

AUTOADJUNCION DE OPERADORES Y CONSERVACION DE OBSERVALES

Gustavo A. Arteca, Eduardo A. Castro* y Francisco M. Fernández

INIFTA, División Química Teórica, Sucursal 4, Casilla de Correo 16,
(1900) La Plata, Argentina.

(recibido agosto 8, 1983; aceptado enero 5, 1984)

RESUMEN

Se analiza la relación existente entre la propiedad de autoadjunción de los operadores de la mecánica cuántica y las leyes de conservación de los observables físicos. Por ello se utilizan tres modos alternativos de análisis: a) tratamiento general, b) ecuación clásica de ondas y c) observables que no se conservan.

ABSTRACT

The relation between the property of autoadjunction of the operators in quantum mechanics and the laws of conservation of physical observables is analyzed. Three different methods of analysis are used: a) general treatment, b) classic wave equation and c) observables that are not conserved.

* Toda correspondencia vinculada a este artículo deberá dirigirse a Eduardo A. Castro.

1. INTRODUCCION

Cuando en los cursos de mecánica cuántica se trata el tema de los operadores asociados a variables dinámicas, inicialmente se hace hincapié en el hecho de que sólo se usan operadores lineales y hermíticos. La primera condición se basa en el hecho de que de esta forma es posible garantizar la validez general del principio de superposición, que está en la base misma de la teoría cuántica⁽¹⁾.

Por otra parte, se desea representar, mediante operadores, a las variables dinámicas fundamentales, que obviamente poseen valores medios reales. Entonces, la segunda condición surge de este natural requerimiento⁽²⁾.

Comúnmente la cuestión atinente a la relación que existe entre la autoadjunción de los operadores y la conservación de los observables no es tratada en los textos estándares⁽³⁻⁶⁾. Sin embargo, la propiedad de autoadjunción de los operadores implica la validez de la ley de la conservación de la energía⁽⁷⁾ y creemos que ésta es una razón lo suficientemente importante como para que merezca ser destacada, por lo menos del mismo modo que la realidad de los valores medios.

El objeto de este artículo es el de presentar de un modo sencillo y directamente aplicable a la enseñanza en los cursos de mecánica cuántica, la relación existente entre la autoadjunción de los operadores y las leyes de conservación de los observables físicos. Lo haremos bajo tres enfoques distintos: a) tratamiento general, b) empleo de la ecuación clásica de ondas y c) consideración de observables que no se conservan.

2. TRATAMIENTO GENERAL

En mecánica clásica el grupo dinámico de un sistema, esto es, el valor medio estadístico y la evolución temporal de cualquier variable mecánica, queda determinado por el conocimiento de la función H , llamada el hamiltoniano del sistema, en el espacio de las fases. Ahora bien, desde el punto de vista de la mecánica cuántica, los observables de un sistema cualquiera se encuentran en correspondencia con operadores autoadjuntos

en \tilde{H} , un espacio de Hilbert, con lo cual el grupo dinámico de un sistema mecano-cuántico puede ser asociado a un conjunto de operadores autoadjuntos (hasta una constante aditiva) correspondiente a la clase de observables definidos sobre el sistema y llamados mecánicos. Por esta razón, extendiendo la analogía clásica, llamaremos hamiltoniano del sistema, a un cierto operador autoadjunto que defina el comportamiento dinámico del sistema, así como H lo hace en el caso clásico. Obsérvese la generalidad de tal asignación: de todo el conjunto de observables, alguno de ellos define el sistema, por medio de su operador asociado. En la forma usual, es tomada la energía como tal observable, y entonces el operador autoadjunto asociado a la energía es definido como el hamiltoniano del sistema.

Bajo esta asignación, si $u_i \in \tilde{H}$ (vector unitario) describe un estado puro del sistema y P_A es la proyección que define la medida de un cierto observable A , entonces la probabilidad de distribución de la energía para cada estado u_i es $\|P_E u_i\|^2$. Si la evolución del sistema se describe por la ecuación de Schrödinger,

$$\frac{d u(t)}{dt} = -i \hat{H} u(t),$$

donde \tilde{H} es el operador hamiltoniano del sistema y $u_0 = u(0)$ es conocido y con ello se conoce la constante de integración en la ecuación precedente, entonces el vector $u(t) \in \tilde{H}$ está dado por

$$u(t) = e^{-it\hat{H}} u_0 \quad (1)$$

y

$$\hat{H} u_0 = E_u(0) u_0 \quad (t = 0 \text{ arbitrario}),$$

entendiendo a la exponencial como un operador exponencial a los efectos del cálculo del producto interno.

