¿Qué es una teoría física?

Renato Álvarez-Nodarse

Sevilla, MMAF, enero 2011

Contenidos

Generalidades

La Física se basa en medidas y observaciones experimentales de la realidad que nos rodea, es decir, en cuantificar o caracterizar los distintos fenómenos naturales mediante expresiones cuantitativas o números.

Generalidades

La Física se basa en medidas y observaciones experimentales de la realidad que nos rodea, es decir, en cuantificar o caracterizar los distintos fenómenos naturales mediante expresiones cuantitativas o números.

Estas cantidades medibles u observables se denominan *cantidades físicas* (e.g. longitud, velocidad, energía, . . .).

Generalidades

La Física se basa en medidas y observaciones experimentales de la realidad que nos rodea, es decir, en cuantificar o caracterizar los distintos fenómenos naturales mediante expresiones cuantitativas o números.

Estas cantidades medibles u observables se denominan *cantidades físicas* (e.g. longitud, velocidad, energía, ...).

El objeto o conjunto de objetos a estudiar se denomina *sistema físico* (e.g. una partícula, un átomo, un coche, ...). Cuando conocemos distintas medidas de un sistema que lo caracterizan por completo en un momento (e.g. la posición y la velocidad de una partícula de masa m) decimos que el sistema se encuentra en un cierto *estado* dado.

¿Qué es una teoría física?

El objetivo de toda teoría física es, por tanto:

1. Describir el estado del sistema físico, es decir, dar una representación cuantitativa (matemática) del estado que lo defina biunívocamente.

¿Qué es una teoría física?

El objetivo de toda teoría física es, por tanto:

1. Describir el estado del sistema físico, es decir, dar una representación cuantitativa (matemática) del estado que lo defina biunívocamente.
2. Conocer la *dinámica* del sistema, es decir dado un estado inicial en el momento t_0 conocer su evolución temporal para $t > t_0$.

¿Qué es una teoría física?

El objetivo de toda teoría física es, por tanto:

1. Describir el estado del sistema físico, es decir, dar una representación cuantitativa (matemática) del estado que lo defina biunívocamente.
2. Conocer la *dinámica* del sistema, es decir dado un estado inicial en el momento t_0 conocer su evolución temporal para $t > t_0$.
3. Predecir los resultados de las mediciones de las cantidades físicas del sistema.

¿Qué es una teoría física?

El objetivo de toda teoría física es, por tanto:

1. Describir el estado del sistema físico, es decir, dar una representación cuantitativa (matemática) del estado que lo defina biunívocamente.
2. Conocer la *dinámica* del sistema, es decir dado un estado inicial en el momento t_0 conocer su evolución temporal para $t > t_0$.
3. Predecir los resultados de las mediciones de las cantidades físicas del sistema.

¿Qué es una teoría física?

La teoría física en sí misma está en general constituida, desde el punto de vista abstracto, por tres apartados:

1. El formalismo: Conjunto de símbolos y reglas de deducción a partir de los cuales se pueden deducir proposiciones y enunciados. En general toda teoría comienza postulando un cierto número de *axiomas*.

¿Qué es una teoría física?

La teoría física en sí misma está en general constituida, desde el punto de vista abstracto, por tres apartados:

1. El formalismo: Conjunto de símbolos y reglas de deducción a partir de los cuales se pueden deducir proposiciones y enunciados. En general toda teoría comienza postulando un cierto número de *axiomas*.
2. Ley dinámica: Cierta relación (o relaciones) entre algunos de los principales objetos del formalismo que permitan predecir acontecimientos futuros.

¿Qué es una teoría física?

La teoría física en sí misma está en general constituida, desde el punto de vista abstracto, por tres apartados:

1. El formalismo: Conjunto de símbolos y reglas de deducción a partir de los cuales se pueden deducir proposiciones y enunciados. En general toda teoría comienza postulando un cierto número de *axiomas*.
2. Ley dinámica: Cierta relación (o relaciones) entre algunos de los principales objetos del formalismo que permitan predecir acontecimientos futuros.
3. Reglas de correspondencia o interpretación física: Conjunto de reglas que permiten asignar valores experimentales a algunos de los símbolos del formalismo.

La mecánica newtoniana

En la mecánica newtoniana el estado de un sistema viene dado por el conjunto de trayectorias de las partículas que lo constituyen.

La mecánica newtoniana

En la mecánica newtoniana el estado de un sistema viene dado por el conjunto de trayectorias de las partículas que lo constituyen.

