

Medida de un observable.

Para comenzar este apartado vamos a exponer brevemente algunas nociones sobre estadística y probabilidad que nos serán de utilidad.

Vamos a considerar una variable aleatoria a que puede tomar una serie de valores discretos a_i , ($i = 1, 2, \dots$). Podrían ser, por ejemplo, los seis números de un dado: $a_1 = 1$, $a_2 = 2$, \dots , $a_6 = 6$. Para esta variable aleatoria se pueden postular valores para la probabilidad de obtener un resultado concreto al realizar una experiencia en la que aparezca la variable a como resultado. Vamos a considerar que la probabilidad de obtener el resultado a_i vale $\mathcal{P}(a_i)$. Si realizamos el experimento un gran número de veces, N , el valor a_i saldrá aproximadamente $N\mathcal{P}(a_i)$ veces. Podemos calcular el valor medio de la variable a que se obtiene cuando realizamos el experimento las N veces de la forma siguiente:

$$\langle a \rangle = \frac{1}{N}(a_1 N\mathcal{P}(a_1) + a_2 N\mathcal{P}(a_2) + \dots) = \sum_i a_i \mathcal{P}(a_i)$$

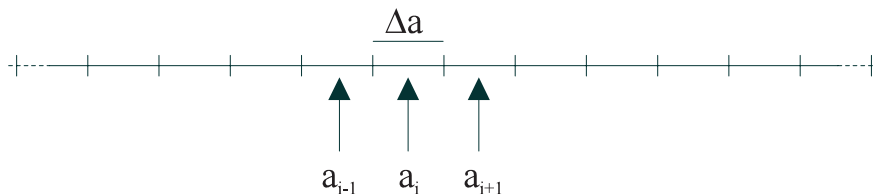
Los valores de las probabilidades debe cumplir los siguientes requisitos:

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(a_i) &\geq 0 \\ \sum_i \mathcal{P}(a_i) &= 1 \end{aligned}$$

Vamos a suponer ahora que la variable aleatoria a es continua, de modo que al realizar una experiencia en la que se obtenga la variable a como resultado, podamos obtener cualquier valor para a , desde $-\infty$ hasta ∞ . En este caso podemos postular una densidad de probabilidad para la probabilidad de obtener un resultado comprendido entre un cierto valor concreto a y $a + da$. Vamos a notar esta densidad de probabilidad por $\rho(a)$, de modo que la probabilidad de obtener un resultado comprendido entre a y $a + da$ sea:

$$\rho(a)da$$

Podemos hacer algo parecido al caso anterior si discretizamos el intervalo $(-\infty, \infty)$ dividiendo dicho intervalo en infinitos intervalos pequeños de tamaño Δa . La probabilidad de que un resultado caiga en el intervalo a_i de anchura Δa será $\rho(a_i)\Delta a$.



Si realizamos un número N grande de veces el experimento, el valor de a caerá aproximadamente $N\rho(a_i)\Delta a$ veces en el intervalo de anchura Δa alrededor del valor a_i . El valor medio de la variable a al realizar los N experimentos será:

$$\langle a \rangle = \frac{1}{N}(\dots + a_{i-1}N\rho(a_{i-1})\Delta a + a_iN\rho(a_i)\Delta a + a_{i+1}N\rho(a_{i+1})\Delta a + \dots) = \int da a\rho(a)$$

La función $\rho(a)$ también debe cumplir una serie de requisitos, que son los siguientes:

$$\begin{aligned}\rho(a) &\geq 0 \\ \int da \rho(a) &= 1\end{aligned}$$

Pues bien, lo que vamos a ver es que en mecánica cuántica aparecen expresiones similares a las anteriores, de modo que podremos interpretar los resultados basándonos en el concepto de probabilidad.

