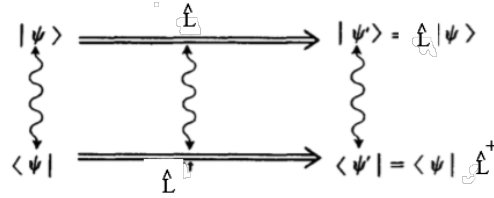


Figura 20: Adjunto de un operador

Esta es una funcional lineal pues

$$\begin{aligned} \hat{L}(\lambda_1^*|\phi_1\rangle + \lambda_2^*|\phi_2\rangle) &= \lambda_1^*|\phi'_1\rangle + \lambda_2^*|\phi'_2\rangle, \\ \lambda_1\langle\phi'_1| + \lambda_2\langle\phi'_2| &= \lambda_1\langle\phi_1|\hat{L}^\dagger + \lambda_2\langle\phi_2|\hat{L}^\dagger, \\ (\lambda_1\langle\phi_1| + \lambda_2\langle\phi_2|)\hat{L}^\dagger &= \lambda_1\langle\phi_1|\hat{L}^\dagger + \lambda_2\langle\phi_2|\hat{L}^\dagger, \end{aligned}$$

donde hemos aplicado la definición del adjunto para pasar de la primera a la segunda ecuación.

Una propiedad importante del producto escalar es que (usando en recién definido adjunto)

$$\begin{aligned} \langle\psi'|\phi\rangle &= \langle\phi|\psi'\rangle^* \\ \langle\psi|\hat{L}^\dagger|\phi\rangle &= \langle\phi|\hat{L}|\psi\rangle^*, \end{aligned} \tag{118}$$

y por lo tanto es necesario observar la notación

$$\begin{aligned} |\lambda\psi\rangle &\equiv \lambda|\psi\rangle, \\ \langle\lambda\psi| &\equiv \lambda^*\langle\psi|, \\ |\hat{L}\psi\rangle &\equiv \hat{L}|\psi\rangle, \\ \langle\hat{L}\psi| &\equiv \langle\psi|\hat{L}^\dagger. \end{aligned} \tag{119}$$

Propiedades del adjunto:

- a) $(\hat{L}^\dagger)^\dagger = \hat{L}$
- b) $(\lambda\hat{L})^\dagger = \lambda^*\hat{L}^\dagger$
- c) $(\hat{L}_1 + \hat{L}_2)^\dagger = \hat{L}_1^\dagger + \hat{L}_2^\dagger$
- d) $(\hat{L}_1\hat{L}_2)^\dagger = \hat{L}_2^\dagger\hat{L}_1^\dagger$ pues $\hat{L}_1\hat{L}_2|\phi\rangle = |\hat{L}_1(\hat{L}_2\phi)\rangle \rightarrow \langle\phi|(\hat{L}_1\hat{L}_2)^\dagger = \langle\hat{L}_1(\hat{L}_2\phi)| = \langle\hat{L}_2\phi|\hat{L}_1^\dagger = \langle\phi|\hat{L}_2^\dagger\hat{L}_1^\dagger, cqd.$
- e) $\langle\hat{L}^\dagger\phi|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{L}\psi\rangle.$

5.3.4 Conjugación hermítica

La operación denominada conjugación hermítica cambia

- constantes por sus complejas conjugadas $\lambda \rightarrow \lambda^*$
- kets por bras y bras por kets $|\psi\rangle \longleftrightarrow \langle\psi|$
- operadores por sus adjuntos $\hat{L} \longleftrightarrow \hat{L}^\dagger$
- orden de los factores, que en el caso de las constantes es indiferente

Ejemplo: $\lambda \langle\phi | \hat{L} | \psi\rangle |\alpha\rangle \langle\beta| \rightsquigarrow |\beta\rangle \langle\alpha| \langle\psi | \hat{L}^\dagger | \phi\rangle^* \lambda^*$

Un operador se dice hermítico si es igual a su adjunto es decir $\hat{L} = \hat{L}^\dagger$ y a nivel de elementos de matriz cumplen con la condición

$$\langle\psi | \hat{L} | \phi\rangle = \langle\phi | \hat{L}^\dagger | \psi\rangle^* = \langle\phi | \hat{L} | \psi\rangle^* \quad (120)$$

un ejemplo trivial de operador hermítico es un proyector $P_\psi = |\psi\rangle \langle\psi|$.

Además notemos que si

$$\begin{aligned} \hat{A} = \hat{A}^\dagger, \hat{B} = \hat{B}^\dagger &\implies (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger = \hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B} - [\hat{A}, \hat{B}] \\ [\hat{A}, \hat{B}] = 0 &\implies (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{A}\hat{B}, \end{aligned}$$

o sea el producto es hermítico si conmutan.

5.4 Autovalores y autovectores de un operador

Decimos que $|\psi\rangle$ es un autovector de \hat{L} si

$$\hat{L}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle, \quad (121)$$

ecuación llamada de autovalores que sólo se cumple para ciertos valores de λ y ciertos $|\psi\rangle$ y al conjunto $\{\lambda_I\}$ se lo llama espectro de \hat{L} .

Notemos que si $|\psi\rangle$ es autovector también lo es $c|\psi\rangle$, con $c \in \mathbb{C}$ y para eliminar esta ambigüedad pedimos que esté normalizado. Aún si está el autoestado $|\psi\rangle$ está normalizado también lo será $e^{i\theta}|\psi\rangle$ pero veremos que de él se obtienen las mismas predicciones físicas.

En general para cada λ existe un conjunto

$$B_\lambda = \left\{ |\psi^i\rangle, i = 1, \dots, g, | \hat{L} |\psi^i\rangle = \lambda |\psi^i\rangle \right\},$$

de estados linealmente independientes ($\sum_i c_i |\psi^i\rangle = 0 \Leftrightarrow c_i = 0$), más aún

$$\mathcal{E}_\lambda = \left\{ \sum_{i=1}^g c_i |\psi^i\rangle \right\},$$

es un subespacio de dimensión g (**degeneración de un autovalor**) de autovalores de \hat{L} con autovalor λ . Cuando $g = 1$ hablamos de un autovalor "simple" o no degenerado.

Ejemplo:

Consideremos el proyector $P_\psi = |\psi\rangle \langle\psi|$ siendo la ecuación de autovalores

$$P_\psi |\phi\rangle = \lambda |\phi\rangle \Rightarrow |\psi\rangle \langle\psi|\phi\rangle = \lambda |\phi\rangle,$$

ahora tenemos dos posibilidades

$$\langle\psi|\phi\rangle = 0 \text{ ó } \langle\psi|\phi\rangle \neq 0$$

- si es cero, tenemos un espacio de autovalores de $\lambda = 0$ de degeneración g infinita o finita formados por todos los ortogonales a $|\psi\rangle$

$$B_0 = \{|\phi\rangle \mid \langle\psi|\phi\rangle = 0\},$$

- si es diferente de cero

$$\begin{aligned} \lambda |\phi\rangle - |\psi\rangle \langle\psi|\phi\rangle &= 0, \\ \langle\psi|\phi\rangle \rightarrow \lambda &= \langle\psi|\psi\rangle = 1, \\ B_1 &= \{|\psi\rangle\}, \end{aligned}$$

y es simple con un sólo autovector ($g = 1$), el mismo $|\psi\rangle$.

Notemos que si realizamos la conjugación hermítica de (121) se obtiene

$$\langle\psi|\hat{L}^\dagger = \langle\psi|\lambda^*, \tag{122}$$

con lo que podríamos decir que el bra $\langle\psi|$ es autovector de autovalor λ^* del adjunto de \hat{L} .

