

5. Formalismo matemático de la Mecánica Cuántica II

1. Autovectores y autovalores de un operador lineal.
2. Conjuntos de observables que conmutan. CSCO.
3. Las representaciones $|\mathbf{r}\rangle$ y $|\mathbf{p}\rangle$.
4. Cambio de representación (cambio de base).
5. Los operadores \mathbf{R} y \mathbf{P} .
6. Postulados de la Mecánica Cuántica 1, 2 y 3
7. Postulado 4: probabilidades
8. Postulado 5: colapso de la función de onda
9. Postulado 6: evolución del estado. Ec de Schrödinger
10. Lagrangiano y hamiltoniano en Mecánica Clásica
11. Reglas de cuantificación. Hamiltoniano de una partícula en un campo electromagnético.

1. Autovectores y autovalores. Observables

Esto es crucial en MQ

Dado un operador lineal cualquiera A , se dice que el ket $|\psi\rangle$ es un **autovector** o **vector propio** de A con el **autovalor** o **valor propio** λ (número $\in \mathbb{C}$) si

$$A|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle$$

* Se dice que λ es **no degenerado** si todos los autovectores que corresponden a λ son proporcionales entre sí .

* Si hay varios autovectores no proporcionales con el mismo λ se dice que es **degenerado**.

En este caso el conjunto de todos los autovectores que corresponden al mismo λ forma un subespacio de \mathcal{E} , que se llama **subespacio propio** de λ .

* Los operadores **hermíticos** tienen propiedades importantes:

1) Todos los **autovalores** son **reales**.

2) Dos **autovectores** que corresponden a autovalores distintos son **ortogonales**.

* Un **observable** es un operador hermítico tal que con sus autovectores se puede construir una base ortonormal de todo el espacio.

Esto ocurre siempre en espacios de dimensión finita, pero no necesariamente si es infinita.

2. Conjunto de observables que conmutan

* Una propiedad importantísima es si dos observables conmutan:
 $[A,B]=0 \Leftrightarrow$ existe una base ortonormal de **autovectores comunes** a A y a B
(con autovalores distintos para A y para B).

Otra propiedad es que si $[A,B]=0$ se anulan los elementos de matriz de B entre autovectores de A correspondientes a autovalores distintos.

La idea se puede ver gráficamente:

* Los autovectores de A descomponen el espacio total en una serie de subespacios propios \mathcal{E}_i

* B actúa dentro de cada subespacio \mathcal{E}_i , sin salirse de él.

* Por ser B observable dentro de \mathcal{E}_i se puede elegir una base de autovectores de B .

	\mathcal{E}_1	\mathcal{E}_2	\mathcal{E}_3	...
\mathcal{E}_1	0	0	0	0
\mathcal{E}_2	0	0	0	0
\mathcal{E}_3	0	0	0	0
\vdots	0	0	0	0

Conjunto COMPLETO de observables que conmutan: **CSCO** (“Complete Set of Conmuting Observables”)

* Si el “espectro” (= conjunto de autovalores) de A no es degenerado la base de autovectores es única.

Si el espectro es degenerado el espacio total se descompone una serie de subespacios propios \mathcal{E}_i , uno por cada autovalor.

* Si $[A,B]=0$, B actúa dentro de cada subespacio \mathcal{E}_i .

* Dentro de \mathcal{E}_i . Se puede elegir una base de autovectores de B que descompone \mathcal{E}_i en sub-subespacios.

* Si esta base no es única, existe un tercer observable C que conmuta con A y B , etc

$\{A,B,C,\dots\}$ forman un **CSCO** si existe una y sólo una base ortonormal de autovectores comunes, única salvo por factores de fase multiplicando a cada autovector.

* Puede haber varios CSCO's diferentes con autovectores distintos

* Para un CSCO dado, si se dan los autovalores de todos los operadores, éstos determinan un único autovector común con esos autovalores.

Un ejemplo elemental y muy geométrico

Sea el espacio vectorial \mathbb{R}^3 de los vectores libres en el espacio ordinario 3D con el producto escalar ordinario, $\mathbf{V}_1 \cdot \mathbf{V}_2 = |\mathbf{V}_1| |\mathbf{V}_2| \cos \theta$.

Una base ortonormal es $\{\mathbf{u}_x, \mathbf{u}_y, \mathbf{u}_z\}$: vectores unitarios a lo largo de los ejes.

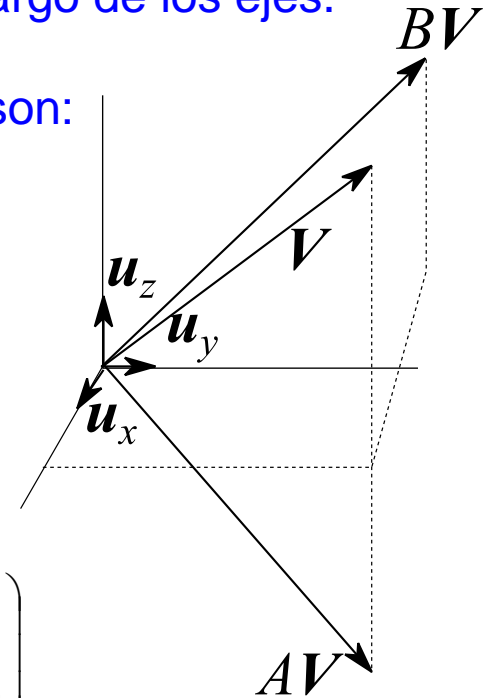
Consideremos los operadores cuyas matrices en esa base son:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad B = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Físicamente A hace una reflexión respecto del plano xy , y B hace una reflexión respecto del plano yz