Para una partícula, el estado estará dado por la función $\vec{r}(t) \in \mathbb{R}^3$ que denota la posición en cada instante de tiempo t. Los observables son las cantidades medibles, e.g. la posición $\vec{r}(t)$, la velocidad $\vec{v}(t) = d/dt[\vec{r}(t)]$, la energía cinética $T = mv^2(t)$, etc.

La mecánica newtoniana

En la mecánica newtoniana el estado de un sistema viene dado por el conjunto de trayectorias de las partículas que lo constituyen.

Para una partícula, el estado estará dado por la función $\vec{r}(t) \in \mathbb{R}^3$ que denota la posición en cada instante de tiempo t. Los observables son las cantidades medibles, e.g. la posición $\vec{r}(t)$, la velocidad $\vec{v}(t) = d/dt[\vec{r}(t)]$, la energía cinética $T = mv^2(t)$, etc.

La ley dinámica en es la segunda ley de Newton:

$$m\vec{a}(t) = \vec{F}(t), \qquad \vec{a}(t) = \frac{d^2\vec{r}(t)}{dt^2}.$$

La mecánica newtoniana

En la mecánica newtoniana el estado de un sistema viene dado por el conjunto de trayectorias de las partículas que lo constituyen.

Para una partícula, el estado estará dado por la función $\vec{r}(t) \in \mathbb{R}^3$ que denota la posición en cada instante de tiempo t. Los observables son las cantidades medibles, e.g. la posición $\vec{r}(t)$, la velocidad $\vec{v}(t) = d/dt[\vec{r}(t)]$, la energía cinética $T = mv^2(t)$, etc.

La ley dinámica en es la segunda ley de Newton:

$$m\vec{a}(t) = \vec{F}(t), \qquad \vec{a}(t) = \frac{d^2\vec{r}(t)}{dt^2}.$$

Las reglas de correspondencia consisten en los valores numéricos de las proyecciones de los vectores $\vec{r}$, $\vec{v}$, etc. sobre los ejes del sistema de coordenadas escogido.

El formalismo de Hamilton-Jacobi

Vamos a suponer que el espacio físico es un espacio de fases $(\vec{r}, \vec{p})$, donde $\vec{r} = (x, y, z) \in \mathbb{R}^3$ y $\vec{p} = (p_x, p_y, p_z)$ denotan las componentes del vector posición y momento, respectivamente. Definamos una función H dependiente de la posición $\vec{r}$ y el impulso $\vec{p}$

$$H(\vec{r}, \vec{p}) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x, y, z),$$

que denominaremos hamiltoniano del sistema.

El formalismo de Hamilton-Jacobi

Entonces, las ecuaciones dinámicas del sistema vienen dadas por las expresiones

Las ecuaciones de Hamilton-Jacobi

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p_x}, & \frac{dp_x}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial x}, \\ \frac{dy}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p_y}, & \frac{dp_y}{\partial t} &= -\frac{\partial H}{\partial y}, \\ \frac{dz}{\partial t} &= \frac{\partial H}{\partial p_z}, & \frac{dp_z}{\partial t} &= -\frac{\partial H}{\partial z}. \end{aligned} \tag{1}$$

El formalismo de Hamilton-Jacobi

Así, si

$$H(\vec{r},\vec{p}) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + V(x,y,z),$$

las ecuaciones (1) nos dan

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_x} \quad \Longrightarrow \quad v_x = \frac{p_x}{m}, \quad p_x = m v_x,$$

$$\frac{dp_x}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x} \quad \Longrightarrow \quad m\frac{dv_x}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x} = F_x \quad \Longrightarrow \quad m\frac{d^2x}{dt^2} = F_x,$$

es decir, recuperamos las ecuaciones de Newton de la mecánica clásica.

Ejemplo: El oscilador armónico

Comencemos con un sistema clásico de gran importancia: el oscilador armónico. Asumiremos que el eje de coordenadas está situado justo en la posición de equilibrio del oscilador, luego por x representaremos la desviación del sistema del punto de equilibrio.