Pasamos ahora a estudiar, mediante la formulación habitual, la condición para que de acuerdo con la analogía mecánico-clásica, el observable \underline{a} , asociado a un operador A que está definido sobre el mismo domi-

nio de \hat{H} ⁽⁸⁾ sea una integral de movimiento: sabemos que A es autoadjunto y además el valor del observable \underline{a} al tiempo t para el estado $u(t)$, luego $a(t)$ será

$$a_u(t) = \langle u(t) | A | u(t) \rangle, \quad (2)$$

de acuerdo a los axiomas de la mecánica cuántica. Introduciendo (1) en (2)

$$\begin{aligned} a_u(t) &= \langle e^{-it\hat{H}} u_0 | A e^{-it\hat{H}} u_0 \rangle = \langle (Ae^{-it\hat{H}})^\dagger e^{-it\hat{H}} u_0 | u_0 \rangle \\ &= \langle e^{-it\hat{H}} A e^{-it\hat{H}} u_0 | u_0 \rangle. \end{aligned} \quad (3)$$

Si establecemos la condición de conservación para $a(t)$ en el tiempo, que la define como integral de movimiento, o sea

$$a_u(t) = a_u(0), \text{ para todo } t,$$

y con $a_u(0)$ arbitrario para cada u (pues $t=0$ es arbitrario), entonces si

$$a_{u_0} = \langle u_0 | A u_0 \rangle = \langle A u_0 | u_0 \rangle,$$

resulta claro que \underline{a} se conserva si y sólo si

$$A e^{-it\hat{H}} = e^{-it\hat{H}} A. \quad (4)$$

Tomando el operador exponencial como

$$e^{-it\hat{H}} = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-i)^j t^j}{j!} (\hat{H})^j,$$

donde $(\hat{H})^j$ indica la composición de j -veces el operador autoadjunto asociado a la energía y recordando la regla

$$[A, (\hat{H})^j] = [A, (\hat{H})] (\hat{H})^{j-1} + \hat{H}[A, (\hat{H})^{j-1}].$$

se sigue de inmediato que

$$a(t) = a(0) \text{ para todo } t \Rightarrow A \text{ es autoadjunto y } [\hat{H}, A] = 0, \quad (5)$$

lo cual está estableciendo que a y E (energía) son simultáneamente observables, o equivalentemente, que en los estados estacionarios puros, la energía tiene un valor de probabilidad 1 de distribución.

Obsérvese que la relación (5) se satisface sin ningún conocimiento de la forma del operador, para el caso particular $A = \hat{H}$, con lo cual la energía se conserva en el sentido clásico, durante toda la evolución del sistema cuántico, sólo debido a que \hat{H} (operador que define la dinámica del sistema) es autoadjunto (pues trivialmente $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$).

3. ECUACION CLASICA DE ONDAS

El mismo problema puede ser presentado en una forma diferente utilizando la ecuación clásica de ondas⁽⁷⁾. Sea $F = F(t)$ un vector real que da cuenta del desplazamiento de un sistema de k partículas,

$$F(t) = (f_1, \dots, f_k), \quad (6)$$

a partir de su posición de equilibrio, estando sometidas las mismas a un potencial elástico armónico:

$$\ddot{F} + A F = 0. \quad (7)$$

(El presente razonamiento y los posteriores pueden extenderse sin dificultad alguna a un medio elástico continuo). De acuerdo a (6) para el producto interno tenemos que

$$\langle F | F \rangle = \sum_{j=1}^k f_j^2.$$

Definiendo al operador M del modo siguiente:

$$MF = (m_1 f_1, \dots, m_k f_k),$$

y observando que por (7) $-AF$ es una fuerza por unidad de masa, entonces $-MA\dot{F}$ es el vector fuerza y el potencial restaurador U queda dado por

$$U = \frac{1}{2} \langle F | MAF \rangle,$$

con lo cual la energía total es

$$E = \frac{1}{2} \langle \dot{F} | M\dot{F} \rangle + \frac{1}{2} \langle F | MAF \rangle.$$