Obviamente A y B son hermíticos y conmutan, de hecho

$$AB = BA = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$



$AB = BA$ representa una rotación de 180° alrededor del eje y :

Obviamente los autovalores y autovectores de A son:

$$\lambda_{1A} = \lambda_{2A} = 1, \quad \mathcal{E}_{1A} = \{\mathbf{u}_x, \mathbf{u}_y\}; \Rightarrow A(c_1\mathbf{u}_x + c_2\mathbf{u}_y) = 1 \times (c_1\mathbf{u}_x + c_2\mathbf{u}_y)$$
$$\lambda_{3A} = -1, \quad \mathcal{E}_{2A} = \{\mathbf{u}_z\}; \Rightarrow A(c_3\mathbf{u}_z) = -1 \times c_3\mathbf{u}_z$$

Es decir, A convierte cualquier vector del plano xy en sí mismo y cualquier vector paralelo a z en su opuesto (es decir, que la reflexión especular invierte las componentes perpendiculares al plano de reflexión)

Por el mero hecho de que B conmuta con A , eso implica que B actúa **sin salir de** cada subespacio propio de A .

Así el autovector \mathbf{u}_z (no degenerado, subespacio \mathcal{E}_{3A} de dimensión 1) de A lo es también de B , pero con autovalor $\lambda_{3B} = +1$.

Además B convierte cualquier vector del plano xy (subespacio propio de A \mathcal{E}_{1A}) en otro del mismo plano, pero no en sí mismo ni proporcional.

En realidad los vectores propios de B dentro del subespacio \mathcal{E}_{1A} son:

$$\lambda_{1B} = -1, \quad \mathcal{E}_{1AB} = \{\mathbf{u}_x\}; \Rightarrow A(c_1\mathbf{u}_x) = 1 \times (c_1\mathbf{u}_x); B(c_1\mathbf{u}_x) = -1 \times (c_1\mathbf{u}_x)$$
$$\lambda_{2B} = +1, \quad \mathcal{E}_{2AB} = \{\mathbf{u}_y\}; \Rightarrow A(c_2\mathbf{u}_y) = 1 \times c_2\mathbf{u}_y; B(c_2\mathbf{u}_y) = 1 \times (c_2\mathbf{u}_y)$$

En este ejemplo $\{A,B\}$ forman un CSCO, pero no sería así en un espacio de más dimensiones \mathbb{R}^n .

Hacer el mismo ejercicio en \mathbb{R}^4 , tomando matrices diagonales con todos los elementos de la diagonal = 1, excepto un -1:

$$A = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad D = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Mostrar que se necesitan exactamente 3 matrices (elegidas a voluntad entre las 4 anteriores) para formar un CSCO.

Por ejemplo $\{A,B,C\}$ forman un CSCO y la D conmuta con ellas, pero la única base (salvo por un factor de módulo 1 en cada autovector) de autovectores comunes ya está fijada por las tres primeras.

Todos los autovectores comunes a A,B y C deben necesariamente serlo también de D .

3. Las representaciones $\{|\mathbf{r}\rangle\}$ y $\{|\mathbf{p}\rangle\}$

Volvamos al espacio de las funciones de onda \mathcal{F} y al espacio $\mathcal{E}_{\mathbf{r}} \subset \mathcal{E}$ asociado a él que contiene los estados de una partícula con spin nulo.

* A cada función de onda $\psi(\mathbf{r}) \in \mathcal{F}$ le hacemos corresponder un ket llamado $|\psi\rangle \in \mathcal{E}_{\mathbf{r}}$

El ket que corresponde a $\psi(\mathbf{r})$ lo elegimos de tal modo que:

1) A cualquier combinación lineal de funciones de onda corresponde la misma combinación de kets:

$$\psi_1(\mathbf{r}) \leftrightarrow |\psi_1\rangle \quad \text{y} \quad \psi_2(\mathbf{r}) \leftrightarrow |\psi_2\rangle \Rightarrow \lambda_1\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2\psi_2(\mathbf{r}) \leftrightarrow \lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle$$

2) El producto escalar de dos funciones de onda cualesquiera es el mismo que producto escalar de los kets correspondientes

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

Matemáticamente implica que son isomorfos: todo lo que se haga en uno tiene la contrapartida exacta en el otro, como lo hacen los vectores libres ordinarios en el espacio y el espacio vectorial \mathbb{R}^3 de los tríos ordenados de números reales.

* Vamos a considerar dos bases continuas en \mathcal{F} ya vistas:

$$1) \{ \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) \} = \{ \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \}, \quad 2) v_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}}$$

* Los kets de $\mathcal{E}_{\mathbf{r}}$ correspondientes a las funciones anteriores los vamos a simbolizar:

$$1) \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) \leftrightarrow |\mathbf{r}_0\rangle \quad 2) v_{\mathbf{p}_0}(\mathbf{r}) \leftrightarrow |\mathbf{p}_0\rangle$$

* Es fácil ver (pruébese o véase Cohen-Tanoudji) que tanto la base $\{|\mathbf{r}_0\rangle\}$ como la $\{|\mathbf{p}_0\rangle\}$ cumplen las relaciones de ortogonalización y clausura y por tanto son bases ortogonales continuas de $\mathcal{E}_{\mathbf{r}}$.

Componentes de un ket en las representaciones $|\mathbf{r}\rangle$ y $|\mathbf{p}\rangle$

(Ver más detalles en Cohen-Tanoudji, complemento DII)

Sea $|\psi\rangle$ el ket que corresponde a la función de onda $\psi(\mathbf{r})$.