5.5 Representación en una dada base

Una representación del espacio de los estados \mathcal{E} son las componentes (números) de los kets $|\psi\rangle$ en una determinada base (continua, discreta o mixta) de \mathcal{E} , así como también los operadores pueden representarse por matrices calculando los elemento de matriz en dicha base. De esta manera, los cálculos se realizarán en forma matricial.

$$B = \{|u_n\rangle, n \in \mathbb{Z}, |u_\alpha\rangle \alpha \in \mathbb{R}, \langle u_n | u_{n'}\rangle = \delta_{nn'}, \langle u_\alpha | u_{\alpha'}\rangle = \delta(\alpha - \alpha'), \langle u_n | u_\alpha\rangle = 0\},$$

es una base de \mathcal{E} si todo vector puede desarrollarse en ella es decir se satisfacen las relaciones de clausura

$$\hat{I} = \hat{P}_{\{u_n\}} + \hat{P}_{\{u_\alpha\}} = \sum_n |u_n\rangle \langle u_n| + \int d\alpha |u_\alpha\rangle \langle u_\alpha|, \quad (123)$$

donde los coeficientes serán

$$c_n, (\alpha) = \langle u_{n,\alpha} | \psi\rangle = (|u_{n,\alpha}\rangle, |\psi\rangle).$$

Un analogo lo tenemos en \mathbb{R}^3 con $\{B = \hat{\mathbf{e}}_i \equiv \hat{\mathbf{i}}, \hat{\mathbf{j}}, \hat{\mathbf{k}}\}, \mathbf{v} = \sum_i c_i \hat{\mathbf{e}}_i, c_i = \hat{\mathbf{e}}_i \cdot \mathbf{v}$.

Asi como B es una base de \mathcal{E} , B^* obtenida por conjugación hermítica es una base de \mathcal{E}^* .

Podemos ver que las relaciones de clausura nos permiten desarrollar tanto cualquier ket $|\psi\rangle$ como bra $\langle\psi|$, con coeficientes que son complejos conjugados uno de los otros. Normalmente se considera en una dada representación el escribir

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} c_I \\ \vdots \\ \vdots \downarrow \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}, \langle\psi| = \begin{pmatrix} c_I^* & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \rightarrow & & & & \end{pmatrix}, I = n, \alpha. \quad (124)$$

y finalmente si

$$|\psi, \phi\rangle = \sum_n (c_n, b_n) u_n + \int d\alpha (c_\alpha, b_\alpha) u_\alpha,$$

podemos expresar el producto escalar (dada la ortonormalidad de la base) como

$$\langle\phi | \psi\rangle = \sum_n c_n b_n^* + \int d\alpha c_\alpha b_\alpha^* \quad (125)$$

$$\langle\phi | \psi\rangle = \begin{pmatrix} c_I^* & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \rightarrow & & & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_I \\ \vdots \\ \vdots \downarrow \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (126)$$

Cuando queremos representar operadores en una base usamos sus elementos de matriz ya que

$$\begin{aligned}
 \langle \phi | \hat{A} | \psi \rangle &= \langle \phi | \hat{I} \hat{A} \hat{I} | \psi \rangle \\
 &= \left\langle \phi \left| \left(\sum_n |u_{n'}\rangle \langle u_{n'}| + \int d\alpha' |u_{\alpha'}\rangle \langle u_{\alpha'}| \right) \hat{A} \left(\sum_n |u_n\rangle \langle u_n| + \int d\alpha |u_\alpha\rangle \langle u_\alpha| \right) \right| \psi \right\rangle \\
 &= \sum_{n,n'} b_{n'}^* A_{n'n} c_n + \int \int d\alpha' d\alpha b_{\alpha'}^* A_{\alpha'\alpha} c_\alpha \\
 A_{n'n} &= \langle u_{n'} | \hat{A} | u_n \rangle, \quad A_{\alpha'\alpha} = \langle u_{\alpha'} | \hat{A} | u_\alpha \rangle,
 \end{aligned} \tag{127}$$

$\{ u_i\rangle\}$ Discreta	$\{ w_\alpha\rangle\}$ Continua
$\langle u_i u_j \rangle = \delta_{ij}$	$\langle w_\alpha w_{\alpha'} \rangle = \delta(\alpha - \alpha')$
$P_{\{u_i\}} = \sum_i u_i\rangle \langle u_i = \mathbb{1}$	$P_{\{w_\alpha\}} = \int d\alpha w_\alpha\rangle \langle w_\alpha = \mathbb{1}$

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle &= \begin{pmatrix} \langle u_1 | \psi \rangle \\ \langle u_2 | \psi \rangle \\ \vdots \\ \langle u_i | \psi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \alpha \downarrow \begin{pmatrix} \vdots \\ \langle w_\alpha | \psi \rangle \\ \vdots \end{pmatrix} \\
 &\begin{matrix} A_{ij} = \langle u_i | \hat{A} | u_j \rangle \\ A(\alpha, \alpha') = \langle w_\alpha | \hat{A} | w_{\alpha'} \rangle \end{matrix} \\
 &\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1j} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2j} & \dots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ A_{i1} & A_{i2} & \dots & A_{ij} & \dots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} \quad \begin{matrix} \alpha' \\ \left(\dots \dots A(\alpha, \alpha') \dots \right) \\ \alpha \end{matrix}
 \end{aligned}$$

Figura 21: representaciones

la acción de un operador sobre un estado así puede expresarse como

$$\begin{aligned}
 |\psi'\rangle &= \hat{A} |\psi\rangle, \\
 \langle u_I | \psi' \rangle &= \langle u_I | \hat{A} | \psi \rangle \\
 c'_I &= \sum_n A_{In} c_n + \int d\alpha \sum_\alpha A_{I\alpha} c_\alpha, \quad I = n' \text{ ó } \alpha',
 \end{aligned} \tag{128}$$

donde hemos usado la eq.(127) con $|\phi\rangle = |u_I\rangle$.

$$\begin{pmatrix} c'_1 \\ c'_2 \\ \vdots \\ c'_\alpha \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & 0 \\ A_{21} & A_{22} & \dots & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ \vdots & \vdots & A_{\alpha\beta} & \dots \\ \vdots & 0 & \vdots & \vdots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ c_\beta \\ \vdots \end{pmatrix}$$

$$\langle \varphi | \hat{A} | \psi \rangle = (b_1^* \ b_2^* \ \dots \ b_i^* \ \dots) \cdot \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1j} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2j} & \dots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \\ A_{i1} & A_{i2} & \dots & A_{ij} & \dots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ \vdots \\ c_j \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Figura 22: cálculo matricial

De esta manera obtenemos una forma matricial de evaluar en una determinada base.

Finalmente si queremos representar el adjunto de un operador tendremos

$$\begin{aligned} (\hat{A}^\dagger)_{n'n} &= \langle u_{n'} | \hat{A}^\dagger | u_n \rangle = \langle u_n | \hat{A} | u_{n'} \rangle^* = A_{nn'}^* = A_{n'n}^{t*}, \\ (\hat{A}^\dagger)_{\alpha'\alpha} &= A_{\alpha'\alpha}^{t*}, \end{aligned}$$

donde si el operador es hermítico se cumple $A_{n'n} = A_{n'n}^{t*}$ o se la matriz es hermítica con elementos diagonales reales.

5.6 Búsqueda de autovalores

Comencemos suponiendo que \mathcal{E} es de dimensión finita N con lo que tendremos una base discreta $B = \{|u_n\rangle, n = 1, N\}$ el problema de autovalores

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

puede ahora usando la representación en esta base llevarse como es sabido a resolver un sistema y la ecuación característica respectiva (que surge de anular el determinante para buscar soluciones no triviales)

$$\begin{aligned}(A - \lambda I)C &= 0 \\ \det(A - \lambda I) &= 0,\end{aligned}\tag{129}$$

siendo $A, I \in \mathbb{C}^{N \times N}$, $A_{nn'} = \langle u_n | \hat{A} | u_{n'} \rangle$, $C_n = \langle u_n | \psi \rangle$, y es una ecuación polinómica de grado N con dicho número de raíces en general. Luego la búsqueda de los autovectores reemplazando cada valor de λ se hace como en Álgebra o Álgebra Lineal.

Cuando un operador es hermítico, el polinomio tiene soluciones reales como veremos, siendo la multiplicidad de una raíz coincidente con el grado de degeneración y así con la dimensión del subespacio correspondiente a ese λ .

Para los espacios de dimensión infinita uno garantiza que la búsqueda también puede realizarse aunque no podamos demostrarlo.