Vamos a suponer que en un instante determinado el estado de una partícula está representado mediante el ket $|\psi\rangle$. Consideraremos en primer lugar que la partícula se mueve en una sola dimensión. Podemos utilizar una representación concreta para el estado de la partícula. Por ejemplo, el estado de la partícula en la representación coordenadas viene dado por la función $\psi(x) = \langle x|\psi\rangle$. Si el estado está normalizado, se verificará que:

$$\langle \psi|\psi\rangle = \int dx \langle \psi|x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int d^3x \psi^*(x)\psi(x) = 1$$

Vamos a calcular el valor medio de la posición en la representación coordenadas:

$$\langle x\rangle = \langle \psi|\hat{x}|\psi\rangle = \int dx \langle \psi|x\rangle \langle x|\hat{x}|\psi\rangle = \int dx \psi^*(x)x\psi(x)$$

Según se aprecia en las ecuaciones anteriores podemos interpretar estos resultados como resultados estadísticos, si consideramos que la densidad de probabilidad de que cuando midamos la posición de la partícula, ésta se encuentre entre un valor x y $x + dx$ viene dada por la siguiente expresión:

$$\rho(x) = \psi^*(x)\psi(x) = |\psi(x)|^2 = \langle \psi|x\rangle \langle x|\psi\rangle = |\langle x|\psi\rangle|^2$$

Todas las expresiones anteriores son equivalentes. De esta forma el valor medio de la posición será:

$$\int dx x\rho(x) = \int dx x\psi^*(x)\psi(x) = \int dx \psi^*(x)x\psi(x)$$

Podemos ver que si interpretamos el cuadrado de la función de onda como una densidad de probabilidad, ésta verifica los requisitos de una densidad de probabilidad (si el estado está normalizado):

$$\begin{aligned}\rho(x) &= \psi^*(x)\psi(x) \geq 0 \\ \int dx \rho(x) &= \int dx \psi^*(x)\psi(x) = 1\end{aligned}$$

Podemos extender el resultado al caso de movimiento en tres dimensiones. En este caso la función de onda viene dada por la función $\langle \mathbf{r}|\psi\rangle$. La función de onda está normalizada si se verifica que:

$$\langle \psi|\psi\rangle = \int d^3\mathbf{r} \langle \psi|\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|\psi\rangle = \int d^3\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = 1$$

El valor medio de la posición será en este caso:

$$\langle \mathbf{r}\rangle = \langle \psi|\hat{\mathbf{r}}|\psi\rangle = \int d^3\mathbf{r} \langle \psi|\mathbf{r}\rangle \langle \mathbf{r}|\hat{\mathbf{r}}|\psi\rangle = \int d^3\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r})\mathbf{r}\psi(\mathbf{r})$$

Por tanto, podemos interpretar la función $\rho(\mathbf{r}) = \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$ como la densidad de probabilidad de que al medir la posición de la partícula, ésta se encuentre comprendida entre un cierto valor del vector $\mathbf{r} \equiv (x, y, z)$ y $\mathbf{r} + d\mathbf{r} \equiv (x + dx, y + dy, z + dz)$.

Lo mismo que hemos hecho con el observable $\hat{\mathbf{r}}$ podemos hacerlo con cualquier otro observable. Por ejemplo, para el momento lo único que tenemos que hacer es utilizar la representación de momentos para obtener ecuaciones similares. El estado de la partícula en la representación de momentos viene dado por la siguiente función $\bar{\psi}(\mathbf{p}) = \langle \mathbf{p} | \psi \rangle$. El valor medio del momento viene dado por la expresión:

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \langle \psi | \hat{\mathbf{p}} | \psi \rangle = \int d^3\mathbf{p} \langle \psi | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \hat{\mathbf{p}} | \psi \rangle = \int d^3\mathbf{p} \bar{\psi}^*(\mathbf{p}) \mathbf{p} \bar{\psi}(\mathbf{p})$$

Por tanto, podemos interpretar la función $\rho_{\mathbf{p}}(\mathbf{p}) = \bar{\psi}^*(\mathbf{p})\bar{\psi}(\mathbf{p}) = |\langle \mathbf{p} | \psi \rangle|^2$ como la densidad de probabilidad de que al medir el momento de la partícula, éste se encuentre comprendido entre el vector \mathbf{p} y el vector $\mathbf{p} + d\mathbf{p}$.

