APÈNDIX 2: ESPAIS DE HILBERT

ESPAI PREHILBERTIÀ

Un espai *prehilbertià* és un espai vectorial amb un producte *escalar al camp complex* $(\vec{x},\vec{y}) = \vec{x}.\vec{y} \in C$ que compleix:

a) $(\vec{y},\vec{x}) = (\vec{x},\vec{y})^*$.
b) $(\vec{z},\vec{x}+\vec{y}) = (\vec{z},\vec{x}) + (\vec{z},\vec{y})$.
c) $(\vec{x},\lambda\vec{y}) = \lambda(\vec{x},\vec{y})$.
d) $\vec{x} \neq \vec{0} \Rightarrow (\vec{x},\vec{x}) > 0$.

Convencionalment hom troba als textos la propietat *c)* següent: $c)\ (\lambda\vec{x},\vec{y}) = \lambda(\vec{x},\vec{y})$. Tanmateix, nosaltres hem canviat l'esmentada propietat per adaptar-la al formulisme que figura als llibres de text sobre física quàntica.

És immediat demostrar que

$$(\lambda\vec{x},\vec{y}) = \lambda^*(\vec{x},\vec{y})$$
$$(\vec{x}+\vec{y},\vec{z}) = (\vec{x},\vec{z}) + (\vec{y},\vec{z})$$

En conseqüència, el producte escalar aquí definit *és una forma lineal respecte del segon vector i antilineal respecte del primer vector.*

Si n és la dimensió de l'espai vectorial i tenim n vectors ortonormals, aquests són una base vectorial ortonormal i qualsevol vector s'expressa així a partir d'ells:

$$\vec{x} = \sum_k (\vec{e}_k,\vec{x}).\vec{e}_k$$

Si un vector és unitari, es compleix

$$\sum_k |(\vec{e}_k,\vec{x})|^2 = 1$$

OPERADORS LINEALS

L'expressió d'un vector en una base vectorial es pot escriure matricialment

$$\vec{x} = (\vec{e}_1, \dots, \vec{e}_n).\begin{pmatrix} x^1 \\ . \\ . \\ . \\ x^n \end{pmatrix} = (e).(x)$$

, on *(e)* és una matriu fila i *(x)* una matriu columna.

Un endomorfisme és una aplicació interna que verifica

$$T(\vec{x} + \vec{y}) = T(\vec{x}) + T(\vec{y}) \qquad T(k\vec{x}) = kT(\vec{x})$$

A partir d'ara un endomorfisme rebrà el nom d'*operador lineal o, simplement, operador.*

Un operador lineal actua sobre una base vectorial, segons

$$(Te)=(e).M$$

on M és la matriu *nxn* representativa de l'operador lineal T.

L'operador lineal T actua sobre un vector a través de la seva matriu M:

$$T(\vec{x}) = (e).M.(x)$$

Davant d'un canvi de base vectorial $(e')=(e).A$, els components d'un vector canvien, segons $(x)=A.(x')$. D'aquí es comprova que la matriu M' representativa del *mateix* operador lineal en la nova base vectorial val

$$M'=A^{-1}.M.A$$

Les matrius lligades amb la relació anterior representen el *mateix operador* en dues bases vectorials diferents i diem que són *equivalents.*

La paraula *representació* té molts significats i hem acabat de veure el concepte de *matriu representativa d'un operador lineal.* Vegem ara una altra de les accepcions que utilitzarem sovint. El conjunt d'operadors d'un espai vectorial forma un grup mitjançant l'operació de la composició. Si establim un morfisme entre un grup

G i un grup O d'operadors d'un espai vectorial E_n, direm que *O és una representació del grup G de dimensió n.* Tot això serà desenvolupat a bastament més tard.

Anem a veure ara alguns operadors especials (s'entendrà que les propietats es verifiquen *per a tot* el conjunt de vectors).

Anomenem operador *adjunt de T* l'operador T^+ que compleix la propietat $(\vec{x}, T\vec{y}) = (T^+\vec{x}, \vec{y})$.