5.6.1 Operadores Hermíticos y Observables

Los operadores hermíticos tienen propiedades particulares

- Si un operador es hermítico

$$\langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle = \lambda \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle^* = \lambda^* \langle \psi | \psi \rangle, \Rightarrow \lambda = \lambda^*$$

lo que implica que **los autovalores son reales.**

- Además si $\hat{L}|\psi\rangle, |\psi'\rangle = \lambda|\psi\rangle, \lambda'|\psi'\rangle$, como es hermítico

$$\langle \psi' | \hat{L} | \psi \rangle = \lambda \langle \psi' | \psi \rangle, \langle \psi' | \hat{L} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{L} | \psi' \rangle^* = \lambda' \langle \psi | \psi' \rangle^* = \lambda' \langle \psi' | \psi \rangle \Rightarrow (\lambda - \lambda') \langle \psi' | \psi \rangle = 0,$$

por ser $\hat{L} = \hat{L}^\dagger$ y $\lambda' \in \mathbb{R}$, con lo que **si dos autovalores son diferentes los autovectores deben ser ortogonales.**

Cuando asumimos que el espacio de estados era de dimensión finita y un operador es hermítico podemos formar una base de autovectores ya que los que son de autovalores diferentes serán ortogonales y los de cada espacio de degeneración g pueden ortonormalizarse mediante un procedimiento de Gram-Schmidt, además N vectores linealmente independientes en un espacio de dimensión N forman una base porque generan el espacio completo.

Supongamos tener un operador \hat{L} hermítico con un espectro de autovalores $\{\lambda_n, n = 1, 2, \dots, \infty, \lambda(\alpha), \alpha \in (\alpha_1, \alpha_2)\}$ en principio cada autovalor podría tener una degeneración g_n, g_α . Sigue siendo cierto que autovectores correspondientes a diferentes autovalores son ortogonales entre si. Además se pueden normalizar, o sea supongamos que se cumpla

$$\begin{aligned}\langle \psi_n^i | \psi_{n'}^j \rangle &= \delta_{nn'} \delta_{ij}, i, j = 1, \dots, g_{n,n'} \\ \langle \psi_\alpha^i | \psi_{\alpha'}^j \rangle &= \delta(\alpha - \alpha') \delta_{ij}, i, j = 1, \dots, g_{\alpha,\alpha'} \\ \langle \psi_\alpha^i | \psi_n^j \rangle &= 0,\end{aligned}\tag{130}$$

se dice que \hat{L} es un *observable* si son una base, es decir se cumple la relación de clausura

$$\sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |\psi_n^i\rangle \langle \psi_n^i| + \int \sum_{i=1}^{g_\alpha} |\psi_\alpha^i\rangle \langle \psi_\alpha^i| d\alpha = \hat{I}\tag{131}$$

También puede verse que si multiplico (131) por el operador hermítico de que estamos hablando se cumplirá

$$\begin{aligned}\hat{L} = \hat{L}\hat{I} = \hat{L} \left(\sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |\psi_n^i\rangle \langle \psi_n^i| + \int \sum_{i=1}^{g_\alpha} |\psi_\alpha^i\rangle \langle \psi_\alpha^i| \right) &= \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \lambda_n |\psi_n^i\rangle \langle \psi_n^i| + \int d\alpha \sum_{i=1}^{g_\alpha} \lambda(\alpha) |\psi_\alpha^i\rangle \langle \psi_\alpha^i|, \\ \hat{L} &= \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \lambda_n |\psi_n^i\rangle \langle \psi_n^i| + \int d\alpha \sum_{i=1}^{g_\alpha} \lambda(\alpha) |\psi_\alpha^i\rangle \langle \psi_\alpha^i|, \\ \hat{L} &= \sum_n \lambda_n \hat{P}_n + \int d\alpha \lambda(\alpha) \hat{P}_\alpha,\end{aligned}$$

que es la *descomposición espectral de un operador*.

- **Ejemplo 1:**

El proyector sobre un estado normalizado $\hat{P} = |\psi\rangle \langle \psi|$ es hermítico y como cualquier ket puede escribirse como

$$|\phi\rangle = \hat{P}|\phi\rangle + (1 - \hat{P})|\phi\rangle,$$

ahora

$$\hat{P}(\hat{P}|\phi\rangle) = \hat{P}^2|\phi\rangle = \hat{P}|\phi\rangle, \quad \hat{P}\left((1-\hat{P})|\phi\rangle\right) = (\hat{P}-\hat{P})|\phi\rangle = 0 = 0(1-\hat{P})|\phi\rangle,$$

por lo tanto tenemos dos autovalores $\lambda = 0, 1$ y sus autovectores correspondientes $(1-\hat{P})|\phi\rangle, \hat{P}|\phi\rangle$, y en la ecuación anterior comprobamos que son base así que el proyector es un observable.

• **Ejemplo 2:**

Consideremos el caso del átomo de Ag que analizamos al comienzo en el experimento de Stern-Gerlach. La base que usamos es $\{|S_z = +\rangle, |S_z = -\rangle\}$, donde estamos indicando que $+\equiv 1/2, -\equiv -1/2$ y cualquier ket del átomo puede en este experimento expandirse en términos de estos dos estados. Tendremos la relación de clausura

$$\hat{I} = |+\rangle\langle+| + |-\rangle\langle-|,$$

y el desarrollo del observable \hat{S}_z como

$$\begin{aligned} \hat{S}_z &= (\hbar/2)|+\rangle\langle+| - (\hbar/2)|-\rangle\langle-|, \\ \hat{S}_z|+\rangle &= (\hbar/2)|+\rangle, \hat{S}_z|-\rangle = -(\hbar/2)|-\rangle. \end{aligned}$$

Es interesante también introducir los operadores escalera $\hat{S}_\pm = \hbar|\pm\rangle\langle\mp|$ que actuando sobre un autoestado dan $\hat{S}_\pm|\mp\rangle = \hbar|\pm\rangle, \hat{S}_\pm|\pm\rangle = 0$, que no son hermíticos y por lo tanto no son observables. La representación matricial será

$$\begin{aligned} |+\rangle &\equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, |-\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \hat{S}_z &\equiv \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \hat{S}_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \hat{S}_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

de donde puede verse que

$$\frac{\hat{S}_+ + \hat{S}_-}{2} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

y como habíamos postulado $|S_x\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|S_{z+}\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|S_{z-}\rangle$ al comienzo, tendríamos

$$\begin{aligned} |S_x\pm\rangle &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \frac{\hat{S}_+ + \hat{S}_-}{2}|S_x\pm\rangle &= \pm \frac{\hbar}{2}|S_x\pm\rangle, \end{aligned}$$

y por lo tanto tenemos que

$$\frac{\hat{S}_+ + \hat{S}_-}{2} = \hat{S}_x.$$

Ya veremos ésto con mas detalle cuando estudiemos el momento angular.

5.7 Observables que conmutan

Ahora veremos que sentido físico tiene la degeneración de un cierto autovalor y como se hace necesario el introducir otros observables para poder dar una forma adicional de identificar univocamente a los estados que son degenerados. Resumiremos en forma ordenada este punto mediante algunos teoremas.

Teorema I

Si dos operadores \hat{A}, \hat{B} cumplen que $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ y $\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$, es decir $|\psi\rangle$ es autovector de \hat{A} con autovalor a , entonces $\hat{A}\hat{B}|\psi\rangle = a\hat{B}|\psi\rangle$ y $\hat{B}|\psi\rangle$ es autovector de \hat{A} con autovalor a también. Esto es muy fácil de demostrar pues al conmutar \hat{A}, \hat{B} tendremos

$$\hat{A}(\hat{B}|\psi\rangle) = \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle = \hat{B}a|\psi\rangle = a\hat{B}|\psi\rangle.$$

Ahora hay dos casos posibles

- Si $g_a = 1$ entonces necesariamente $\hat{B}|\psi\rangle = b|\psi\rangle$ (es proporcional o "colineal" a $|\psi\rangle$) pues debe pertenecer a \mathcal{E}_a que tiene dimensión 1. Pero eso a su vez demuestra que **también $|\psi\rangle$ es autovector de \hat{B} , no necesariamente con el mismo autovalor a .**
- Si $g_a \neq 1$, entonces $\hat{B}|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{g_a} b_i |\psi^i\rangle$ pues debe pertenecer a \mathcal{E}_a . Por lo tanto $|\psi^i\rangle \in \mathcal{E}_a, \hat{B}|\psi^i\rangle \in \mathcal{E}_a$, y dado que cualquier vector de dicho subespacio se desarrolla en los autovectores base en dicho espacio, por la acción de \hat{B} \mathcal{E}_a es "globalmente" invariante es decir

$$\hat{B} \sum_{i=1}^{g_a} c_i |\psi^i\rangle = \sum_{i=1}^{g_a} c_i \sum_{k=1}^{g_a} b_k^i |\psi^k\rangle = \sum_{k=1}^{g_a} \sum_{i=1}^{g_a} b_k^i c_i |\psi^k\rangle = \sum_{k=1}^{g_a} d_k |\psi^k\rangle.$$

Por lo tanto tenemos como corolario que $\hat{B}\mathcal{E}_a = \mathcal{E}_a$.