* Las componentes en la base $\{|\mathbf{r}_0\rangle\}$ son :

$$1) |\psi\rangle = \int d^3 r_0 |\mathbf{r}_0\rangle \langle \mathbf{r}_0 | \psi \rangle$$

$$\langle \mathbf{r}_0 | \psi \rangle = \int d^3 r \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})^* \psi(\mathbf{r}) = \int d^3 r \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}_0)$$

Por tanto la componente de $|\psi\rangle$ correspondiente al ket $|\mathbf{r}_0\rangle$ es el valor de la función de onda en \mathbf{r}_0

* Y las componentes en la base $|\mathbf{p}_0\rangle$ son :

$$2) |\psi\rangle = \int d^3 p_0 |\mathbf{p}_0\rangle \langle \mathbf{p}_0 | \psi \rangle$$

$$\langle \mathbf{p}_0 | \psi \rangle = \int d^3 r v_{p_0}(\mathbf{r})^* \psi(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3 r e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_0 \cdot \mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}) = \bar{\psi}(\mathbf{p}_0)$$

La componente de $|\psi\rangle$ correspondiente al ket $|\mathbf{p}_0\rangle$ es el valor de la transformada de Fourier de la función de onda en \mathbf{p}_0

Se puede decir que $\bar{\psi}$ es una “función de onda” en representación del momento
Su cuadrado indica la densidad de probabilidad de que el momento valga \mathbf{p}_0 .

Cambio de representación (cambio de base). Espacios de dimensión finita n

En un espacio vectorial de dimensión finita n un vector cualquiera \mathbf{v} se puede escribir como combinación lineal de los vectores de una base $\{\mathbf{a}_i, i=1, \dots, n\}$ o de otra base distinta $\{\mathbf{b}_i, i=1, \dots, n\}$, es decir:

$$\mathbf{v} = \sum_{i=1}^n v_i \mathbf{a}_i = \sum_{i=1}^n v'_i \mathbf{b}_i$$

Sabemos por el álgebra elemental que conocidas las componentes v_i en una base, se pueden obtener las componentes en la otra, v'_i sin más que multiplicar una matriz de cambio de base A_{ij} por el vector columna $(v_1, v_2, v_3, \dots, v_n)$:

$$v'_i = \sum_{j=1}^n A_{ij} v'_j \quad \begin{pmatrix} v'_1 \\ v'_2 \\ \vdots \\ v'_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \dots & A_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}$$

Las **columnas** de la matriz A son las componentes de cada vector de la base **antigua** $\{\mathbf{a}_i, i=1, \dots, n\}$ en la **nueva** $\{\mathbf{b}_i, i=1, \dots, n\}$.

Si las dos bases son ortonormales se cumple pues:

$$A_{ij} = (\mathbf{b}_j, \mathbf{a}_i) = A_{ji}^* = (A^{-1})_{ij} = (A^+)_{ij}$$

Espacios de dimensión infinita

Es exactamente igual, pero reemplazando la suma de n términos por una serie infinita, o por una integral en el caso de bases continuas

Es muy fácil de memorizar, usando la notación de Dirac

Tenemos la “matriz” de cambio de base: $\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle = \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle^* = (2\pi\hbar)^{-3/2} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}$
(función de onda con \mathbf{p} definido)

De la propiedad: $\int d^3 p |\mathbf{p}\rangle \langle \mathbf{p}| = \mathbb{1}$

Se obtiene: $\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \int d^3 p \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \psi \rangle$

Y como hemos dicho que : $\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r}); \langle \mathbf{p} | \psi \rangle = \bar{\psi}(\mathbf{p})$

Nos queda, una vez más: $\psi(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3 p e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \bar{\psi}(\mathbf{p})$

Y análogamente: $\langle \mathbf{p} | \psi \rangle = \int d^3 r \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \Rightarrow \bar{\psi}(\mathbf{p}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3 r e^{-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} \psi(\mathbf{r})$

5. Los operadores **R** y **P**

Definimos el operador X en \mathcal{F} como el que multiplica una función de onda $\psi(x,y,z)$ por la coordenada x .

$$\psi'(x, y, z) = x\psi(x, y, z)$$

Consecuentemente, en el espacio \mathcal{E}_r , si $|\psi\rangle$ y $|\psi'\rangle$ son los kets correspondientes, la actuación de X , y análogamente Y , Z quedan definidas por su actuación en la representación $|\mathbf{r}\rangle$, de tal modo que se cumple:

$$\langle \mathbf{r} | X | \psi \rangle = x \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$$

$$\langle \mathbf{r} | Y | \psi \rangle = y \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$$

$$\langle \mathbf{r} | Z | \psi \rangle = z \langle \mathbf{r} | \psi \rangle$$

La actuación de estos operadores en otra representación nos la dan las reglas de cambio de base

Es especialmente fácil trabajar con estos operadores en la representación $\{|\mathbf{r}\rangle\}$.

Por ejemplo el elemento de matriz de X entre dos kets se obtiene insertando la relación de clausura:

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

Definimos el operador “vectorial” $\mathbf{R} = (X, Y, Z)$ como el conjunto ordenado de los tres operadores X , Y , Z , reunidos por conveniencia.

