

Estados. Observables. Simetrías.

Hasta el momento hemos estudiado el grupo de simetrías de la Relatividad Especial, sus generadores infinitesimales y algunas de sus propiedades.

En física de partículas, el concepto de simetría juega un papel de suprema importancia. En este contexto podemos afirmar que el grupo de Lorentz, "ampliado" para incluir traslaciones de espacio-tiempo (en lo que se conoce como el grupo de Poincaré) forma el grupo de simetrías "externas", o de "espacio-tiempo".

Aparte de estas simetrías hay otras simetrías, que denominaremos "simetrías internas" y que son esenciales para nuestra comprensión del mundo subatómico.

Antes de comenzar a estudiar dichas simetrías debemos, sin embargo, entender cómo se implementan las simetrías en la física cuántica.

Estados y observables en mecánica clásica.

- En física clásica, la dinámica de un sistema se describe a partir del principio de mínima acción. Si las coordenadas "generalizadas" se denotan como $\{q_i\}_i$ y las correspondientes velocidades con $\{\dot{q}_i\}_i$, entonces este principio,

$$\delta S = 0, \quad (1)$$

donde $S[q] = \int L(q_i(t), \dot{q}_i(t)) dt$ es la acción y L el Lagrangiano, lleva a las ecuaciones de Euler-Lagrange:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial L}{\partial q_i}. \quad (2)$$

- Cada conjunto de coordenadas $q \equiv (q_1, \dots, q_n)$ representa un punto en el espacio de configuración, Q : $q \in Q$.

La dimensión de este espacio, que es igual al número de coordenadas (n), representa el número de **grados de libertad** del sistema.

- El **espacio tangente**, TQ , que localmente se describe con tuplas $(q, \dot{q}) \equiv (q_1, \dots, q_n; \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n)$ que representan coordenadas en Q con sus respectivas posibles velocidades, puede ser considerado el **espacio de estados** en mecánica clásica.

Como en general las ecuaciones de movimiento (2) son

de orden 2 en t (ya que L depende de q_i y \dot{q}_i), tenemos que una vez conocido el estado del sistema en un tiempo inicial t_0 , podemos, usando las ecs. de movimiento, predecir el estado del sistema en cualquier tiempo posterior*:

$$\underbrace{(q_i(t_0), \dot{q}_i(t_0))}_{\text{Estado inicial (conocido)}} \xrightarrow{(2)} \underbrace{(q_i(t), \dot{q}_i(t))}_{\text{Estado del sistema en el tiempo } t}.$$

• Por otro lado, los **observables**, que corresponden a la representación matemática de aquellas cantidades relativas al sistema que (en principio) se pueden **medir** (u "observar"), están dados por funciones (suaves) de las coordenadas y velocidades generalizadas. Este es el caso, por ejemplo, de la energía del sistema, o de su momento lineal.

En resumen, tenemos:

$$\bullet \text{Espacio de } \mathbf{estados} = \{(q_1, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_n)\} \equiv TQ. \quad (3)$$

$$\bullet \text{Espacio de } \mathbf{observables} = \{f: TQ \rightarrow \mathbb{R} \mid f \text{ suave}\} \equiv C^\infty(TQ).$$

Notemos que el espacio de observables $C^\infty(TQ)$ posee una estructura natural de álgebra, el "álgebra de funciones" sobre TQ .

El producto en este álgebra es, sin embargo, **conmutativo**.

*: Asumiendo, por supuesto, que seamos capaces de resolver las ecuaciones de movimiento.

- En una descripción Hamiltoniana de un sistema clásico, las variables de velocidad \dot{q}_i son reemplazadas por las variables de momento canónico:

$$p^i := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, \quad (4)$$

por medio de una transformada de Legendre.

El espacio tangente TQ es reemplazado por el **espacio de fase**, T^*Q , cuyos puntos se representan con coordenadas

$$(q, p) \equiv (q_1, \dots, q_n; p^1, \dots, p^n).$$

Las ecuaciones de movimiento toman la forma de las **ecuaciones de Hamilton**:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p^i}, \quad \dot{p}^i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad (5)$$

donde $H: T^*Q \rightarrow \mathbb{R}$, $H \equiv H(q, p)$ es el **Hamiltoniano** del sistema. En este caso, los estados y observables están dados por:

- Espacio de **estados** = $\{(q_1, \dots, q_n, p^1, p^2, \dots, p^n)\} \equiv T^*Q$. (6)

- Espacio de **observables** = $\{f: T^*Q \rightarrow \mathbb{R} \mid f \text{ suave}\} \equiv C^\infty(TQ)$.