La matriu representativa de T^+ és la matriu conjugada de la matriu transposada de T-> $T^+ = \tilde{T}^*$, on hem representat amb el mateix símbol l'operador i la seva matriu representativa.

És immediat comprovar les propietats

$$T^{++} = T \quad (A+B)^+ = A^+ + B^+ \quad k^+ = k^* \quad (A.B)^+ = B^+.A^+$$

Un operador *unitari* verifica $(U\vec{x}, U\vec{y}) = (\vec{x}, \vec{y})$ i la seva matriu representativa s'anomena *unitària.*

Fàcilment hom comprova que, si un operador U és unitari, $U^+ = U^{-1}$ i recíprocament. Si A i B són operadors unitaris, també ho és $A.B$.

Un operador H *autoadjunt* o *hermític* compleix $H=H^+$. La seva matriu s'anomena *hermítica* i té la propietat $H = \tilde{H}^*$.

El producte de dos operadors hermítics és hermític, si i només si $[A,B]=AB-BA=0$. $[A,B]$ *és* el *commutador d'A i B.*

Si H és un operador hermític, $U=exp(iH)$ és unitari i recíprocament.

Finalment, una matriu és *ortogonal,* si verifica $\tilde{M} = M^{-1}$.

VECTORS I VALORS PROPIS D'UN OPERADOR LINEAL

Donat un operador T, un vector $\vec{v}$ que compleixi $T(\vec{v}) = \lambda.\vec{v}$, on λ és un escalar, s'anomena *vector propi* de l'operador i λ és el *valor propi* corresponent a aquest vector.

Un valor propi pot correspondre a un conjunt de vectors propis linealment independents. Aleshores diem que aquell valor propi és *degenerat.*

Es comprova fàcilment *que els valors propis d'un operador hermític són reals i que dos vectors propis d'un operador hermític amb valors propis diferents són ortogonals*.

Si l'espai vectorial és de dimensió finita, existeixen valors propis d'un operador ja que *T(x)=k.(x)->(T-k.I)(x)=0* i, si volem una solució no trivial, es verificarà

$$det(T-k.I)=0$$

Aquesta és *l'equació secular.* Es tracta d'una equació polinòmica de grau *n,* on *n* és la dimensió de l'espai vectorial. Al cos dels nombres complexos aquesta equació té exactament *n* solucions, diferents o no.

Ara bé, si la dimensió de l'espai no és finita, no tot operador té valors propis i, si en té, aquests no són necessàriament una base de l'espai vectorial. Tanmateix, el conjunt de vectors propis d'un operador hermític n'és sempre una base vectorial.

ESPAI DE HILBERT

A partir del *mòdul d'un vector* definim la *distància* entre dos vectors, $d(\vec{x},\vec{y}) = \left|\vec{x} - \vec{y}\right|$, que verifica:

a) $d(\vec{x},\vec{y}) > 0 \; si \; \vec{x} \neq \vec{y}; d(\vec{x},\vec{y}) = 0 \Rightarrow \vec{x} = \vec{y}$.

b) $d(\vec{x},\vec{y}) = d(\vec{y},\vec{x})$.

c) $d(\vec{x},\vec{z}) \leq d(\vec{x},\vec{y}) + d(\vec{y},\vec{z})$.

Amb la distància entre vectors hem donat a l'espai vectorial l'estructura d'*espai mètric.* En aquest espai mètric podem definir successions de vectors. Una successió vectorial $(\vec{x}_1,...,\vec{x}_m,...)$ podrà ser de *Cauchy*, convergent, divergent, etc. Sabem que tota successió convergent és una successió de *Cauchy*, però el recíproc no és cert, en general. L'espai mètric és *complet,* si tota successió vectorial de *Cauchy* és una successió convergent. En aquest cas l'espai vectorial és un *espai de Hilbert*. Un espai de *Hilbert* és un *espai mètric complet* i, per tant, és un espai de *Banach*.