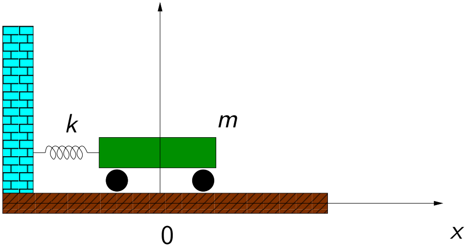

Figura: El oscilador armónico

Ejemplo: El oscilador armónico

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \quad \Longrightarrow \tag{2}$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial H(x,p)}{\partial p}, \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H(x,p)}{\partial x} \Longrightarrow$$

$$\frac{dx}{dt} = \frac{p}{m}, \quad \frac{dp}{dt} = -kx \Longrightarrow mx''(t) + kx(t) = 0.$$

Sus soluciones son

$$x(t) = A\cos(\omega t + \delta), \quad \omega = \sqrt{\frac{k}{m}},$$

donde A y δ dependerán de $x_0 = x(0)$, $v_0 = v(0)$: $v_0 = -\omega x_0 \tan\delta$ y $x_0 = A\cos\delta$. No hay restricciones para A y δ.

Ejemplo: El oscilador armónico

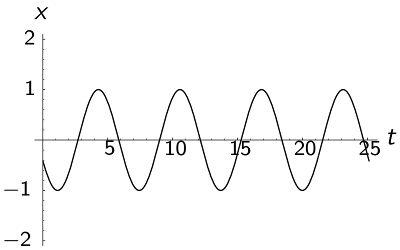

Figura: El oscilador armónico: soluciones

Ejemplo: El oscilador armónico

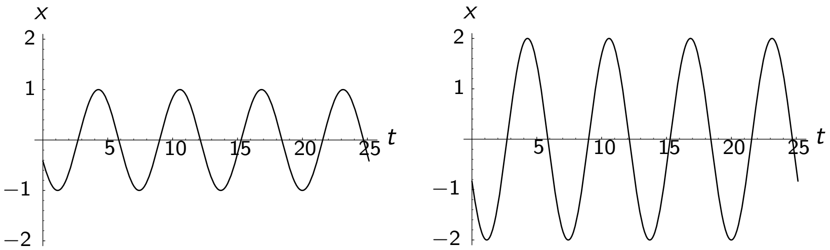

Figura: El oscilador armónico: soluciones

La energía $E \geq 0$ y es una cantidad continua

$$E = T + V = \frac{1}{2}m[x(t)']^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}kA^2 = \text{const.}$$

Los espacios de Hilbert y la Mecánica Cuántica

Renato Álvarez-Nodarse

Sevilla, enero de 2011

Contenidos

Postulado I

Postulado

A cada sistema físico se le hace corresponder un espacio de Hilbert $\mathbb{H}$ apropiado (separable). Además, para cada $t \in \mathbb{R}$ (parámetro correspondiente al tiempo) el estado queda completamente caracterizado por un vector Ψ normalizado a la unidad de $\mathbb{H}$.

Postulado I

Postulado

A cada sistema físico se le hace corresponder un espacio de Hilbert $\mathbb{H}$ apropiado (separable). Además, para cada $t \in \mathbb{R}$ (parámetro correspondiente al tiempo) el estado queda completamente caracterizado por un vector Ψ normalizado a la unidad de $\mathbb{H}$.

Es decir, para cada t el estado está determinado por un vector de $\mathbb{H}$ tal que $\|\Psi\| = 1$. De aquí también se sigue que, dados los estados $\Psi_1, \ldots, \Psi_k$, la combinación lineal $\Phi = \sum_{k=1}^{n} \alpha_k \Psi_k$ también es un (posible) estado.

Nótese que para cada $t \in \mathbb{R}$ el vector Ψ siempre se puede normalizar a la unidad (a no ser $\Psi = 0$).

Postulado II

Postulado

A cada magnitud física medible (observable) L se le hace corresponder un operador linear hermítico $\widehat{L}$ *que actúa en* $\mathbb{H}$.

Postulado III

Postulado

Sea Ψ el estado del sistema en el momento t justo antes de la medición de la magnitud (observable) L (asociada al operador $\widehat{L}$). Independientemente de cuál sea el estado original Ψ, el resultado de la medición sólo puede ser un autovalor de $\widehat{L}$.

Postulado III

Postulado

Sea Ψ el estado del sistema en el momento t justo antes de la medición de la magnitud (observable) L (asociada al operador $\widehat{L}$). Independientemente de cuál sea el estado original Ψ, el resultado de la medición sólo puede ser un autovalor de $\widehat{L}$.

Este postulado requiere una aclaración.

Postulado III

Postulado

Sea Ψ el estado del sistema en el momento t justo antes de la medición de la magnitud (observable) L (asociada al operador $\widehat{L}$). Independientemente de cuál sea el estado original Ψ, el resultado de la medición sólo puede ser un autovalor de $\widehat{L}$.