Teorema II

Si dos operadores $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, y $\hat{A}|\psi_1\rangle = a_1|\psi_1\rangle, \hat{A}|\psi_2\rangle = a_2|\psi_2\rangle, a_1 \neq a_2 \Rightarrow \langle \psi_1 | \hat{B} | \psi_2 \rangle = 0$. O sea \hat{B} no puede conectar los subespacios $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2$. Esto puede demostrarse calculando el elemento de matriz del conmutador

$$\langle \psi_1 | [\hat{A}, \hat{B}] | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | [\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}] | \psi_2 \rangle = \underbrace{(a_1 - a_2)}_{\neq 0} \langle \psi_1 | \hat{B} | \psi_2 \rangle = 0 \Rightarrow \langle \psi_1 | \hat{B} | \psi_2 \rangle = 0.$$

Teoremas III

Dos observables \hat{A}, \hat{B} (hermíticos y sus autovectores forman base) cumplen $[\hat{A}, \hat{B}] = 0 \iff$ se puede construir una base ortonormal (supongamos la discreta por el momento) de estados que son autovectores comunes a ambos. Supongamos que

$$\begin{aligned}\hat{A}|\psi_n^i\rangle &= a_n|\psi_n^i\rangle, n \in \mathbb{N}, i = 1, \dots, g_n \\ \langle \psi_n^i | \psi_{n'}^{i'} \rangle &= \delta_{nn'}\delta_{ii'},\end{aligned}$$

$$B = \begin{array}{c|cccc} & \mathcal{E}_1 & \mathcal{E}_2 & \mathcal{E}_3 & \dots \\ \hline \mathcal{E}_1 & \text{rayado} & 0 & 0 & 0 \\ \hline \mathcal{E}_2 & 0 & \text{rayado} & 0 & 0 \\ \hline \mathcal{E}_3 & 0 & 0 & \text{rayado} & 0 \\ \hline \vdots & 0 & 0 & 0 & \text{rayado} \end{array}$$

Figura 23: Matriz de un observable que conmuta con otro

donde $g_n = \dim[\mathcal{E}_n]$. Del Teorema II tenemos que

$$\langle \psi_n^i | \hat{B} | \psi_{n'}^{i'} \rangle = 0$$

pero

$$\langle \psi_n^i | \hat{B} | \psi_n^{i'} \rangle \quad \text{no necesariamente lo es,}$$

pues sólo demostramos que era cero para autovectores de autovalores diferentes. Luego la matriz B deberá lucir como en la Fig.(24) donde las partes rayadas corresponden a los elementos de matriz entre los vectores de las bases de \mathcal{E}_n , mientras que los ceros corresponden a elementos de matriz entre autovectores de diferentes autovalores .

Tenemos aquí también dos casos

- Si a_n es no denenerado $g_n = 1$ entonces $\dim[\mathcal{E}_n] = 1$ y solamente tenemos una diagonal numérica en la matriz B y los autovectores de \hat{A} y \hat{B} que son $\mathcal{B} = \{|u_n\rangle\}$ coinciden, siendo ambas matrices diagonales. Dijimos que no necesariamente con los mismos autovalores. Veamos que si escribimos a \hat{B} en dicha base (notemos que B debe ser diagonal)

$$\hat{B} = \sum_{n'} |n'\rangle \langle n'| \hat{B} |n'\rangle \langle n'|,$$

pero esta no es ni mas ni menos que la descomposición espectral y así **el autovalor de \hat{B} correspondiente a $|n\rangle$ es $b_n = \langle n | \hat{B} |n\rangle$.**

- Cuando $g_n \neq 1$ las matrices correspondientes a cada \mathcal{E}_n no son diagonales en B , pero si en A porque $\hat{A}|u_n^i\rangle = a_n|u_n^i\rangle$, $\langle u_n^i | u_n^j \rangle = \delta_{ij}$, $i, j = 1, \dots, g_n$ (para cualquier base ortonormal elegida en \mathcal{E}_n por Gram-Schmidt) y por lo tanto la submatriz debe ser la de la identidad por a_n o sea una matriz diagonal de $g_n \times g_n$ con a_n en la diagonal.

La submatriz de \hat{B} (que es un operador hermítico por ser observable) en cada subespacio \mathcal{E}_n es hermítica

$B_{ij}^n = B_{ji}^{n*}$ y por lo tanto diagonalizable con lo que se puede elegir una nueva base $\{|v_n^i\rangle, i = 1, \dots, g_n\}$ de manera que $B_{ij}^n = b_i^n \delta_{ij}$ lo que significa que $\hat{B}|v_p^n\rangle = b_p^n |v_p^n\rangle$. Por otro lado sigue valiendo $\hat{A}|v_n^i\rangle = a_n |v_n^i\rangle \Rightarrow \langle v_n^i | \hat{A} |v_n^j\rangle = a_n \langle v_n^i | v_n^j\rangle = a_n \delta_{ij}$.

Luego haciendo este procedimiento en cada subespacio \mathcal{E}_n obtenemos una base de \mathcal{E}

$$\begin{aligned} \mathcal{B} &= \{|u_{n,p}^i\rangle, n, p = 1, 2, \dots, i = 1, \dots, g_{n,p}\} \\ \hat{A}|u_{n,p}^i\rangle &= a_n |u_{n,p}^i\rangle, \hat{B}|u_{n,p}^i\rangle = b_p |u_{n,p}^i\rangle, \end{aligned} \quad (132)$$

de autovectores de \hat{A}, \hat{B} a la vez. Notemos que aún podría quedar degeneración cuando diagonalizamos B.

Por otro lado si se cumple (132) entonces para el producto tendremos

$$\begin{aligned} \hat{A}\hat{B}|u_{n,p}^i\rangle &= a_n b_p |u_{n,p}^i\rangle \\ \hat{B}\hat{A}|u_{n,p}^i\rangle &= a_n b_p |u_{n,p}^i\rangle \\ (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|u_{n,p}^i\rangle &= 0 \Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0 \end{aligned}$$

por ser \mathcal{B} una base. Así demostramos la vuelta \Leftarrow .

5.8 Conjunto completo de observables que conmutan (cocooco)

Cuando un observable \hat{A} tiene un espectro de autovalores no degenerado entonces para cada autovalor su autovector queda perfectamente definido ya que la dimensión de cada \mathcal{E}_n es 1 y por lo tanto existe una única base de \mathcal{E} $\mathcal{B} = \{|u_n\rangle, n = 1, 2, \dots\}$ compuesta por autovectores de \hat{A} , por lo tanto **decimos que $\{\hat{A}\}$ forma él sólo un cocooco.**

Cuando el espectro de \hat{A} es degenerado podemos tener varias bases diferentes en cada \mathcal{E}_n , a pesar de que cada una corresponde a un único autovalor, y por lo tanto no podemos definir solamente con dicho operador una base para \mathcal{E} y así no forma un cocooco. Si podemos agregar otro observable \hat{B} que conmute con \hat{A} y por el procedimiento descrito anteriormente generar una única base de los autovalores a_n, b_p . **Así, $\{\hat{A}, \hat{B}\}$ forman un cocooco.**

Si para al menos un par de autovalores a_n, b_p tenemos varios autovectores con degeneración g_{np} , estaremos en la misma situación y deberemos buscar un tercer operador \hat{C} que diagonalizaremos en \mathcal{E}_{np} para así obtener una única base y así **$\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}\}$ formarán un cocooco** y así podríamos seguir.