Aquest espai vectorial té característiques diferents de l'espai tetradimensional estudiat fins ara, sovint serà *un espai funcional d'infinites dimensions* i el producte escalar de dues funcions *f(x)* i *g(x)* valdrà

$$(f,g) = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*.g.dx$$

LA FUNCIÓ DELTA DE DIRAC

Al capítol 4, quan parlem dels parèntesis de *Poisson*, ens trobem *la funció delta de Dirac* tridimensional. Anem ara a trobar una representació analítica d'ella en una dimensió i fer-ne després l'extensió a tres dimensions.

La funció *delta de Dirac* $\delta(x)$ verifica

$$\delta(x) = 0,\ si\ x \neq 0,\ i \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x).dx = 1 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x-a).f(x).dx = f(a)$$

i es demostra que es pot representar per

$$\delta(x) = lim_{g\to\infty} \frac{1}{2\pi}\int_{-g}^{g} exp(ixt)dt = lim_{g\to\infty} \frac{singx}{\pi x}$$

Definim ara les funcions e_k amb paràmetre *k:*

$$e_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} exp(ikx)$$

A partir d'elles obtenim el valor de la integral corresponent al producte escalar definit abans

$$(e_n, e_m) = \delta(m-n)$$

Aquest resultat ens permet definir l'ortonormalitat de les funcions e_k, indexades amb el paràmetre *continu k,* amb ajut de la delta de *Dirac* i és la generalització del concepte d'ortonormalitat amb la delta de *Kronecker* quan tenim paràmetres discrets.

Mitjançant un canvi de variable és immediat veure que les funcions e_k (amb $\hbar = h/2\pi$)

$$e_k = \frac{1}{\sqrt{h}}.exp(ikx/\hbar)$$

també són ortonormals amb la delta de *Dirac*.

Amb les funcions de tres variables $f(\vec{r})$ definim

$$\delta(\vec{r}) = 0,\ si\ \vec{r} \neq \vec{0},\ i \int_V \delta(\vec{r}).dx.dy.dz = 1$$

Anàlogament, tenim per al producte escalar

$$(f,g) = \int_V f^*.g.dx.dy.dz$$

Amb l'anterior definició de producte escalar les funcions

$$e_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3}} exp(i\vec{k}.\vec{r}) \qquad e_{\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{h^3}} exp(i\vec{k}.\vec{r} \,/\, \hbar)$$

són ortonormals amb la delta de *Dirac*.

Podem evitar l'anterior, si definim les funcions dins d'un volum *V* finit i els imposem condicions adients de contorn. Aleshores el paràmetre *k serà discret* i podrem elegir un factor de proporcionalitat perquè les noves funcions siguin ortonormals amb la delta de *Kronecker*.

CONJUNT COMPLET DE VECTORS

En física quàntica treballarem amb operadors hermítics que actuaran sobre els vectors d'un espai de *Hilbert*. Cada operador hermític tindrà un conjunt de vectors propis ortonormal on $(\vec{v}_m, \vec{v}_n)$ valdrà δ_{mn} o $\delta(m-n)$ per a valors discrets o continus, respectivament. Aquest conjunt de vectors suposarem que és *complet,* amb la qual cosa volem significar que qualsevol vector es podrà obtenir mitjançant l'expansió

$$\vec{x} \equiv \bar{\sum_s} (\vec{v}_s, \vec{x}).\vec{v}_s$$

, on el sumatori s'ha d'interpretar com a suma per als valors discrets i com a integral a través de ds per als valors continus.

A partir de les funcions e_k *i* $e_{\vec{k}}$ *vistes amb anterioritat* podrem, doncs, trobar l'expansió de $f(x)$ *o* $f(\vec{r})$ on, per simplificar, hem fet les definicions necessàries:

$$F(k) = (e_k, f) \qquad F(\vec{k}) = (e_{\vec{k}}, f)$$

$$F(k)=\int f(x).e_k^*.dx \qquad F(\vec{k})=\int f(\vec{r}).e_{\vec{k}}^*.d^3x$$

$$f(x)=\int F(k).e_k.dk \qquad f(\vec{r})=\int F(\vec{k}).e_{\vec{k}}.d^3k$$

Amb aquesta expansió feta a partir de les funcions e_k *ans esmentades* direm que *f(x)* i *F(k)* són les funcions *transformades de Fourier* de l'altra i podem dir el mateix de $f(\vec{r})$ i $F(\vec{k})$.