• Para referencia posterior, es conveniente recordar que las ecs. de movimiento (5) toman la siguiente forma al ser expresadas en términos de los corchetes de Poisson:

$$\ddot{p}^i = \{H, p^i\} ; \quad \ddot{q}^i = \{H, q^i\}, \quad (7)$$

donde $\{f, g\} := \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial p^i} \frac{\partial g}{\partial q^i} - \frac{\partial f}{\partial q^i} \frac{\partial g}{\partial p^i} \right)$ es el corchete de Poisson entre f y g , $f, g \in C^\infty(T^*Q)$.

En general, la evolución temporal de un observable $f \in C^\infty(T^*Q)$ está determinada por el Hamiltoniano:

$$\frac{df}{dt} = \{H, f\}. \quad (8)$$

Estados y observables en física cuántica.

En física cuántica, los **observables** pertenecen, al igual que en la física clásica, a un álgebra; sólo que en este caso se trata de un álgebra de operadores que, como regla, es no conmutativa: si A y B son dos observables, en general se tendrá que $AB \neq BA$.

El álgebra de observables, llamémosla \mathcal{A} , posee ciertas propiedades, entre ellas:

(i) \mathcal{A} es un álgebra compleja (sobre \mathbb{C}), de tal forma que están definidas las operaciones de suma y producto entre elementos del álgebra, $AB, A+B \in \mathcal{A}$ para $A, B \in \mathcal{A}$, así

como de multiplicación por escalares:

→ para $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$ y $A, B \in \mathcal{A}$, se tiene

$$\lambda A + \mu B \in \mathcal{A}, \quad (\lambda + \mu)A = \lambda A + \mu A, \text{ etc.}$$

(iii) El álgebra \mathcal{A} posee una "involución", esto es, una

$$\text{aplicación } *: \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$$

$$A \mapsto A^*$$

$$\text{tal que } (\lambda A)^* = \bar{\lambda} A^*, \quad (A+B)^* = A^* + B^*, \quad (AB)^* = B^* A^*$$

↑ complejo conjugado.

Los **observables** físicos son aquellos elementos de \mathcal{A} tales que $A^* = A$ ("autoadjuntos").

Como la mecánica cuántica no es una teoría determinista, lo único que podemos predecir es el valor esperado de un observable (si queremos describir los resultados de un número suficientemente alto de repeticiones de la misma medición) o la probabilidad de obtener cierto valor que corresponda a un observable, para el caso de una sola medición

• Para calcular dichas probabilidades, o valores esperados, hacemos uso del concepto de **estado cuántico**

Un estado " ω ", es una aplicación

$$\omega: \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{C}$$

$$A \mapsto \omega(A) \equiv \langle A \rangle_\omega$$

que podemos imaginar como un "evaluador" de probabilidades, o de valores esperados.

→ Decimos entonces que si el sistema se encuentra en el estado ω , al realizar mediciones de un observable A , un número suficientemente alto de veces, el valor esperado, o "promedio" de dichas observaciones estará dado por la cantidad $\omega(A)$.

Para poder tener una interpretación adecuada, en términos de probabilidades, resulta necesario imponer las siguientes condiciones sobre la aplicación $\omega: \mathcal{A} \rightarrow \mathbb{C}$:

(i) $\omega(\mathbb{1}_{\mathcal{A}}) = 1$, donde $\mathbb{1}_{\mathcal{A}}$ es la unidad en \mathcal{A} .

(ii) $\omega(A^*A) \geq 0 \quad \forall A \in \mathcal{A}$.

La primera condición es equivalente a la afirmación de que la suma de las probabilidades debe ser igual a uno. La segunda garantiza (entre otras cosas) que las diferentes probabilidades sean, en efecto, números reales positivos.

• La diferencia básica con la mecánica clásica radica en que, mientras que el álgebra de observables $C^\infty(T^*Q)$ es conmutativa, en mecánica cuántica el álgebra de observables \mathcal{A} no lo es.