Este postulado requiere una aclaración. Al hacer una medición de $\widehat{L}$ el sistema cambia (las mediciones interfieren en el sistema).
Así pues, antes de medir L el sistema puede estar en *cualquier* estado Ψ, pero al realizar la medición, ésta cambia al sistema y lo deja en el estado determinado por el vector Ψ_λ que es un autovector de $\widehat{L}$ correspondiente a al autovalor λ. Como $\widehat{L}$ es hermítico, sus **autovalores son reales**.

Postulado IV

Postulado

El valor esperado $\langle L \rangle$ de una cantidad física L cuando el sistema se encuentra en el estado Ψ viene dado por el elemento matricial

$$\langle L \rangle = \langle \Psi, \widehat{L}\Psi \rangle.$$

Postulado IV

Postulado

El valor esperado $\langle L\rangle$ de una cantidad física L cuando el sistema se encuentra en el estado Ψ viene dado por el elemento matricial

$$\langle L\rangle = \langle \Psi, \widehat{L}\Psi\rangle.$$

Nótese que, como $\widehat{L}$ es hermítico, entonces

$$\langle \Psi, \widehat{L}\Psi\rangle = \langle \widehat{L}\Psi, \Psi\rangle = \overline{\langle \Psi, \widehat{L}\Psi\rangle} \quad \Longrightarrow \quad \langle L\rangle \in \mathbb{R}.$$

Postulado V

Postulado

Los elementos matriciales de los operadores $\widehat{x}_i$ de la posición (coordenadas) x_i y $\widehat{p}_i$ de los momentos p_i, $i = 1, 2, 3$, donde los índices $i = 1, 2, 3$ corresponden a las proyecciones en los ejes x, y y z, respectivamente, definidos por $\langle \Phi, \widehat{x}_i \Psi \rangle$ y $\langle \Phi, \widehat{p}_i \Psi \rangle$, cualquiera sean Φ y Ψ de $\mathbb{H}$ satisfacen las ecuaciones de evolución

$$\frac{d}{dt}\langle \Phi, \widehat{x}_i \Psi \rangle = \left\langle \Phi, \frac{\partial \widehat{H}}{\partial \widehat{p}_i} \Psi \right\rangle, \quad \frac{d}{dt}\langle \Phi, \widehat{p}_i \Psi \rangle = -\left\langle \Phi, \frac{\partial \widehat{H}}{\partial \widehat{x}_i} \Psi \right\rangle, \quad (1)$$

donde $\widehat{H}$ es el operador asociado a la función de Hamilton del correspondiente sistema clásico (si es que lo hay).

Postulado V

Este postulado tiene un significado físico evidente pues nos indica que el promedio de las cantidades medibles posición, impulso y energía (hamiltoniano) satisfacen las ecuaciones dinámicas de la mecánica hamiltoniana, i.e, en el límite apropiado ($\hbar \to 0$) la mecánica cuántica se transforma en la clásica (principio de correspondencia de Bohr).

Postulado V

Este postulado tiene un significado físico evidente pues nos indica que el promedio de las cantidades medibles posición, impulso y energía (hamiltoniano) satisfacen las ecuaciones dinámicas de la mecánica hamiltoniana, i.e, en el límite apropiado ($\hbar \to 0$) la mecánica cuántica se transforma en la clásica (principio de correspondencia de Bohr).

Proceden unas aclaraciones. En general el Hamiltoniano H de un sistema clásico depende de las coordenadas x_i y los impulsos p_i, $i = 1, 2, 3$, por lo que el operador $\widehat{H}$ se obtiene cambiando las x_i por los correspondientes operadores $\widehat{x}_i$ y p_i por $\widehat{p}_i$. Esto, aunque en apariencia es *trivial*, en general no lo es pues $\widehat{H}$ debe ser hermítico (ya que corresponde a la magnitud física energía). A esto regresaremos en breve, pero antes introduciremos nuestro último postulado.

Postulado VI

Postulado

Los operadores posición $\widehat{x}_i$ *e impulso* $\widehat{p}_i$, $i = 1, 2, 3$, *satisfacen las relaciones de conmutación*

$$[\widehat{x}_k, \widehat{x}_j] = 0 = [\widehat{p}_k, \widehat{p}_j], \quad [\widehat{x}_k, \widehat{p}_j] = i\hbar\delta_{k,j}\widehat{I}, \tag{2}$$

donde $\hbar$ *es una constante e* $i = \sqrt{-1}$.