Exactamente igual se puede hacer para la energía. Vamos a considerar que el hamiltoniano tiene un espectro discreto no degenerado, de modo que sus autovectores son los vectores $|\varphi_i\rangle$ de autovalor E_i . El valor medio de la energía será:

$$\langle E \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle$$

Para calcular este valor medio, lo más sencillo es utilizar la representación de energías, es decir, las componentes $\langle \varphi_i | \psi \rangle$. Para ello, insertamos la relación de cierre en la expresión anterior:

$$\langle E \rangle = \sum_i \langle \psi | \hat{H} | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \psi \rangle$$

Nos basamos ahora en que $\hat{H} |\varphi_i\rangle = E_i |\varphi_i\rangle$, por tanto la expresión anterior queda de la forma:

$$\langle E \rangle = \sum_i \langle \psi | E_i | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \psi \rangle = \sum_i E_i \langle \psi | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \psi \rangle = \sum_i E_i |\langle \varphi_i | \psi \rangle|^2$$

De modo que podemos interpretar la serie de números $|\langle \varphi_i | \psi \rangle|^2 = \langle \psi | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \psi \rangle$ como la probabilidad de que al medir la energía de la partícula obtengamos el valor E_i . En este caso como la variable es discreta hemos interpretado el valor medio a partir de una probabilidad en lugar de una densidad de probabilidad. Los números $\langle \varphi_i | \psi \rangle$ no son otra cosa que las componentes del estado de la partícula en la representación de energías.

Hay que destacar varios detalles importantes. En primer lugar, la función $\mathcal{P}(E_i) = |\langle \varphi_i | \psi \rangle|^2$ la podemos interpretar como una probabilidad sólo en el caso en que efectivamente al medir la energía sólo podamos obtener como resultado la serie de valores discretos E_i . Es decir, que al medir la energía no podemos obtener como resultado un valor que no sea uno de los autovalores del hamiltoniano. Para que tenga algún fundamento la interpretación que estamos realizando del estado de la partícula en base a probabilidades se debe comprobar experimentalmente que en cualquier experimento efectivamente sólo obtenemos como resultados de la medida de la energía de una partícula alguno de los autovalores del hamiltoniano. En segundo lugar, estamos viendo que antes de realizar la

medida, la partícula está descrita mediante el ket $|\psi\rangle$, de modo que no tiene una energía bien definida, sin embargo, al realizar la medida la partícula se detecta como si realmente tuviera una energía bien definida y que es el resultado de la medida. Como veremos más adelante el proceso de medida produce un cambio radical en el estado de la partícula. Lo mismo ocurre con la posición. La partícula, antes de realizar la medida, no tiene una posición bien definida, ya que viene descrita por una función de distribución. Sin embargo, cuando medimos su posición, por ejemplo interaccionando con la partícula, la partícula se detecta en una posición bien determinada. La interpretación de Copenhage, que es la que utilizaremos, nos dice que la partícula no tiene una posición bien definida antes de realizar una medida de su posición; sin embargo, cuando medimos su posición la partícula se presentará en una posición bien determinada, como si realmente fuera una partícula. Esta interpretación permite analizar de forma más o menos sencilla el experimento de Young. Las partículas son detectadas en la pantalla, es decir, que la pantalla nos sirve para realizar una medida sobre la posición de las partículas. Antes de que una partícula alcance la pantalla no tiene una posición determinada y por tanto puede pasar por las dos rendijas simultáneamente, comportándose como una onda. Sin embargo, cuando la partícula llega a la pantalla y medimos su posición la partícula es detectada en una posición concreta de la pantalla, como si fuera una partícula.

Por último, vamos a generalizar el resultado que hemos obtenido para cualquier observable. Si tenemos un observable A podemos tener varios casos, dependiendo del espectro de A .