En resumen:

Por definición un conjunto de observables $\{\hat{A}, \hat{B}, \dots\}$ es llamado conjunto completo de observables que conmutan si:

- Si conmutan de a pares
- Si especificando autovalores para todos estos operadores se determina un único autovector (no degenerado). Otra manera de decirlo es que existe una única base para el espacio de kets formada con autovectores comunes a ellos. Siempre consideramos dos bases, donde los autovectores de una son una constante por la otra, como iguales.

- Normalmente hablamos de un conjunto "mínimo" de observables donde al quitar uno ya deja de ser completo, es decir la base no queda especificada.
- Normalmente la notación usada es que $|a_n, b_p, c_k, \dots\rangle$ es el autoestado correspondiente a los autovalores a_n, b_p, c_k, \dots respectivamente.
- Cuando tenemos un $\hat{L} = \hat{A} + \hat{B} + \hat{C} + \dots$ los autovectores mencionados tienen autovalores $a_n + b_p + c_k + \dots$
- Normalmente para un cierto sistema físico pueden existir varios cococo.

Ejemplos:

Los operadores $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}$ que son hermíticos por ser observables que satisfacen el problema de autovalores

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{r}}|\mathbf{r}\rangle &= \mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle \\ \hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}\rangle &= \mathbf{p}|\mathbf{p}\rangle,\end{aligned}\tag{133}$$

en realidad estamos hablando de tres operadores en cada caso $\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}$ y $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$ y los autoestados $|\mathbf{r}\rangle = |xyz\rangle, |\mathbf{p}\rangle = |p_x p_y p_z\rangle$ y las bases por separado $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ y $\{|\mathbf{p}\rangle\}$ en las cuales se puede desarrollar $\mathcal{E}_{\mathbf{r}}$.

De esto vemos que como además $[\hat{x}_i, \hat{x}_j] = 0$ ó $[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0$ entonces $\{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}\}$ ó $\{\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z\}$ forman por separado cada uno un cococo.

También por ejemplo como $[\hat{x}, \hat{p}_{y,z}] = 0$ entonces $\{\hat{x}, \hat{p}_y, \hat{p}_z\}$ podrían formar un cococo porque una base de autovalores $|xp_y p_z\rangle$ queda perfectamente definida ya que como veremos se le puede asociar una función de onda perfectamente definida. Además los autovectores de $\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}$ generan una representación importante, cumpliendo las siguientes propiedades

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}' \rangle &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') & \text{(a)} & & \langle \mathbf{p} | \mathbf{p}' \rangle &= \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') & \text{(c)} \\ \int d^3r |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}| &= \mathbb{1} & \text{(b)} & & \int d^3p |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| &= \mathbb{1} & \text{(d)}\end{aligned}$$

de ortonormalidad y completitud, y ahora vemos como son las componentes de un ket y el producto escalar

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r} | \psi \rangle &= \psi(\mathbf{r}) \\ \langle \mathbf{p} | \psi \rangle &= \psi(\mathbf{p}) \\ |\psi\rangle &= \int d^3r |\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \\ |\psi\rangle &= \int d^3p |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p} | \psi \rangle \\ \langle \varphi | \psi \rangle &= \int d^3p \langle \varphi | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \psi \rangle \\ &= \int d^3p \varphi^*(\mathbf{p}) \psi(\mathbf{p})\end{aligned}$$

y los elementos de matriz de un operador arbitrario

$$\langle \mathbf{r}' | A | \mathbf{r} \rangle = A(\mathbf{r}', \mathbf{r}), \quad \langle \mathbf{p}' | A | \mathbf{p} \rangle = A(\mathbf{p}', \mathbf{p})$$

$$A(\mathbf{p}', \mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3} \int d^3r \int d^3r' e^{i(\mathbf{p}'\cdot\mathbf{r} - \mathbf{p}\cdot\mathbf{r}')} A(\mathbf{r}', \mathbf{r})$$

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \hat{p}_x | \psi \rangle &= \int d^3r' \langle \varphi | \mathbf{r}' \rangle \langle \mathbf{r}' | \hat{p}_x | \psi \rangle \\ &= \int d^3r \varphi^*(\mathbf{r}) \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right] \psi(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

y también podemos probar la hermiticidad matemáticamente

$$\begin{aligned} \langle \varphi | \hat{x} | \psi \rangle &= \int d^3r \varphi^*(\mathbf{r}) x \psi(\mathbf{r}) \\ &= \left[\int d^3r \psi^*(\mathbf{r}) \hat{x} \varphi(\mathbf{r}) \right]^* \\ &= \langle \psi | \hat{x} | \varphi \rangle^* \\ \langle \varphi | \hat{p}_x | \psi \rangle &= \frac{\hbar}{i} \int dy dz \int_{-\infty}^{+\infty} dx \varphi^*(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial x} \psi(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\hbar}{i} \int dy dz \left\{ \left[\varphi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \right]_{x=-\infty}^{x=+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial x} \varphi^*(\mathbf{r}) \right\} \\ \langle \varphi | \hat{p}_x | \psi \rangle &= -\frac{\hbar}{i} \int d^3r \psi(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial x} \varphi^*(\mathbf{r}) \\ &= \left[\frac{\hbar}{i} \int d^3r \psi^*(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial x} \varphi(\mathbf{r}) \right]^* \\ &= \langle \psi | \hat{p}_x | \varphi \rangle^* \end{aligned}$$

5.9 Producto tensorial de espacios

Producto de vectores

Existen problemas importantes que requieren de este concepto matemático. Por ejemplo construir espacios tridimensionales a partir de unidimensionales es decir \mathcal{E}_r a partir de $\mathcal{E}_{x,y,z}$, el problema de describir una partícula con grados de libertad internos como el espín, donde tenemos que combinar \mathcal{E}_r con \mathcal{E}_s (el espacio de kets que describen partículas de cierto espín), el problema de separación de variables cuando el Hamiltoniano es suma de partes que dependen c/u de cierta coordenada, y los sistemas de dos o más partículas. Por esta razón aprenderemos a usar ésta herramienta matemática del producto tensorial de espacios.

Supongamos por simplicidad tener dos espacios $\mathcal{E}_{1,2}$ de dimensión finita $N_{1,2}$. Definamos

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$$

como el espacio vectorial de kets

$$|\psi(1)\rangle \otimes |\psi(2)\rangle \equiv |\psi(1)\rangle |\psi(2)\rangle \equiv |\psi(1)\psi(2)\rangle$$

donde cada factor pertenece a uno de los espacios factores del producto, siendo el orden irrelevante. Se cumplen las siguientes propiedades

- El producto tensorial es lineal respecto a una combinación lineal de estados es decir

$$\begin{aligned} (\alpha |\phi(1)\rangle + \beta |\chi(1)\rangle) \otimes |\psi(2)\rangle &\equiv \alpha |\phi(1)\rangle \otimes |\psi(2)\rangle + \beta |\chi(1)\rangle \otimes |\psi(2)\rangle \\ |\psi(1)\rangle \otimes (\alpha |\phi(2)\rangle + \beta |\chi(2)\rangle) &\equiv \alpha |\psi(1)\rangle \otimes |\phi(2)\rangle + \beta |\psi(1)\rangle \otimes |\chi(2)\rangle. \end{aligned} \quad (134)$$

- Supongamos que $\{|u_i(1)\rangle\}$, $\{|v_k(2)\rangle\}$ son bases de $\mathcal{E}_{1,2}$ respectivamente entonces $\{|u_i(1)\rangle |v_k(2)\rangle\}$ es base del espacio producto de dimensión $N_1 \times N_2$. Así, si tenemos vectores desarrollados separadamente como

$$|\psi(1)\rangle = \sum_i a_i |u_i(1)\rangle, |\phi(2)\rangle = \sum_k b_k |v_k(2)\rangle,$$

entonces el producto tensorial queda desarrollado como

$$|\psi(1)\rangle |\phi(2)\rangle = \sum_{i,k} a_i b_k |u_i(1)\rangle |v_k(2)\rangle, \quad (135)$$

y los coeficientes del producto de dos vectores en la base producto es el producto de los coeficientes en cada base.