En cuanto a los estados, en física clásica también podemos considerarlos como aplicaciones de la forma

$\omega_c : C^\infty(T^*Q) \longrightarrow \mathbb{R}$. Por ejemplo, en mecánica estadística (clásica) los estados de equilibrio están determinados por distribuciones de probabilidad $\rho(q,p)$ sobre el espacio de fase, así que si $f \in C^\infty(T^*Q)$ es un observable, su valor esperado estará dado por

$$\langle f \rangle \equiv \omega_{p.c.}(f) := \int d\vec{q} \int d\vec{p} \rho(q,p) f(q,p).$$

En el caso, por ejemplo, del ensamble canónico, tenemos que $\rho(q,p) = e^{-H(q,p)/k_B T}$.

En el caso de la mecánica clásica de partículas puntuales, donde las trayectorias están perfectamente determinadas y en principio son medibles, tenemos que para una partícula en el "estado" (q_0, p_0) , el "valor esperado" del observable f corresponde al número

$$\omega_{q_0, p_0}(f) := f(q_0, p_0).$$

Lo anterior está en concordancia con esta expresión, si escogemos $\rho(q,p) = \delta(q-q_0) \delta(p-p_0)$.

Las anteriores nociones de estado y observable son de gran generalidad y utilidad en el estudio de la estructura de las teorías de campo que se usan en física de partículas.

Veamos ahora la formulación usual en términos de vectores y operadores en espacios de Hilbert.

→ En esta formulación, el álgebra de observables \mathcal{A} será alguna subálgebra del "álgebra de operadores acotados" en un espacio de Hilbert \mathcal{H} :

$$\mathcal{A} \subseteq \mathcal{B}(\mathcal{H}) = \{ T: \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \mid T \text{ es lineal y acotado} \}$$

La involución, en este caso, está dada por el adjunto de cada operador: $T^* \equiv T^\dagger$, donde $(T^\dagger x, y) = (x, Ty)$ $\forall x, y \in \mathcal{H}$ es la condición que define a T^\dagger a partir de T .

La condición que imponemos sobre los operadores de que sean "acotados" no la consideraremos en este momento. Para efectos de interpretación, bastará con considerar el caso de un espacio de Hilbert $\mathcal{H} = \mathbb{C}^n$ (dimensión finita), donde todos los operadores lineales son acotados.

• Los estados "puros" están determinados por vectores de norma 1 en \mathcal{H} :

Si $\psi \in \mathcal{H}$, con $(\psi, \psi) = 1$, entonces el valor esperado (en el estado ω_ψ determinado por ψ) del observable $A \in \mathcal{A}$, será:

$$\omega_\psi(A) := (\psi, A\psi) \equiv \langle \psi | A | \psi \rangle \equiv \langle A \rangle_\psi$$

Descomponiendo el operador A de la forma

$$A = \sum_n a_n |n\rangle \langle n|, \text{ que quiere decir } A\psi = \sum_n (a_n \langle n | \psi \rangle) |n\rangle,$$

donde $|n\rangle$ representa un vector propio de A con valor propio a_n : $A|n\rangle = a_n|n\rangle$, tenemos que

$$\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | A | \psi \rangle = \sum_n a_n \langle \psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle = \sum_n a_n |\langle n | \psi \rangle|^2$$

Como $\sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbb{1}$, y $\langle \psi | \psi \rangle = 1$, tenemos que

$$\sum_n |\langle n | \psi \rangle|^2 = 1.$$

El significado de $|\langle n | \psi \rangle|^2$ es que representa la probabilidad de que el resultado de una medición del observable A , cuando el sistema ha sido preparado en el estado ψ , sea precisamente a_n .

Esta probabilidad también se puede expresar en términos del proyector $E_n := |n\rangle \langle n| \rightarrow$

$$P(a_n) = \omega_\psi(E_n) = \langle \psi | E_n | \psi \rangle = |\langle n | \psi \rangle|^2$$

Así, el valor esperado de A se puede escribir como

$$\langle A \rangle_\psi = \sum_n a_n P(a_n).$$

→ Vemos entonces que, en general, expresiones de la forma $|\langle \varphi, \psi \rangle|^2$ tienen interpretación en términos de probabilidades. Al calcular dichas probabilidades, es importante que los vectores que usamos estén normalizados: $\langle \psi | \psi \rangle = 1$. Además, como $\langle A \rangle_\psi$ no cambia si multiplicamos $|\psi\rangle$ por una fase arbitraria, $e^{i\phi}|\psi\rangle$, vemos que el espacio de estados (puros) es en realidad el

espacio de "rayos", o espacio proyectivo

$$P(\mathcal{H}) = (\mathcal{H} - \{0\}) / \sim, \text{ donde } \psi \sim \varphi \Leftrightarrow \psi = \lambda \varphi$$

para algún $\lambda \in \mathbb{C}$.