Postulado VI

Postulado

Los operadores posición $\widehat{x}_i$ e impulso $\widehat{p}_i$, $i = 1, 2, 3$, satisfacen las relaciones de conmutación

$$[\widehat{x}_k, \widehat{x}_j] = 0 = [\widehat{p}_k, \widehat{p}_j], \quad [\widehat{x}_k, \widehat{p}_j] = i\hbar\delta_{k,j}\widehat{I}, \tag{2}$$

donde $\hbar$ es una constante e $i = \sqrt{-1}$.

En particular, de lo anterior se sigue que los operadores $\widehat{x}_k$ y $\widehat{p}_k$ no pueden tener un conjunto completo de autovectores comunes. Este postulado es el análogo de las llaves de Poisson.

Construyendo los operadores cuánticos

1. Supongamos que tenemos una magnitud clásica L que depende de x_i y p_i. Para construir el operador mecano-cuántico sólo tenemos que cambiar los x_i por los $\widehat{x}_i$ y p_i por $\widehat{p}_i$.

Construyendo los operadores cuánticos

1. Supongamos que tenemos una magnitud clásica L que depende de x_i y p_i. Para construir el operador mecano-cuántico sólo tenemos que cambiar los x_i por los $\widehat{x}_i$ y p_i por $\widehat{p}_i$.

Por ejemplo, la energía cinética viene dada por

$$T = \frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m} \quad \Longrightarrow \quad \widehat{T} = \frac{\widehat{p}_1{}^2 + \widehat{p}_2{}^2 + \widehat{p}_3{}^2}{2m},$$

y $V(x_1, x_2, x_3)$ por $\widehat{V} = V(\widehat{x}_1, \widehat{x}_2, \widehat{x}_3)$, siendo ambos operadores hermíticos.

Construyendo los operadores cuánticos

1. Supongamos que tenemos una magnitud clásica L que depende de x_i y p_i. Para construir el operador mecano-cuántico sólo tenemos que cambiar los x_i por los $\widehat{x}_i$ y p_i por $\widehat{p}_i$.

Por ejemplo, la energía cinética viene dada por

$$T = \frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m} \quad \Longrightarrow \quad \widehat{T} = \frac{\widehat{p}_1{}^2 + \widehat{p}_2{}^2 + \widehat{p}_3{}^2}{2m},$$

y $V(x_1, x_2, x_3)$ por $\widehat{V} = V(\widehat{x}_1, \widehat{x}_2, \widehat{x}_3)$, siendo ambos operadores hermíticos.

Esto no siempre ocurre. Imaginemos que el hamiltoniano contiene el término $W_i = x_i p_i$. Entonces, el operador $\widehat{W_i} = \widehat{x}_i \widehat{p}_i$ no puede representar al operador cuántico ya que no es hermítico ($\widehat{x}_i$ y $\widehat{p}_i$ no conmutan.)

Construyendo los operadores cuánticos

1. Supongamos que tenemos una magnitud clásica L que depende de x_i y p_i. Para construir el operador mecano-cuántico sólo tenemos que cambiar los x_i por los $\widehat{x}_i$ y p_i por $\widehat{p}_i$.

Por ejemplo, la energía cinética viene dada por

$$T = \frac{p_1^2 + p_2^2 + p_3^2}{2m} \quad \Longrightarrow \quad \widehat{T} = \frac{\widehat{p}_1{}^2 + \widehat{p}_2{}^2 + \widehat{p}_3{}^2}{2m},$$

y $V(x_1, x_2, x_3)$ por $\widehat{V} = V(\widehat{x}_1, \widehat{x}_2, \widehat{x}_3)$, siendo ambos operadores hermíticos.

Esto no siempre ocurre. Imaginemos que el hamiltoniano contiene el término $W_i = x_i p_i$. Entonces, el operador $\widehat{W_i} = \widehat{x}_i \widehat{p}_i$ no puede representar al operador cuántico ya que no es hermítico ($\widehat{x}_i$ y $\widehat{p}_i$ no conmutan.) En este caso hay que definir $\widehat{W_i}$ por

$$\widehat{W_i} = \frac{1}{2}(\widehat{x}_i \widehat{p}_i + \widehat{p}_i \widehat{x}_i).$$

Interpretación probabilística

2. Supongamos el sistema físico se encuentra en el estado definido por Ψ_n, autovector correspondiente al autovalor λ_n de cierto operador $\widehat{L}$ asociado a la magnitud física L. Entonces

$$\langle \Psi_n, \widehat{L}\Psi_n \rangle = \lambda_n, \quad \langle \Psi_n, \widehat{L}^k \Psi_n \rangle = \lambda_n^k,$$