El operador \mathbf{P}

Definimos el operador vectorial $\mathbf{P} = (P_x, P_y, P_z)$ en el espacio \mathcal{E}_r , como el conjunto de tres operadores que actúan sobre un ket cualquiera $|\psi\rangle$ de la manera siguiente:

$$\langle \mathbf{p} | P_x | \psi \rangle = p_x \langle \mathbf{p} | \psi \rangle$$

$$\langle \mathbf{p} | P_y | \psi \rangle = p_y \langle \mathbf{p} | \psi \rangle$$

$$\langle \mathbf{p} | P_z | \psi \rangle = p_z \langle \mathbf{p} | \psi \rangle$$

Es decir multiplican por p_x , p_y y p_z respectivamente la transformada de Fourier de la función de onda (o sea, la función de onda en representación p)

* Veamos cómo actúan sobre $|\psi\rangle$ dadas las componentes en representación $|\mathbf{r}\rangle$:

$$\langle \mathbf{r} | P_x | \psi \rangle = \int d^3 p \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | P_x | \psi \rangle = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3 p e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}} p_x \bar{\psi}(\mathbf{p})$$

Esta es la transformada de Fourier inversa de $p_x \bar{\psi}(\mathbf{p})$, es decir $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(\mathbf{r})$

Esta es la relación obtenida por Schrödinger para el operador momento actuando sobre un paquete de ondas.

Demostración en la siguiente página

Interludio: transformada de Fourier de la derivada

Sea $\psi(\mathbf{r})$ una función cualquiera de las coordenadas (con algún significado en MQ o sin él) y $\bar{\psi}(\mathbf{p})$ su transformada de Fourier, es decir que se cumple:

$$\psi(\mathbf{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3 p e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \bar{\psi}(\mathbf{p})$$

Entonces la transformada de Fourier de una de sus derivadas parciales es

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial x} &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3 p \frac{\partial e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z)}}{\partial x} \bar{\psi}(\mathbf{p}) = \\ &= (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3 p \left(\frac{i}{\hbar} \right) p_x e^{\frac{i}{\hbar}(p_x x + p_y y + p_z z)} \bar{\psi}(\mathbf{p}) = \frac{i}{\hbar} (2\pi\hbar)^{-3/2} \int p_x e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \bar{\psi}(\mathbf{p}) d^3 p \end{aligned}$$

Por tanto se cumple que $(2\pi\hbar)^{-3/2} \int p_x e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}} \bar{\psi}(\mathbf{p}) d^3 p = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi(\mathbf{r})}{\partial x}$

Volvemos al operador \mathbf{P}

Agrupando los tres operadores P_x, P_y, P_z en un solo símbolo vectorial tenemos que

$$\langle \mathbf{r} | P_x | \psi \rangle = \frac{\hbar}{i} \nabla \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = -i\hbar \nabla \psi(\mathbf{r})$$

Donde el operador “nabla” ∇ es el **operador vectorial gradiente**, que actúa sobre funciones

El **elemento de matriz** de P_x (análogamente P_y o P_z) entre dos kets $|\varphi\rangle$ y $|\psi\rangle$, calculándolo en representación $|\mathbf{r}\rangle$ es:

$$\langle \varphi | P_x | \psi \rangle = \int d^3 r \langle \varphi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | P_x | \psi \rangle = -i\hbar \int d^3 r \varphi(\mathbf{r})^* \nabla \psi(\mathbf{r})$$

Y calculándolo en representación $|\mathbf{p}\rangle$ es:

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

Que es matemáticamente igual

Relaciones de conmutación entre **R** y **P**

Calculemos el conmutador $[X, P_x]$

* Usando funciones de onda del espacio \mathcal{F}

$$[X, P_x]\psi(xyz) = XP_x\psi - P_xX\psi = -i\hbar\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}(x\psi)\right) = -i\hbar\left(x\frac{\partial\psi}{\partial x} - \psi - x\frac{\partial\psi}{\partial x}\right) = i\hbar\psi$$

O sea: $[X, P_x] = i\hbar 1$

Por no hacer pesada la notación escribiremos: $[X, P_x] = i\hbar$

Pero $[X, P_x]$ es un operador, no un número

* Usando kets en \mathcal{E}_r y notación de Dirac:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{r} | [X, P_x] | \psi \rangle &= \langle \mathbf{r} | XP_x - P_x X | \psi \rangle = x \langle \mathbf{r} | P_x | \psi \rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle \mathbf{r} | X | \psi \rangle = \\ &= \frac{\hbar}{i} x \frac{\partial}{\partial x} \langle \mathbf{r} | \psi \rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x \langle \mathbf{r} | \psi \rangle) = -\frac{\hbar}{i} \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = i\hbar \langle \mathbf{r} | \psi \rangle \Rightarrow [X, P_x] = i\hbar\end{aligned}$$

Análogamente se prueba que $[X, Y] = 0$, o que $[X, P_y] = 0$

Resumiendo, llamando a las coordenadas del espacio físico $x, y, z \leftrightarrow 1, 2, 3$

$$\left. \begin{array}{l} [R_i, R_j] = 0 \\ [P_i, P_j] = 0 \\ [R_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij} \end{array} \right\} i, j = 1, 2, 3$$

No es difícil mostrar (Cohen E-31, ... E-39) que $\{X, Y, Z\}$ forman un CSCO, y que $\{P_x, P_y, P_z\}$ forman otro CSCO distinto. También $\{X, P_y, P_z\}$ forman un CSCO pero menos usado

6. Postulados de la Mecánica Cuántica

Postulado 1: En un instante dado cualquiera t_0 , el estado físico de un sistema está completamente **determinado por un ket** $|\psi(t_0)\rangle$ perteneciente a un espacio de “estados” \mathcal{E} con todas las propiedades matemáticas indicadas anteriormente.