- Pueden existir estados arbitrarios que no se obtienen como resultado del producto de dos vectores pero que si pueden desarrollarse en la base producto

$$|\psi\rangle = \sum_{i,k} c_{i,k} |u_i(1)\rangle |v_k(2)\rangle,$$

pero donde $c_{i,k}$ no es el producto de las componentes de otros dos vectores.

- El producto escalar interno del espacio producto se define como

$$\langle \psi'(1)\phi'(2) | \psi(1)\phi(2) \rangle = \langle \psi'(1) | \psi(1) \rangle \langle \phi'(2) | \phi(2) \rangle, \quad (136)$$

donde se cumplen las propiedades del producto por cumplirse la linealidad del producto tensorial. Además según esta definición la base producto es ortonormal

$$\langle u_i(1)v_k(2) | u_{i'}(1)v_{k'}(2) \rangle = \langle u_i(1) | u_{i'}(1) \rangle \langle v_k(2) | v_{k'}(2) \rangle = \delta_{ii'}\delta_{kk'}.$$

Producto tensorial de operadores

Supongamos tener operadores lineales $\hat{A}(1) : \mathcal{E}_1 \rightarrow \mathcal{E}_1, \hat{B}(2) : \mathcal{E}_2 \rightarrow \mathcal{E}_2$ podemos definir un operador lineal que es el producto de operadores como $\hat{A}(1) \otimes \hat{B}(2) \equiv \hat{A}(1)\hat{B}(2) : \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2 \rightarrow \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$ siendo su acción

$$\left[\hat{A}(1)\hat{B}(2) \right] \left[|\psi(1)\rangle |\phi(2)\rangle \right] = \left[\hat{A}(1) |\psi(1)\rangle \right] \left[\hat{B}(2) |\phi(2)\rangle \right] \quad (137)$$

donde también puede introducirse usando la anterior definición, la extensión de un operador que actúa en el espacio producto como

$$\tilde{A}(1) = \hat{A}(1)\hat{I}(2), \tilde{B}(2) = \hat{I}(1)\hat{B}(2),$$

y donde también se puede ver que :

- $\hat{A}(1) \otimes \hat{B}(2) = \tilde{A}(1) \times \tilde{B}(2)$ donde \times que es el producto o composición ordinaria de operadores.
- $\left[\tilde{A}(1), \tilde{B}(2) \right] = 0$ ya que actuando sobre cualquier estado producto dará un producto de vectores en orden cambiado restandose pero como el producto tensorial es conmutativo entonces dará cero.
- El proyector sobre un producto de estados se obtiene multiplicando tensorialmente los proyectores sobre cada estado

$$|\psi(1)\phi(2)\rangle \langle \psi(1)\phi(2)| = |\psi(1)\rangle \langle \psi(1)| |\phi(2)\rangle \langle \phi(2)| \quad (138)$$

la cual puede demostrarse apoyandose en la definición de producto escalar.

Autovalores y autovectores dentro del producto tensorial

Supongamos tener un espacio $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$ supongamos tener un observable $\hat{A}(1)$ con una base de autovectores $\mathcal{B}(1) = \{|\psi_n^i(1)\rangle, n = 1, 2, 3, \dots, i = 1, \dots, g_i\}$, si ahora queremos resolver el problema de autovectores de la extensión $\hat{A}(1)\hat{I}(2) \equiv \hat{A}(1)$ en \mathcal{E}

$$\hat{A}(1)|\phi\rangle = \lambda|\phi\rangle,$$

si elegimos una base cualquiera $\mathcal{B}(2) = \{|\xi_k(2)\rangle, k = 1, 2, 3, \dots\}$ de \mathcal{E}_2 entonces $\mathcal{B}(1) \otimes \mathcal{B}(2) = \{|\phi_n^{i,k}\rangle \equiv |\psi_n^i(1)\rangle |\xi_k(2)\rangle\}$ es una base de \mathcal{E} como vimos ya antes y además se cumple $\hat{A}(1)|\phi_n^{i,k}\rangle = \hat{A}(1)|\psi_n^i(1)\rangle |\xi_k(2)\rangle = \hat{A}(1)\hat{I}(2)|\psi_n^i(1)\rangle |\xi_k(2)\rangle = a_n |\psi_n^i(1)\rangle |\xi_k(2)\rangle = |\phi_n^{i,k}\rangle$. Además

$$\sum_{n,i,k} |\phi_n^{i,k}\rangle \langle \phi_n^{i,k}| = \sum_{n,i} |\psi_n^i(1)\rangle \langle \psi_n^i(1)| \sum_k |\xi_k(2)\rangle \langle \xi_k(2)| = \hat{I}(1)\hat{I}(2) = \hat{I}, \quad (139)$$

esto nos dice que $\hat{A}(1)$ seguirá siendo un observable en \mathcal{E} , pero ahora la base de autovectores tendrá degeneración $g_n \times N_2$.

Usualmente nos encontramos con la necesidad de resolver el problema de autovalores y autovectores para operadores de la forma

$$\hat{H} = \hat{h}(1) + \hat{h}(2),$$

donde $\hat{h}(1, 2)$ son observables en cada espacio vectorial $\mathcal{E}_{1,2}$ con bases (supongamos no degeneradas por simplicidad)

$$\mathcal{B}(1, 2) = \left\{ |\psi_n(1)\rangle | \hat{h}_1 |\psi_n(1)\rangle = \epsilon_n |\psi_n(1)\rangle, |\phi_p(2)\rangle | \hat{h}_2 |\phi_p(2)\rangle = \mu_p |\phi_p(2)\rangle, n, p = 1, 2, \dots \right\},$$

respectivamente y dado que conmutan $\mathcal{B}(1) \otimes \mathcal{B}(2)$ será una base de las extensiones $\hat{h}(1)\hat{I}(2)$, $\hat{I}(1)\hat{h}(2)$ y entonces si pensamos a

$$\hat{H} = \hat{h}(1)\hat{I}(2) + \hat{I}(1)\hat{h}(2) : \mathcal{E} \rightarrow \mathcal{E},$$

ahora se cumplirá

$$\hat{H} |\psi_n(1)\rangle |\phi_p(2)\rangle = (\epsilon_n + \mu_p) |\psi_n(1)\rangle |\phi_p(2)\rangle, \quad (140)$$

donde si no existen $n', p' | (\epsilon_n + \mu_p) = (\epsilon_{n'} + \mu_{p'})$ no tendremos degeneración y así \hat{H} será un observable, y formaría un cococo, con la base producto porque para cada $\lambda_{n,p} = \epsilon_n + \mu_p$ existe un estado definido de la base. Sin embargo cuando no se cumple ésto tendremos que cada $\lambda = \epsilon_n + \mu_p = \epsilon_{n'} + \mu_{p'}$ tiene asociado un autovector

$$|\lambda\rangle = \alpha |\psi_n(1)\rangle |\phi_p(2)\rangle + \beta |\psi_{n'}(1)\rangle |\phi_{p'}(2)\rangle, \quad (141)$$

doblemente degenerado y que podrían no ser vectores productos. Así no sería un cococo.