↑ este símbolo denota una "relación de equivalencia"

El "rayo" (clase de equivalencia) que corresponde a un vector $\psi \in \mathcal{H}$ será denotado $[\psi]$. Tenemos entonces que

$$[\psi] = \{ \lambda \psi \mid \lambda \in \mathbb{C} - \{0\} \}.$$

Así, vemos que la cantidad física

$$|(\psi, \varphi)|^2$$

sólo depende de los respectivos rayos $[\psi]$ y $[\varphi]$ y no de los representantes particulares $\psi \in [\psi]$ y $\varphi \in [\varphi]$ que escojamos para calcularla.

- Por esta razón, cuando consideremos la acción de una simetría $g \in G$ (G siendo el grupo de simetría) en el espacio de estados, podemos pensar que la condición mínima que debemos exigir es que g transforme los rayos

$$g : [\psi] \longmapsto T_g([\psi]) \equiv [\psi']$$

de forma que se mantengan las probabilidades:

$$|(\psi, \varphi)|^2 = |(\psi', \varphi')|^2.$$

Este será nuestro punto de partida para el análisis de simetrías en física cuántica que consideraremos a continuación.

Hasta ahora hemos discutido cual sería la forma en que, basados en los principios básicos de la mecánica cuántica, esperaríamos que se realicen las simetrías.

El resultado de dicha discusión se puede resumir de la siguiente forma:

Si G es el grupo de simetría de un sistema cuántico cuyo espacio de estados es el espacio (de Hilbert) \mathcal{H} , entonces debe existir una **acción** de G sobre \mathcal{H} :

$$G \times \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$$

$$g, \psi \mapsto g \cdot \psi,$$

que tenga la propiedad de que, para cada par de vectores normalizados $\varphi, \psi \in \mathcal{H}$, la siguiente relación se cumpla:

$$|(\psi, \varphi)|^2 = |(g \cdot \psi, g \cdot \varphi)|^2.$$

En realidad, dado el carácter "proyectivo" del espacio de estados, la formulación más adecuada es la siguiente:

→ A cada elemento $g \in G$ le corresponde una transformación

$$T_g: \mathcal{P}\mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{P}\mathcal{H},$$

tal que $(T_g[\psi]) \odot (T_g[\varphi]) = [\psi] \odot [\varphi]$,

donde $[\psi] \odot [\varphi] := \frac{|(\psi, \varphi)|^2}{\|\psi\|^2 \|\varphi\|^2}$, siendo $[\psi]$ el "rayo" que corresponde al vector $\psi \in \mathcal{H}$.

Requerimientos naturales para el conjunto de transformaciones

$\{T_g\}_{g \in G}$ son:

(i) $T_g[\psi] \circ T_g[\varphi] = [\psi] \circ [\varphi]$, $\forall \psi, \varphi \in \mathcal{H}$, $\forall g \in G$ (como ya se mencionó)

(ii) $T_g \circ T_h = T_{gh}$, $\forall g, h \in G$ (es decir, realmente se trata de una acción de G sobre el espacio de estados / rayos)

Para vectores unitarios, la primera condición toma la forma

$|(g \cdot \psi, g \cdot \varphi)| = |(\psi, \varphi)|$, que es reminiscente de la definición de una transformación unitaria. Esto nos lleva a preguntarnos lo siguiente:

• Es posible simplificar dicha condición a la siguiente:

$$(g \cdot \psi, g \cdot \varphi) = (\psi, \varphi)?$$

• Es posible que la acción de G (que realmente está dada sobre $P\mathcal{H}$) se pueda "levantar" a una transformación lineal

$$\tilde{T}(g): \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}?$$

La respuesta a estas preguntas está dada por el siguiente

Teorema (Wigner):