El mero hecho de que \mathcal{E} es un espacio vectorial **implica inmediatamente el principio de superposición:** cualquier combinación lineal de dos kets es también un ket del espacio y puede representar una situación física .

Postulado 2: (sobre las magnitudes físicas) Cualquier magnitud física \mathcal{A} que pueda medirse se corresponde con un operador observable A que actúa en el espacio \mathcal{E} .

Postulado 3: (sobre la medida) El resultado de medir una magnitud física \mathcal{A} es un valor propio del operador correspondiente A .

El resultado será siempre un número real ya que un observable es siempre hermítico.

7. Postulado 4: Probabilidad de obtener un resultado dado

* El “espectro”, o conjunto de autovalores, del observable A puede ser **discreto** o **continuo**, **degenerado** (si hay más de un autovector correspondiente a algún autovalor) o **no degenerado** (si sólo hay un autovector correspondiente a cada autovalor)

* Supongamos el espectro de A **discreto y no degenerado**: Sean $\{a_n | n = 1, 2, 3, \dots\}$ los autovalores de A .

* A cada uno le corresponde un único autovector $|u_n\rangle$ (salvo por un factor numérico) y $\{|u_n\rangle\}$ **es una base ortonormal**

Cualquier ket $|\psi\rangle$ norma unidad se puede escribir como: $|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle$

Postulado 4a (caso de espectro discreto no degenerado):

Si un sistema está en el estado $|\psi\rangle$, la probabilidad de obtener el valor a_n en una medida del observable A es:

$$\mathcal{P}(a_n) = \left| \langle u_n | \psi \rangle \right|^2 = |c_n|^2$$

Si $|\psi\rangle$ no está normalizado es:

$$\mathcal{P}(a_n) = \frac{|c_n|^2}{\sum_j |c_j|^2}$$

Caso de espectro discreto degenerado

Si hay valores propios de A degenerados todavía existe al menos una base ortonormal de autovectores de A , pero varios de ellos pueden corresponder al mismo autovalor.

Escribamos $|\psi\rangle$ como combinación lineal de los vectores de la base poniendo un índice más para numerar los que corresponden a un mismo autovalor ($g_n =$ número de ellos = “degeneración” del autovalor a_n)

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle$$

Postulado 4b (caso de espectro discreto degenerado):

Si un sistema está en el estado $|\psi\rangle$, la probabilidad de obtener el valor a_n en una medida del observable A es:

$$\mathcal{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} \left| \langle u_n^i | \psi \rangle \right|^2 = \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2$$

Caso de espectro continuo no degenerado

• Supongamos el espectro de A continuo y no degenerado: Sean $\{\alpha\} \subset \mathbb{R}$ los autovalores de A y $|v_\alpha\rangle$ sus autovectores correspondientes

$$|\psi\rangle = \int d\alpha c(\alpha) |v_\alpha\rangle$$

* Todo es exactamente igual pero la probabilidad de obtener en una medida exactamente un valor α es cero, porque hay un infinito no numerable de valores posibles

* La probabilidad de obtener un valor comprendido entre α y $\alpha+d\alpha$ es el valor infinitesimal

$$d\mathcal{P}(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha = |c(\alpha)|^2 d\alpha$$

* El número real finito $\rho(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2 = |c(\alpha)|^2$ se llama densidad de probabilidad

Postulado 4c (caso de espectro continuo no degenerado):

Si un sistema está en el estado $|\psi\rangle$, de probabilidad de obtener un valor entre α y $\alpha+d\alpha$ en una medida del observable A es:

$$d\mathcal{P}(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2 d\alpha = |c(\alpha)|^2 d\alpha$$

Explicación de los postulados 3 y 4 con un ejemplo

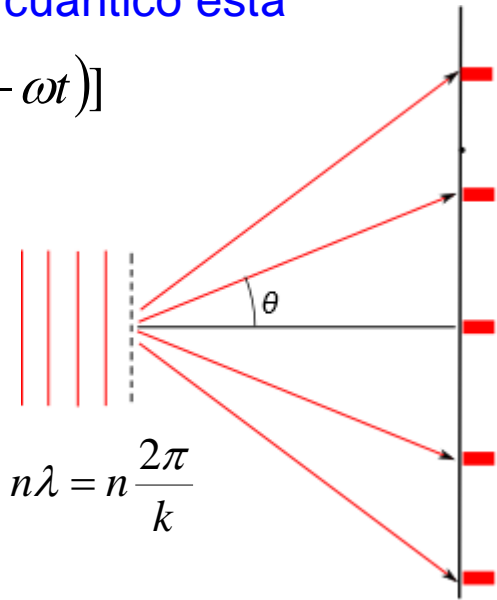
Supongamos que tenemos una partícula cuyo estado cuántico está descrito por una onda plana:

$$\psi(x, y, z) = A \exp[i(kx - \omega t)]$$

Para **medir el momento**, $p_x = \hbar k$, la hacemos incidir sobre una red de difracción cuya distancia conocida entre rendijas es d .

Con una onda clásica determinamos la longitud de onda, (y por tanto k) porque debe cumplirse $d \sin \theta = n\lambda = n \frac{2\pi}{k}$

Basta ver los puntos (manchas rojas) dónde sale iluminada la pantalla para obtener k .



Si lanzamos **una sola partícula cuántica**, dará en la pantalla **en un solo punto**, pero será (y ocurre todos los días en miles de experimentos) necesariamente uno de los marcados en rojo, con probabilidad proporcional a la intensidad de la onda en ese punto.