Cocooco en el espacio producto

Es importante notar que si tenemos en cada espacio $\mathcal{E}_{1,2}$ respectivos cocooco podemos formar uno para $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 \otimes \mathcal{E}_2$ multiplicando las bases de c/u de ellos supongamos que

$$\hat{A}(1) |\psi_n(1)\rangle = a_n |\psi_n(1)\rangle,$$

y que dicho operador forma un cocooco en el espacio 1, y que además

$$\begin{aligned} \hat{B}(2) |\phi_{p,q}(2)\rangle &= b_p |\phi_{p,q}(2)\rangle, \\ \hat{C}(2) |\phi_{p,q}(2)\rangle &= c_p |\phi_{p,q}(2)\rangle, \end{aligned}$$

forman un cocooco en el espacio 2, **ahora las extensiones $\hat{A}(1)\hat{I}(2) \equiv \hat{A}(1)$, $\hat{I}(1)\hat{B}(2) \equiv \hat{B}(2)$, $\hat{I}(1)\hat{C}(2) \equiv \hat{C}(2)$ forman un cocooco en \mathcal{E}** siendo su base en común

$$\begin{aligned} \mathcal{B} &= \{|\psi_n(1)\phi_{p,q}(2)\rangle = |\psi_n(1)\rangle |\phi_{p,q}(2)\rangle\} \\ \hat{A}(1) |\psi_n(1)\phi_{p,q}(2)\rangle &= a_n |\psi_n(1)\phi_{p,q}(2)\rangle, \\ \hat{B}(2) |\psi_n(1)\phi_{p,q}(2)\rangle &= b_p |\psi_n(1)\phi_{p,q}(2)\rangle, \\ \hat{C}(2) |\psi_n(1)\phi_{p,q}(2)\rangle &= c_p |\psi_n(1)\phi_{p,q}(2)\rangle, \end{aligned} \tag{142}$$

ya que para cada conjunto de autovalores $\{a_n, b_p, c_q\}$ existe un "único" autovector $|\psi_n(1)\phi_{p,q}(2)\rangle$, con lo que forman un cocooco.

Ejemplos

- Podemos pensar que $\mathcal{E}_{\mathbf{r}} = \mathcal{E}_x \otimes \mathcal{E}_y \otimes \mathcal{E}_z$ donde si tenemos que $\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle$, $\hat{y}|y\rangle = y|y\rangle$, $\hat{z}|z\rangle = z|z\rangle$, ahora formamos $|\mathbf{r}\rangle = |x\rangle|y\rangle|z\rangle = |xyz\rangle$. Así tendremos para la función de onda de un estado localizado

$$\langle \mathbf{r} | \mathbf{r}_0 \rangle = \delta(x - x_0)\delta(y - y_0)\delta(z - z_0),$$

o para un ket arbitrario el desarrollo

$$|\psi\rangle = \int \int \int dx dy dz \psi(x, y, z) |xyz\rangle$$

y además pueden existir estados producto $|\psi\phi\chi\rangle$ tal que **la función de onda es producto en diferentes coordenadas $\langle \mathbf{r} | \psi\phi\chi \rangle = \psi(x)\phi(y)\chi(z)$, esto lo usamos en separación de variables.**

Finalmente tenemos diferentes cocooco que se pueden formar con las extensiones al espacio producto $\{\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}\}$, $\{\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z\}$, $\{\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{z}\}$, etc. Un ejemplo de lo que vimos antes con la suma es tener por ejemplo el hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}), U(\mathbf{r}) = U_1(x) + U_2(y) + U_3(z),$$

allí podemos resolver

$$-(\hbar^2/2m)\partial_i^2\psi_{n_i}(x_i) = E_{n_i}^i\psi_{n_i}(x_i)$$

y así tendremos una base de autovectores $|\psi_{n_x}^x \psi_{n_y}^y \psi_{n_z}^z\rangle$ y autovalores $E_{n_x+n_y+n_z} = E_{n_x}^x + E_{n_y}^y + E_{n_z}^z$. Obviamente \hat{H} es un observable pero no formará sólo un cocococo si hay degeneración.

- Otro ejemplo importante es cuando tenemos que tratar por ejemplo con un sistema de dos partículas sin espín . Allí podemos obtener el espacio del sistema como producto de los espacios de cada una

$$\mathcal{E}_{\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2} = \mathcal{E}_{\mathbf{r}_1} \otimes \mathcal{E}_{\mathbf{r}_2},$$

con una base $|\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2\rangle = |\mathbf{r}_1\rangle |\mathbf{r}_2\rangle$ con lo que cualquier estado podrá desarrollarse como

$$|\psi\rangle = \int \int d^3r_1 d^3r_2 \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) |\mathbf{r}_1\mathbf{r}_2\rangle$$

y ahora la función de onda $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ da la amplitud de encontrar a la partícula 1 en \mathbf{r}_1 y la 2 en \mathbf{r}_2 (pensando que se pueden distinguir) . Un estado del sistema producto $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle |\psi_2\rangle$ tiene como función de onda el producto entre las funciones de onda de cada partícula y decimos que no hay "correlación " entre ambas.

5.10 Cambios de base

Cuando dos observables \hat{A}, \hat{B} conmutan se dice que son compatibles y es posible construir una base de autoestados común a ambos. Cuando $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ se dicen incompatibles. Veamos primero un ejemplo. Si recordamos el experimento de Stern y Gerlach vimos que

$$\begin{aligned} |S_x \pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle, \\ |S_y \pm\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |+\rangle \pm i \frac{1}{\sqrt{2}} |-\rangle, \end{aligned}$$

en la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$ de autoestados de \hat{S}_z de espines "up" or "down" y podríamos definir los operadores $\hat{S}_{x,y,z}$ correspondientes a las diferentes componentes de spin del átomo de plata. Conviene como ya vimos introducir los llamados operador escalera

$$\hat{S}_+ |+\rangle = 0, \hat{S}_+ |-\rangle = \hbar |+\rangle \Rightarrow \hat{S}_+ = \hbar |+\rangle \langle -|, \hat{S}_- = \hat{S}_+^\dagger = \hbar |-\rangle \langle +|,$$

$$\begin{aligned} \hbar \frac{\hat{S}_+ + \hat{S}_-}{2} &= \hat{S}_x, \\ -i\hbar \frac{\hat{S}_+ - \hat{S}_-}{2} &= \hat{S}_y, \end{aligned}$$

y así para $\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$ tendremos

$$\begin{aligned} \hat{S}^2 &= \frac{\hat{S}_+^2 + \hat{S}_-^2}{4} + \frac{\hat{S}_+ \hat{S}_- + \hat{S}_- \hat{S}_+}{4} - \frac{\hat{S}_+^2 + \hat{S}_-^2}{4} - \frac{-\hat{S}_+ \hat{S}_- - \hat{S}_- \hat{S}_+}{4} + \hat{S}_z^2 = \frac{\hat{S}_+ \hat{S}_- + \hat{S}_- \hat{S}_+}{2} + \hat{S}_z^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{2} [|+\rangle \langle +| + |-\rangle \langle -|] + \frac{\hbar^2}{4} \hat{I} = \frac{3\hbar^2}{4} \hat{I}, \end{aligned}$$

de donde es evidente que $[\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0$. Sin embargo ya sabemos a partir de la experiencia de Stern-Gerlach (cuando colocamos imanes ortogonales) y matemáticamente, que por ejemplo

$$\begin{aligned} [\hat{S}_x, \hat{S}_z] &= (\hbar^2/4) [(|+\rangle \langle -| + |-\rangle \langle +|), (|+\rangle \langle +| - |-\rangle \langle -|)] = \\ &= (\hbar^2/4) (-2 |+\rangle \langle -| + 2 |-\rangle \langle +|) = -i\hbar \hat{S}_y \neq 0, \end{aligned}$$

o sea son incompatibles.

Supongamos tener **dos observables incompatibles** \hat{A}, \hat{B} que tienen asociada una base de autovectores $\mathcal{A} = \{|a\rangle\}, \mathcal{B} = \{|b\rangle\}$ respectivamente. Por ejemplo correspondientes a \hat{S}_z y \hat{S}_x . **Podemos desarrollar el espacio de estados en cualquiera de estas dos bases y quisiéramos ver como estas dos descripciones están relacionadas.** Es

decir como hacer un cambio e base o de representación. Podemos plantear el siguiente teorema, para el caso discreto de dimensión finita

Teorema Dados dos conjuntos base \mathcal{A}, \mathcal{B} (completos y ortonormales), existe un operador unitario \hat{U} que conecta ambas bases

$$|b_n\rangle = \hat{U} |a_n\rangle \quad n = 1, \dots, N, \quad (143)$$

que el operador sea unitario significa que

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = \hat{I},$$

o se que su adjunto es el operador inverso. Este teorema puede demostrarse por construcción es decir proponemos que dicho operador es

$$\begin{aligned} \hat{U} &= \sum_k |b_k\rangle \langle a_k| \\ \hat{U} |a_n\rangle &= \sum_k |b_k\rangle \langle a_k | a_n\rangle = \sum_k |b_k\rangle \delta_{nk} = |b_n\rangle, \end{aligned}$$

notemos que ambos indices **n y k van desde 1 hasta N pues la dimensión es la misma**. Además puede demostrarse facilmente la unitariedad a partir de la conjugación hermítica

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \left(\sum_k |b_k\rangle \langle a_k| \right) \left(\sum_{k'} |a_{k'}\rangle \langle b_{k'}| \right) = \sum_k |b_k\rangle \langle b_{k'}| \delta_{kk'} = \sum_k |b_k\rangle \langle b_k| = \hat{I},$$

usando ortonormalidad y completitud de las bases.