TEOREMES SOBRE CONJUNTS COMPLETS DE VECTORS

Si A i B són dos operadors hermítics, $[A,B]=0 \Leftrightarrow$ *existeix un conjunt complet de vectors propis comuns a A i B.*

Si un vector està normalitzat i fem la seva expansió a partir d'un conjunt complet ortonormal de vectors propis,

$$\vec{x}=\sum_k^{-} a_k.\vec{e}_k=\sum_k^{-}(\vec{e}_k.\vec{x}).\vec{e}_k \quad amb \quad \sum_k^{-}|(\vec{e}_k.\vec{x})|^2=1$$

, podrem definir la probabilitat de cada valor propi discret (o la densitat de probabilitat, si els valors propis són continus):

$P(k)=|a_k|^2$, on a_k és *l'amplitud de probabilitat*

Si $\vec{X}$ no està normalitzat, el quocient entre els valors esmentats seran les probabilitats o densitats de probabilitat relatives en relació a dos valors propis.

A partir de tot l'anterior, tindrem per a cada vector $\vec{x}$ una *distribució de probabilitat* del conjunt de valors propis de l'operador *T.* Les probabilitats o densitats de probabilitat corresponents a cada valor propi es deduiran dels components a_k obtinguts de la seva expansió en la base $\vec{e}_k$ de vectors propis. D'aquí podrem calcular la mitjana $<T>_{\vec{x}}$ i la desviació típica $\Delta_{\vec{x}}T$ del conjunt dels valors propis d'un operador *T* per a un vector $\vec{x}$ concret.

Es comprova finalment que

$$<T>_{\vec{x}}=(\vec{x},T\vec{x})$$

Cada operador hermític ens donarà un conjunt de vectors propis diferent *en general*, excepte si $[A,B]=0$. Tindrem distintes expansions per a cada vector i diferents representacions vectorials, a partir dels canvis corresponents de base vectorial. En cada representació tindrem un espai probabilístic concret referent als valors propis dels distints operadors.

És fàcil veure que, si es fa un canvi d'una base vectorial ortonormal a una altra d'ortonormal, la matriu de canvi de base serà unitària.

Elegida una representació amb la base ortonormal de vectors propis d'un operador *T,* podem per a cada operador *X* i cada parella de vectors propis de *T* obtenir $(\vec{e}_m, X\vec{e}_n)$. Aquest conjunt de valors seran una *representació* de l'operador *X* en la base corresponent a *T* i ens donarà l'acció de l'operador *X* sobre la base de vectors propis de *T* expressada en aquesta mateixa base.

Ordenant els valors anteriors matricialment tindrem, en el cas d'un espectre numerable de valors propis, una *representació matricial* de l'operador *X*. Si $T = X$, la representació anterior serà diagonal i els termes de la diagonal coincidiran amb els valors propis de *T.*

Si els valors propis d'un operador *X* són continus, tindrem l'expansió d'un vector $\vec{\varphi}$ a partir de la representació fixada pels vectors propis $\vec{e}_x$ de *X:*

$$\vec{\varphi} = \int (\vec{e}_x, \vec{\varphi}).\vec{e}_x.dx = \int \varphi(x).\vec{e}_x.dx \quad amb \quad \varphi(x) = (\vec{e}_x, \vec{\varphi})$$

És important adonar-nos que $\varphi(x) \neq \vec{\varphi}$. La funció $\varphi(x)$ *representarà* el vector $\vec{\varphi}$ i $|\varphi(x)|^2$ serà la densitat de probabilitat per al valor *x*.

Es verificarà finalment que

$$probabilitat(a \leq x \leq b) = \int_a^b |\varphi(x)|^2.dx$$

$$amb \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(x)|^2 = 1$$

ESPECTRE CONTINU Q-P

Si dos operadors verifiquen [*Q,P*]=constant$\neq 0$, l'espectre de valors propis d'ambdós operadors és continu.