Usando el **lenguaje de los espacios vectoriales**, resulta que la función de onda dada es un **vector propio** del operador $P_x = \hbar K_x$, y sale siempre el **valor propio** correspondiente.

¿Qué pasa con una onda clásica cuando es una superposición de dos ondas de k 's diferentes?

$$\psi(x, y, z) = A_1 \exp(ik_1 x) + A_2 \exp(ik_2 x)$$

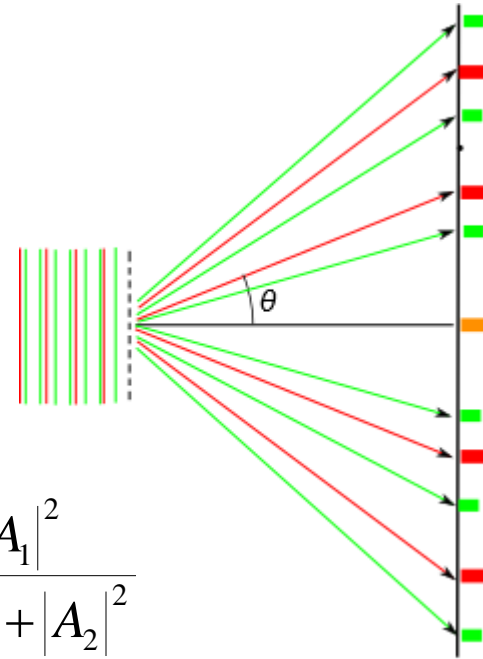
Salen manchas en los puntos que corresponden a k_1 (roja) y k_2 (verde), con intensidad proporcional a $|A_1|^2$ y $|A_2|^2$

Si es una partícula cuántica puede ir a una cualquiera de las manchas rojas con probabilidad

... o a una de las verdes, con probabilidad

$$P(k_1) = \frac{|A_1|^2}{|A_1|^2 + |A_2|^2}$$

$$P(k_2) = \frac{|A_2|^2}{|A_1|^2 + |A_2|^2}$$



En el lenguaje de los espacios vectoriales, la función de onda es una combinación lineal de vectores propios del operador $P_x = \hbar k_x$ y pueden salir los valores propios correspondientes con probabilidad proporcional a los cuadrados de los coeficientes

8. Postulado 5: Colapso de la función de onda

Postulado 5

Si un sistema está en el estado $|\psi\rangle$, y al hacer una medida del observable A se obtiene el valor a_n , entonces el estado posterior a la medida es la **proyección** de $|\psi\rangle$ sobre el subespacio propio de a_n , (llamémoslo \mathcal{E}_n) normalizada

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle$$

Es decir que si los kets $\{|u_n^i\rangle\}$ forman una base ortonormal del subespacio \mathcal{E}_n (todos ellos corresponden a un mismo autovalor a_n), si la medida de A resulta a_n , **el estado después de la medida es**

$$|\psi\rangle_{\text{despues}} = \frac{P_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | P_n | \psi \rangle}}; \quad \text{con } P_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i|$$

9. Postulado 6: Evolución temporal: ecuación de Schrödinger (generalizada)

Postulado 6

Si el estado $|\psi(t)\rangle$ varía en el tiempo y si $H(t)$ es el operador hamiltoniano (luego lo repasaremos en MCL), la evolución temporal de $|\psi(t)\rangle$ se rige por la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H(t)|\psi(t)\rangle$$

O entiéndase a la inversa: el hamiltoniano de un sistema físico es un observable que da la evolución temporal del vector de estado según la ecuación anterior.

10. Lagrangiano y Hamiltoniano en Mecánica Clásica (Cohen et al, Apéndice III, o libros de MCL)

En Mecánica Clásica se llaman coordenadas generalizadas $\{q_j\}$ a un conjunto de números (elegido por conveniencia) que especifican unívocamente la posición de todas las partículas de un sistema clásico.

Por ejemplo en el caso de un sólido rígido pueden tomarse las tres coordenadas del CDM y tres ángulos de Euler que indican la orientación del cuerpo en el espacio, es decir $q_1 = x_{\text{CDM}}$, $q_2 = y_{\text{CDM}}$, $q_3 = z_{\text{CDM}}$, $q_4 = \varphi$, $q_5 = \theta$, $q_6 = \psi$.

Se llaman **velocidades generalizadas** $\{\dot{q}_i\}$ a las derivadas de $\{q_j\}$ respecto del tiempo.

El **lagrangiano** $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ es una función de las coordenadas, velocidades generalizadas, y del tiempo que permite obtener las ecuaciones del movimiento mediante las ecuaciones de Euler-Lagrange:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0$$

Los **momentos** conjugados canónicos $\{p_i\}$ se definen como las derivadas de L respecto de las $\{q_i\}$

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$$

La Mecánica Clásica demuestra que si L no depende explícitamente del tiempo (aunque puede variar implícitamente con el tiempo porque lo hacen las coordenadas y velocidades) es la energía cinética menos la potencial

$$L = T - V$$

El **hamiltoniano** $H(p_i, q_i, t)$ se define como menos la transformada de Legendre del lagrangiano:

$$H(p_i, q_i, t) = \sum_i p_i \dot{q}_i - L(p_i, q_i)$$

Donde se hacen desaparecer las velocidades sustituyéndolas en función de los momentos mediante la definición.

Las **ecuaciones del movimiento** se pueden obtener a partir del hamiltoniano mediante las llamadas ecuaciones de Hamilton

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad \frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}$$

Una propiedad importante del hamiltoniano es que si no depende explícitamente del tiempo (el sistema se llama “autónomo”) se conserva, es decir p_i y q_i varían con el tiempo de modo que $H = cte$.