- **Espectro discreto no degenerado**

Vamos a suponer que el espectro de A está compuesto por la serie de números a_i , de modo que los autovectores de A son los vectores $|\varphi_i\rangle$ y $A|\varphi_i\rangle = a_i|\varphi_i\rangle$. En este caso si la partícula se encuentra en el estado $|\psi\rangle$ el valor medio de A será:

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_i \langle \psi | A | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \psi \rangle = \sum_i \langle \psi | a_i | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \psi \rangle = \sum_i a_i \langle \psi | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \psi \rangle \\ &= \sum_i a_i |\langle \varphi_i | \psi \rangle|^2\end{aligned}$$

La probabilidad de que al medir el observable A obtengamos como resultado de la medida el valor a_i vale $\mathcal{P}(a_i) = |\langle \varphi_i | \psi \rangle|^2$.

Si desarrollamos el estado $|\psi\rangle$ como serie de los autovectores $|\varphi_i\rangle$: $|\psi\rangle = \sum_i c_i |\varphi_i\rangle$ las componentes $c_i = \langle \varphi_i | \psi \rangle$ son las componentes del estado $|\psi\rangle$ en la representación definida por el observable A . Las componentes al cuadrado nos dan las distintas probabilidades de obtener como resultado de la medida de A los distintos autovalores a_i .

- **Espectro discreto degenerado**

Supongamos que dentro del espectro de A hay autovalores degenerados. En este caso también podemos construir una base de autovectores de A . Si el grado de degeneración del autovalor a_i es g_i consideraremos que el conjunto de vectores $\{|\varphi_i^j\rangle\}$,

donde $j = 1, \dots, g_i$, forman una base ortonormal del espacio de estados. En este caso podemos calcular el valor medio de A de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_i \sum_j \langle \psi | A | \varphi_i^j \rangle \langle \varphi_i^j | \psi \rangle \sum_i \sum_j \langle \psi | a_i | \varphi_i^j \rangle \langle \varphi_i^j | \psi \rangle \\ &= \sum_i a_i \sum_j \langle \psi | \varphi_i^j \rangle \langle \varphi_i^j | \psi \rangle = \sum_i a_i \sum_j |\langle \varphi_i^j | \psi \rangle|^2\end{aligned}$$

La probabilidad de que al medir el observable A obtengamos como resultado el valor a_i vale en este caso:

$$\mathcal{P}(a_i) = \sum_j |\langle \varphi_i^j | \psi \rangle|^2$$

- **Espectro continuo**

Supongamos ahora que el espectro de A es continuo. Vamos a notar por $|\varphi_a\rangle$ al autovector de A con autovalor a . En este caso el valor medio del observable A se puede obtener como

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \int da \langle \psi | A | \varphi_a \rangle \langle \varphi_a | \psi \rangle = \int da \langle \psi | a | \varphi_a \rangle \langle \varphi_a | \psi \rangle = \int da a |\langle \varphi_a | \psi \rangle|^2$$

De modo que en este caso definimos una densidad de probabilidad, de modo que la probabilidad de que al medir el observable A obtengamos como resultado un valor comprendido entre a y $a + da$ vale:

$$|\langle \varphi_a | \psi \rangle|^2 da$$

Por último, cabe otro caso y es en el que el espectro del observable parte sea discreto y parte continuo. En este caso para la parte discreta se define una probabilidad mientras que para la parte continua definimos una densidad de probabilidad.

De lo expuesto podemos deducir que si el estado que describe a la partícula es un autovector del observable tendremos certeza del resultado que obtendremos al medir dicho observable, que lógicamente será el autovalor correspondiente al autovector. En este caso se dice que la partícula tiene un valor bien definido de dicho observable. Como ejemplo, si el estado de la partícula es un autovector del hamiltoniano se dice que la partícula tiene una energía bien definida.

Por último, podemos ver una propiedad del estado de la partícula que habíamos observado anteriormente y es que está definido salvo un factor de fase. Si multiplicamos el estado de la partícula por un factor de fase de la forma $e^{i\phi}$ las probabilidades de medir un determinado observable no varían.