Podemos de esta forma observar qué condiciones debe cumplir el operador A para que la energía se conserve, esto es, que $\dot{E} = 0$,

$$\dot{E} = \frac{1}{2} \{ \langle \ddot{F} | M\dot{F} \rangle + \langle \dot{F} | M\ddot{F} \rangle + \langle \dot{F} | MAF \rangle + \langle F | M\dot{A}\dot{F} \rangle \} \quad (8)$$

si A no depende del tiempo. Utilizando (7) en (8) nos queda

$$\dot{E} = \frac{1}{2} \{ -\langle A\dot{F} | M\dot{F} \rangle + \langle F | M\dot{A}\dot{F} \rangle \}, \quad (9)$$

dado que M es trivialmente simétrico, esto es, autoadjunto, por tratarse de vectores reales.

Entonces, de acuerdo a la Ec.(9) podemos establecer la equivalencia

$$\dot{E} = 0 \iff MA, \text{ y por ende } A, \text{ es autoadjunto.}$$

Si consideramos la analogía formal establecida anteriormente, vuelve a encontrarse que es suficiente establecer el carácter de autoadjunto del operador que define la dinámica del sistema (en este caso A) para encontrar que la energía se conserva durante la evolución.

4. OBSERVABLES QUE NO SE CONSERVAN

Consideremos ahora la evolución de un estado dinámico del sistema $u_t = e^{-it\hat{H}} u_0$ y sea $b(t)$ el observable asociado al operador autoadjun

to B, cuando es medido en el estado puro u_t . Entonces si

$$b(t) = \langle u_t | B u_t \rangle,$$

tenemos una relación que corresponde a describir la evolución de las observaciones del operador B independiente del tiempo, por medio de los estados dinámicos no-estacionarios del sistema. Pero todo lo anterior puede reformularse como

$$\begin{aligned} b(t) &= \langle e^{-it\hat{H}} u_0 | B e^{-it\hat{H}} \rangle = \langle u_0 | [e^{it\hat{H}} B e^{-it\hat{H}}] u_0 \rangle \\ &= \langle B_t \rangle_{00} \quad , \end{aligned} \quad (10)$$

y así se describe la evolución del observable considerando que está asociado al mismo operador explícitamente dependiente del tiempo, y el sistema se encuentra en su estado dinámico u_0 estacionario. De (10) se deduce la relación

$$\dot{B}_t = i [\hat{H}, B_t] ,$$

independientemente del carácter de autoadjunto de B. Sin embargo, observemos que al evolucionar un estado puro según (1), se tendrá para la norma $\|u_t\|$ (por ser \hat{H} autoadjunto):

$$\|u_t\| = \langle u_t | u_t \rangle = \langle e^{-it\hat{H}} u_0 | e^{-it\hat{H}} u_0 \rangle$$

$$\|u_t\| = u_0 = \text{constante para todo } t,$$

con lo cual la norma del estado puro se conserva en el tiempo debido a la autoadjunción de \hat{H} ; resultado que por otro lado es central en la teoría y consecuencia lógica de lo discutido anteriormente, ya que si $\|u_t\| < 1$, con u_0 vector unitario, entonces la distribución de energía sobre el estado puro no correspondería a un valor de probabilidad 1, con lo cual la energía no se conservaría⁽⁹⁾.

REFERENCIAS

1. L. de la Peña, *Introducción a la mecánica cuántica*, CECSA, México (1979) p. 213.
2. F.L. Pilar, *Elementary Quantum Chemistry*, McGraw-Hill, N.Y. (1968) p.71.
3. L. Schiff, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, N.Y. (1968).
4. E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, Wiley, N.Y. (1961).
5. L.D. Landau y E.M. Lifshits, *Quantum Mechanics: Non-relativistic Theory*, Addison-Wesley, Mass. (1958).
6. A.S. Davydov, *Quantum Mechanics*, Addison-Wesley, Mass. (1965).
7. K.O. Friedrichs, *Spectral Theory of Operators in Hilbert Space*, Springer, N.Y. (1973) p. 58.
8. E.A. Castro, F.M. Fernández y A. Croce, *Am. J. Phys.*, 47 (1979) 740.
9. G.W. Mackey, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Benjamin, N.Y. (1963) p. 84.