Si además es “natural” (la posición de todas las partículas depende sólo de las coordenadas generalizadas que varían, pero las ecuaciones que relacionan las q_i y las coordenadas cartesianas no contienen explícitamente del tiempo) se cumple:

$$H = T + V = cte$$

Ejemplo de sistema autónomo no natural

$$H = cte, \text{ pero } H \neq E$$

Un ejemplo de sistema no natural pero sí autónomo es una bola ensartada sin rozamiento en una varilla horizontal recta que gira forzosamente alrededor de un eje vertical con velocidad angular constante.

Este sistema tiene un solo grado de libertad, tomemos $q = r =$ distancia al eje y su movimiento queda descrito por el hamiltoniano,

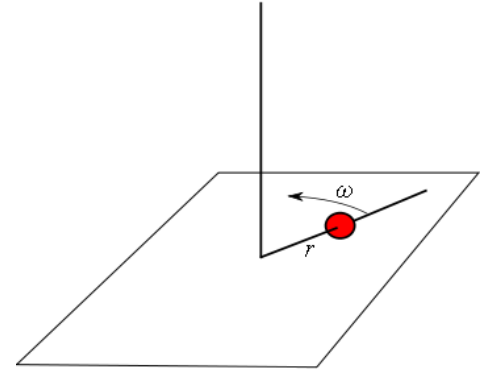
$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{2}m\omega^2 q^2$$

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}$$

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} = m\omega^2 q \Rightarrow \frac{d^2 q}{dt^2} = \frac{1}{m} \frac{dp}{dt} = \omega^2 q \Rightarrow q(t) = Ae^{\omega t} + Be^{-\omega t}$$

$$p(t) = m \frac{dq}{dt} = m\omega(Ae^{\omega t} - Be^{-\omega t}) \quad v_r = \frac{dr}{dt} = \omega(Ae^{\omega t} - Be^{-\omega t}) = \frac{p}{m}$$

$$H = \frac{1}{2}m\omega^2(A^2 e^{2\omega t} + B^2 e^{-2\omega t} - 2AB) - \frac{1}{2}m\omega^2(A^2 e^{2\omega t} + B^2 e^{-2\omega t} + 2AB) = 2ABm\omega^2 = cte$$



El significado físico de las constantes de integración se puede ver calculando los valores iniciales de $r(0)=r_0 = q(0)$ y $v_r(0)=v_{r0} = p(0)/m$

$$r_0 = q(0) = A + B \quad v_{r0} = \frac{p(0)}{m} = \omega(A - B) \Rightarrow A = \frac{1}{2} \left(r_0 + \frac{v_0}{\omega} \right); B = \frac{1}{2} \left(r_0 - \frac{v_0}{\omega} \right)$$

Si consideramos el caso particular en que $A = B$, la partícula comienza sin velocidad inicial (en el sistema rotante) $r_0 = 2A$,

$$r(t) = A \left[e^{\omega t} + e^{-\omega t} \right] = r_0 \cosh \omega t$$

Todo esto se comprende porque el problema se puede resolver (en este caso muy fácilmente) usando la formulación elemental, en un sistema giratorio en el que hay que incluir fuerzas de inercia (en este caso la centrífuga) y ninguna fuerza real. El problema se hace 1D y la ley de Newton para sistemas giratorios es:

$$m\omega^2 r = m \frac{d^2 r}{dt^2} \Rightarrow r(t) = Ae^{\omega t} + Be^{-\omega t}$$

En cambio la energía, únicamente cinética, de la partícula (en el caso $A=B$) es:

$$E \equiv T = \frac{1}{2} m (r^2 \omega^2 + v_r^2) = \frac{1}{2} m (\omega^2 r_0^2 \cosh^2 \omega t + \omega^2 r_0^2 \sinh^2 \omega t) = \frac{1}{2} m \omega^2 r_0^2 (1 + 2 \cosh^2 \omega t) \neq cte$$

La energía no es constante porque para conseguir este movimiento se necesitan fuerzas externas que mantengan constante la velocidad angular de la varilla.

De hecho, volviendo al sistema rotatorio, la condición de movimiento exclusivamente radial implica que la fuerza perpendicular (normal \mathbf{N}) que ejerce la varilla sobre la bola es igual a m por la aceleración de Coriolis:

$$\mathbf{N} = 2m(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{v}); N = 2m\omega v_r$$

La potencia suministrada por \mathbf{N} es $P = N\omega r = 2m\omega^2 r v_r = 2m\omega^3 r_0^2 \cosh \omega t \sinh \omega t$

Mientras la derivada de la energía respecto del tiempo

$$\frac{dE}{dt} = 2m\omega^3 r_0^2 \cosh \omega t \sinh \omega t$$

QUE OBVIAMENTE COINCIDEN

De no existir fuerzas externas que mantengan la varilla girando (es decir sólo hay fuerzas aplicadas en el extremo de la varilla para que no se suelte de allí), la energía y el momento angular totales se conservarían y la varilla iría adaptando su posición y velocidad angular ($\omega \neq cte$) al movimiento de la bola. (Estudiar el problema)

11. Operadores cuánticos que corresponden a magnitudes de la Física Clásica: reglas de cuantificación

Consideremos una partícula con spin = 0 (“sin spin” dicen C-T, D, L) .
Esto no es un postulado más ya que la MQ es consistente en sí misma, pero cuando el movimiento es aproximadamente según las leyes de la Mecánica Clásica se observa que:

La **posición clásica** $\mathbf{r}(x,y,z)$ es el valor esperado del observable \mathbf{R} :

$$\mathbf{r}(x, y, z) = \langle \psi | \mathbf{R} | \psi \rangle = (\langle \psi | X | \psi \rangle, \langle \psi | Y | \psi \rangle, \langle \psi | Z | \psi \rangle)$$

El **momento clásico** $\mathbf{p}(p_x, p_y, p_z)$ es el valor esperado del observable \mathbf{P} :

Una **magnitud clásica** $\mathcal{A}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ se obtendría en principio sustituyendo \mathbf{r} y \mathbf{p} por sus correspondientes operadores cuánticos \mathbf{R} , y \mathbf{P} , es decir $A(t) = \mathcal{A}(\mathbf{R}, \mathbf{P}, t)$ pero no es así porque \mathbf{R} y \mathbf{P} no conmutan y $\mathbf{R} \cdot \mathbf{P}$ no es hermítico.

En su lugar el producto $\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$ se reemplaza por el producto simetrizado:

$$\frac{1}{2}(\mathbf{R} \cdot \mathbf{P} + \mathbf{P} \cdot \mathbf{R})$$

Nota: hay magnitudes que no tienen sentido en MCL (como el spin) pero son perfectamente observables.

El hamiltoniano: partícula sin spin en un potencial escalar

El hamiltoniano clásico es $\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r})$; siendo $\mathbf{p} = m\mathbf{v} = m \frac{d\mathbf{r}}{dt}$

Según las reglas de cuantificación el hamiltoniano cuántico es

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R})$$

Siendo $\mathbf{P}(P_x, P_y, P_z)$ y $\mathbf{R}(X, Y, Z)$ los correspondientes operadores momento y posición

La ec. de Schrödinger se escribe como: $i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{R}) \right] |\psi(t)\rangle$

Y en representación $|\mathbf{r}\rangle$ se tiene $\mathbf{P} = -i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right) = -i\hbar \nabla$

Con lo que la ec. queda como la escribió Schrödinger

$$i\hbar \frac{d\psi(x, y, z, t)}{dt} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z) \right] \psi(x, y, z, t)$$

El hamiltoniano: partícula con carga q en un campo electromagnético de potenciales escalar U , y vector \mathbf{A}

(Ver Cohen, C. III, 3-5-b- β , y Complemento HIII)

El hamiltoniano clásico es $\mathcal{H} = \frac{1}{2m} [\mathbf{p} - q\mathbf{A}(r,t)]^2 + qU(\mathbf{r},t)$

Demostración: La fuerza clásica sobre la partícula es:

$$\mathbf{F} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$$

Y la 2ª ley de Newton: $q \left[-\nabla U - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} + \mathbf{v} \times (\nabla \times \mathbf{A}) \right] = m \frac{d\mathbf{v}}{dt}$

Partiendo del hamiltoniano (coord. grals. x,y,z, p_x, p_y, p_z) la 1ª ec de Hamilton:

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_x} = \frac{1}{m} [\mathbf{p} - q\mathbf{A}] \cdot \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial p_x} = \frac{1}{m} [\mathbf{p} - q\mathbf{A}] \cdot (1,0,0) = \frac{1}{m} [p_x - qA_x]$$

Y juntando las 3 componentes en una ec. vectorial: $\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{m} [\mathbf{p} - q\mathbf{A}]$

Lo que nos dice que el momento canónico \mathbf{p} no coincide con la definición elemental de momento lineal $m\mathbf{v}$:

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} + q\mathbf{A}$$

La 2ª ec de Hamilton
(tomemos p_x):

$$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial x} = -q \frac{\partial U}{\partial x} - \frac{1}{m} [\mathbf{p} - q\mathbf{A}] \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x} = -q \frac{\partial U}{\partial x} - \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x}$$

Introduciendo el resultado de la primera:

$$m \frac{dv_x}{dt} + q \frac{\partial A_x}{\partial t} = -q \frac{\partial U}{\partial x} - q \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x} \Rightarrow m \frac{dv_x}{dt} = -q \frac{\partial U}{\partial x} - q \frac{\partial A_x}{\partial t} - q \mathbf{v} \cdot \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial x}$$

De los tres términos de la derecha se pueden interpretar como (al menos en la aproximación casi estacionaria) el 1º es la fuerza electrostática del campo producido por cargas externas, el 2º el campo eléctrico producido por la variación temporal del campo magnético (ley de inducción).

$$\mathbf{E} = -\nabla U - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$$

El 3º (usando relaciones vectoriales) se ve que coincide exactamente con la fuerza magnética de Lorentz $q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$

Notar que \mathcal{H} depende explícitamente de t y no siempre es la energía.
Para la energía magnética ver Callen Thermodynamics Ap. B, o Feynman II, 15-2

Ec de Schrödinger de una partícula cargada en un campo electromagnético

Según lo visto arriba

$$H(t) = \frac{1}{2m} [\mathbf{P} - q\mathbf{A}(\mathbf{R}, t)] + qU(\mathbf{R}, t)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \left\{ \frac{1}{2m} [\mathbf{P} - q\mathbf{A}(\mathbf{R}, t)] + qU(\mathbf{R}, t) \right\} |\psi(t)\rangle$$

Y en representación $|\mathbf{r}\rangle$ se tiene

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left\{ \frac{1}{2m} [-i\hbar \nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)] + qU(\mathbf{r}, t) \right\} \psi(\mathbf{r}, t)$$