Siendo \hat{U} un operador, tiene una representación matricial cuyos elementos de matriz en \mathcal{A} son

$$\langle a_{k'} | \hat{U} | a_k \rangle = \langle a_{k'} | b_k \rangle, \quad (144)$$

donde hemos usado la acción de \hat{U} sobre un ket. Asi dado un ket cualquier $|\psi\rangle$ desarrollado en \mathcal{A} podemos expresarlo en \mathcal{B} usando la matriz de cambio de base(144) . Así tendremos en \mathcal{A}

$$|\psi\rangle = \sum_n \langle a_n | \psi \rangle |a_n\rangle,$$

mientras que en \mathcal{B} los coeficientes son

$$\langle b_n | \psi \rangle = \sum_k \langle b_n | a_k \rangle \langle a_k | \psi \rangle = \sum_k \langle a_n | \hat{U}^\dagger | a_k \rangle \langle a_k | \psi \rangle,$$

que matricialmente se escribe

$$\mathcal{C}_B = \mathcal{U}^\dagger \mathcal{C}_A. \quad (145)$$

Esto nos recuerda a la relación entre las componentes de un vector frente a la rotación de ejes en el espacio ordinario \mathbb{R}^3

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{i} \cdot \hat{i}' & \hat{i} \cdot \hat{j}' & \hat{i} \cdot \hat{k}' \\ \hat{j} \cdot \hat{i}' & \hat{j} \cdot \hat{j}' & \hat{j} \cdot \hat{k}' \\ \hat{k} \cdot \hat{i}' & \hat{k} \cdot \hat{j}' & \hat{k} \cdot \hat{k}' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}.$$

a su vez también pueden cambiarse los elementos de matriz de cualquier operador a la nueva base

$$\begin{aligned} \langle b_n | \hat{O} | b_k \rangle &= \langle b_n | \left(\sum_{n'} |a_{n'}\rangle \langle a_{n'}| \right) \hat{O} \left(\sum_{k'} |a_{k'}\rangle \langle a_{k'}| \right) | b_k \rangle \\ &= \sum_{n', k'} \langle a_n | \hat{U}^\dagger | a_{n'} \rangle \langle a_{n'} | \hat{O} | a_{k'} \rangle \langle a_{k'} | \hat{U} | a_k \rangle, \end{aligned}$$

que matricialmente se escribe

$$\mathcal{O}_B = \mathcal{U}^\dagger \mathcal{O}_A \mathcal{U}. \quad (146)$$

Una propiedad importante es que la traza de un operador \hat{O} en una dada representación definida como la suma de los elementos diagonales de la matriz del operador

$$\text{tr}(\hat{O}) = \sum_n \langle a_n | \hat{O} | a_n \rangle,$$

es independiente de la representación elegida o sea

$$\begin{aligned} \text{tr}(\hat{O}) &= \sum_{n, k, k'} \langle a_n | (|b_k\rangle \langle b_k|) \hat{O} (|b_{k'}\rangle \langle b_{k'}|) | a_n \rangle \\ &= \sum_{n, k, k'} \langle b_k | \hat{O} | b_{k'} \rangle \mathcal{U}_{k'n}^\dagger \mathcal{U}_{nk} = \sum_{k, k'} \langle b_k | \hat{O} | b_{k'} \rangle \delta_{k, k'} = \sum_k \langle b_k | \hat{O} | b_k \rangle. \end{aligned}$$

Algunas propiedades adicionales son

- $\text{tr}(\hat{A}\hat{B}) = \text{tr}(\hat{B}\hat{A})$
- $\text{tr}(\hat{U}^\dagger \hat{O} \hat{U}) = \text{tr}(\hat{O})$

- $tr(|a_n\rangle\langle a_{n'}|) = \delta_{nn'}$
- $tr(|b_n\rangle\langle a_{n'}|) = \langle a_{n'} | b_n \rangle$

Diagonalización

Supongamos que queremos encontrar los autovalores y autovectores de un operador \hat{O} y que contamos con una base del espacio donde actúa \hat{O} que denominamos $\mathcal{B} = \{|a_n\rangle\}$ y que además conocemos los elementos de matriz del operador en dicha base. O sea queremos resolver el problema

$$\hat{O}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle,$$

donde si usamos la clausura de la base $\hat{I} = \sum_n |a_n\rangle\langle a_n|$ tendremos

$$\begin{aligned} \langle a_{n''} | \hat{O} \left(\sum_{n'} |a_{n'}\rangle\langle a_{n'}| \right) |\lambda\rangle &= \lambda \langle a_{n''} | \lambda\rangle \\ \sum_{n'} \langle a_{n''} | \hat{O} |a_{n'}\rangle \langle a_{n'} | \lambda\rangle &= \lambda \langle a_{n''} | \lambda\rangle, \end{aligned}$$

que podría escribirse en forma matricial

$$\begin{aligned} OC &= \lambda C, \\ O_{ij} &= \langle a_i | \hat{O} |a_j\rangle, C_i = \langle a_i | \lambda\rangle, \end{aligned} \tag{147}$$

donde $i, j = 1, N$ siendo N la dimensión del espacio, O es de $N \times N$ y C de $N \times 1$.

La ecuación lineal

$$(O - \lambda I)C = 0,$$

con incógnitas C_i tendrá soluciones no triviales si

$$\det(O - \lambda I) = 0,$$

lo que conduce al polinomio característico cuyas raíces son los autovalores. Luego poniendo cada λ_i en (147) resolviendo el sistema se obtienen las componentes $C_j^i, j = 1, N$ de cada autovector a menos de una constante que se fija imponiendo normalización del autoestado.

Los elementos $C_j^i = \langle j | \lambda_i \rangle$ son justamente los de la matriz cambio de base de $\{|a_n\rangle\} \rightarrow \{|\lambda_n\rangle\}$ que estudiamos antes. El requisito para poder hacer la diagonalización el operador debe ser hermítico. Un ejemplo de operador no hermítico es \hat{S}_\pm y su matriz correspondiente no podrá ser diagonalizada.

Para terminar mencionemos una propiedad importante. Supongamos tener una base $\mathcal{B} = \{|a_n\rangle\}$ y otra $\mathcal{B}' = \{|b_n\rangle\}$ conectadas por el operador $\hat{U} = \sum_k |b_k\rangle \langle a_k|$ definido previamente. Ahora podemos construir una **transformación unitaria** que actúa sobre un observable cualquiera \hat{O} del espacio en consideración

$$\hat{U}\hat{O}\hat{U}^{-1} = \hat{U}\hat{O}\hat{U}^\dagger$$

que es llamado el **equivalente unitario de \hat{O}** . Lo que puede verse es si tenemos un autovalor λ de \hat{O} que cumple

$$\hat{O}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle,$$

entonces

$$\begin{aligned}\hat{U}\hat{O}\hat{U}^{-1}\hat{U}|\lambda\rangle &= \lambda\hat{U}|\lambda\rangle, \\ (\hat{U}\hat{O}\hat{U}^{-1})|\omega\rangle &= \lambda|\omega\rangle, |\omega\rangle = \hat{U}|\lambda\rangle,\end{aligned}$$

o sea **ambos operadores unitariamente equivalentes tienen el mismo espectro de autovalores**. Un ejemplo de esto son \hat{S}_z y \hat{S}_x que pueden conectarse por una rotación que es una operación unitaria y como ya vimos antes ambos operadores tienen el mismo espectro $\pm\frac{\hbar}{2}$.