Dada una transformación $T_g: P\mathcal{H} \rightarrow P\mathcal{H}$ que satisface las condiciones (i) y (ii), es posible mostrar que existe un

operador $\tilde{T}(g): \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, tal que $T_g[\psi] = [\tilde{T}(g)\psi] \equiv [g \cdot \psi]$

$\forall \psi \in \mathcal{H}$, y que es

• Lineal: $\tilde{T}(g)(\alpha\psi + \beta\varphi) = \alpha\tilde{T}(g)\psi + \beta\tilde{T}(g)\varphi$; $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$; $\forall \psi, \varphi \in \mathcal{H}$

• Unitario: $(\tilde{T}(g)\psi, \tilde{T}(g)\varphi) = (\psi, \varphi)$, $\forall \psi, \varphi \in \mathcal{H}$;

ó bien

* Antilineal: $\tilde{T}(g)(\alpha\psi + \beta\varphi) = \bar{\alpha}\tilde{T}(g)\psi + \bar{\beta}\tilde{T}(g)\varphi$

* Antiunitario: $(\tilde{T}(g)\psi, \tilde{T}(g)\varphi) = \overline{(\psi, \varphi)}$

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$$

$$\forall \psi, \varphi \in \mathcal{H}.$$

La mayoría de las simetrías que estudiaremos serán implementables en términos de operadores lineales y unitarios en el espacio de Hilbert. Sin embargo, también consideraremos algunas simetrías, como la inversión temporal, que necesariamente están dadas por operadores antilineales y antiunitarios.

- Referencias:
- Wigner, E. "Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspektren". Vieweg, Braunschweig (1931)
 - Bargmann, V. "Note on Wigner's Theorem on Symmetry Operations", J. Math. Phys. $\underline{5}$, p 862 (1964)
 - Weinberg, S. "The Quantum Theory of Fields", vol I (Cambridge). Cap 2.
 - R. Simon, N. Mukunda, S. Chaturvedi, V. Srinivasan, "Two elementary proofs of the Wigner theorem on symmetry in quantum mechanics".
[arXiv: 0808.0779v2 \[quant-ph\]](https://arxiv.org/abs/0808.0779v2)
 - K. Keller, N. Papadopoulos, A. Reyes-Lega, "On the realization of symmetries in Quantum Mechanics" [arXiv: 0712.0997 \[quant-ph\]](https://arxiv.org/abs/0712.0997)

En aquellos casos en los que el operador $\tilde{T}(g)$ resulta ser lineal y unitario, podemos hacer uso de la "teoría de representaciones de grupos", una rama de las matemáticas que debe gran parte de su desarrollo a preguntas que originalmente surgieron en el contexto de la física cuántica.

Definición Sean G un grupo y V un espacio vectorial (sobre $\mathbb{K} = \mathbb{R}, \mathbb{C}$). Una aplicación $\rho: G \rightarrow \text{Gl}(V, \mathbb{K})$ con la propiedad

$\rho(g_1 g_2) = \rho(g_1) \cdot \rho(g_2) \quad \forall g_1, g_2 \in G$, se denomina una representación de G en V .

Algunos comentarios.

- Como $\rho(g) \in GL(V)$, todos los elementos $\rho(g)$ son invertibles.
- Tomando $g_1 = e$ y $g_2 = g$, obtenemos

$$\rho(g) = \rho(e)\rho(g) \Rightarrow \rho(e) = \rho(g)\rho(g)^{-1} = \mathbb{1}_V$$
- De la misma forma se obtiene $\rho(g^{-1}) = \rho(g)^{-1}$
- Si $\text{Ker } \rho = \{e\}$ (ρ es 1-1), decimos que la representación es "fel" ("faithful")
- Como $GL(V) = \{T: V \rightarrow V \mid T \text{ lineal e invertible}\}$, al escoger una base en V podemos pensar en $\rho(g)$ como una matriz. La representación ρ se puede pensar entonces como un conjunto de matrices " $\rho(g)_i$ ", indexadas por G , tales que

$$\rho(g_1)\rho(g_2) = \rho(g_1 g_2)$$

Definición Si V es un espacio vectorial complejo dotado de un producto hermitico (\cdot, \cdot) y $\rho: G \rightarrow GL(V, \mathbb{C})$ es tal que, para todo $g \in G$ y $\forall v, w \in V$ se cumple

$$(\rho(g)v, \rho(g)w) = (v, w),$$

decimos que ρ es una representación **unitaria**