Si la constant anterior l'expressem en la forma $i.\hbar$ amb $\hbar = h/2\pi$ i obtenim per a un vector $\vec{\varphi}$ les desviacions típiques corresponents als dos operador *Q* i *P*, resulta finalment

$$\left[Q,P\right] = i.\hbar \Rightarrow \Delta_{\vec{\varphi}}Q.\Delta_{\vec{\varphi}}P \geq \hbar \;/\; 2$$

L'anterior ens indica que, si una distribució està molt centrada, l'altra ho estarà poc. És important adonar-nos que les dues darreres conclusions són una conseqüència purament matemàtica, sense cap significat apriorístic aliè.

Quina és la relació entre els dos operadors *Q* i *P* anteriors?

Com afecta cada operador les seves funcions representatives $\varphi(q)$ i $\varphi(p)$?

Suposem la representació $\varphi(q)$ donada pels vectors propis $\vec{e}_q$ de l'operador *Q.* És fàcil comprovar que *Q* actua sobre $\varphi(q)$ multiplicant-la per *q* i que *P* ho fa mitjançant l'operador derivatiu $P = -i\hbar\partial \;/\; \partial q$.

A la representació $\varphi(p)$ amb els vectors propis $\vec{e}_p$ de l'operador *P* aquest actua sobre $\varphi(p)$ multiplicant-la per *p* mentre que el *Q* ho fa mitjançant $i\hbar\partial \;/\; \partial p$.

Finalment es verifica que $\varphi(q)$ i $\varphi(p)$ són cadascuna la funció transformada de *Fourier* de l'altra.

TRANSFORMACIONS

Hem vist abans que davant d'un canvi de base vectorial com *(e')=(e).A* els components d'un vector canviaven d'acord amb l'expressió *(x)=A.(x')* i la matriu representativa d'un operador segons $T'=A^{-1}.T.A.$ És important veure que aquí *no han canviat ni els vectors ni els operadors, sinó únicament les seves expressions, d'acord amb la representació.*

Anem ara a definir un *canvi* o *transformació* dels vectors i dels operadors ($\vec{x} \rightarrow \vec{x}' \;\; T \rightarrow T'$), mitjançant un operador *U,* que verifiqui per a *tots* els vectors i operadors:

$$\vec{x}' = U\vec{x} \qquad (\vec{x}, T\vec{y}) = (\vec{x}', T'\vec{y}')$$

D'aquí es dedueix:

a) *U* és *unitari.*

b) $T=U^{+}.T'.U=U^{-1}.T'.U.$

c) Si $[A,B]=k \Rightarrow [A',B']=k.$

d) Les expressions dels vectors i operadors transformats en la base vectorial transformada són invariants i, per tant, els valors propis, mitjanes etc. corresponents als vectors i operadors transformats també romanen invariants.

SOBRE LA NOMENCLATURA QUÀNTICA

Representarem un vector $\vec{x}$ pel *ket* $|x\rangle$ i un *bra* $\langle x|$ representarà *una forma lineal dual* del vector $\vec{x}$ que verificarà

$$\langle x|(\vec{y}) = (\vec{x},\vec{y}) = \langle x|y\rangle$$

(la nomenclatura anterior té la seva procedència en el mot anglès "*bracket*" que significa *claudàtor*).

El significat de $\langle x|T|y\rangle$ serà $(\vec{x},T\,\vec{y}) = (T^{+}\vec{x},\vec{y})$.

L'expressió $\langle x|y\rangle|x\rangle$ és la projecció del ket $|y\rangle$ sobre el ket $|x\rangle$ i la podem reescriure com $|x\rangle\langle x\|y\rangle$, on $|x\rangle\langle x|$ serà l'operador que actuant sobre $|y\rangle$ el projectarà en la direcció de $|x\rangle$.

Ens cal fer un darrer comentari entorn al caràcter de l'espai de *Hilbert* dels estats. Rigorosament parlant, en un espai de *Hilbert* el producte escalar no pot ser mai divergent i només el subconjunt de funcions normalitzables constituirà pròpiament un espai hilbertià, del qual el conjunt funcional comunament utilitzat és una extensió.