Supongamos ahora que el sistema se encuentra en el estado Φ que es en una superposición de los estados Ψ_k, $k = 1, 2, \ldots, N$, entonces como $\Phi = \sum_k f_k \Psi_k$ tenemos

$$\langle \Phi, \widehat{L}\Phi \rangle = \sum_k |f_k|^2 \lambda_k.$$

Lo anterior indica, en virtud de postulado 4 que la cantidad $|f_k|^2$ es la probabilidad con que se observa el valor λ_k al hacer una medición.

Los operadores en L^2

3. Escojamos como espacio de Hilbert de nuestro sistema el conjunto de las funciones de cuadrado integrable $\mathbb{H} = L^2(\Omega)$, $\Psi = \Psi(x)$. Definiremos el operador $\widehat{x}_i$ en $L^2(\Omega)$ como el operador $\widehat{x}_i := x_i \widehat{I}$. Luego $\widehat{x}^k \Psi(x) = x^k \Psi(x)$.

Los operadores en L^2

3. Escojamos como espacio de Hilbert de nuestro sistema el conjunto de las funciones de cuadrado integrable $\mathbb{H} = L^2(\Omega)$, $\Psi = \Psi(x)$. Definiremos el operador $\widehat{x}_i$ en $L^2(\Omega)$ como el operador $\widehat{x}_i := x_i \widehat{I}$. Luego $\widehat{x}^k \Psi(x) = x^k \Psi(x)$.

¿Quién es $\widehat{p}_j$? Por simplicidad vamos a trabajar solamente en dimensión 1 (sólo la proyección en el eje de las x). Nuestro objetivo es encontrar un operador $\widehat{p}$ tal que cumpla las relaciones de conmutación (2). Se puede probar que

$$\widehat{p}_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k}.$$

Los operadores en L^2

Del postulado 6 se sigue que

1. $[\widehat{p},\widehat{x}] = \widehat{p}\widehat{x} - \widehat{x}\widehat{p} = -i\hbar\widehat{I}$,
2. $[\widehat{p},\widehat{x}^2] = \widehat{p}\widehat{x}^2 - \widehat{x}^2\widehat{p} = -2i\hbar\widehat{x}$,

$$\vdots$$

3. $[\widehat{p},\widehat{x}^n] = \widehat{p}\widehat{x}^n - \widehat{x}^n\widehat{p} = -ni\hbar\widehat{x}^{n-1} = -i\hbar\dfrac{\partial\widehat{x}^n}{\partial\widehat{x}}$.

Los operadores en L^2

Del postulado 6 se sigue que

1. $[\widehat{p}, \widehat{x}] = \widehat{p}\widehat{x} - \widehat{x}\widehat{p} = -i\hbar\widehat{I}$,
2. $[\widehat{p}, \widehat{x}^2] = \widehat{p}\widehat{x}^2 - \widehat{x}^2\widehat{p} = -2i\hbar\widehat{x}$,

$$\vdots$$

3. $[\widehat{p}, \widehat{x}^n] = \widehat{p}\widehat{x}^n - \widehat{x}^n\widehat{p} = -ni\hbar\widehat{x}^{n-1} = -i\hbar\dfrac{\partial\widehat{x}^n}{\partial\widehat{x}}$.

Luego, para cualquier función analítica $F(z)$ tenemos

$$[\widehat{p}, F(\widehat{x})] = -i\hbar\frac{\partial F(\widehat{x})}{\partial\widehat{x}}, \tag{3}$$

Los operadores en L^2

Del postulado 6 se sigue que

1. $[\widehat{p}, \widehat{x}] = \widehat{p}\widehat{x} - \widehat{x}\widehat{p} = -i\hbar\widehat{I}$,
2. $[\widehat{p}, \widehat{x}^2] = \widehat{p}\widehat{x}^2 - \widehat{x}^2\widehat{p} = -2i\hbar\widehat{x}$,

$$\vdots$$

3. $[\widehat{p}, \widehat{x}^n] = \widehat{p}\widehat{x}^n - \widehat{x}^n\widehat{p} = -ni\hbar\widehat{x}^{n-1} = -i\hbar\dfrac{\partial\widehat{x}^n}{\partial\widehat{x}}$.

Luego, para cualquier función analítica $F(z)$ tenemos

$$[\widehat{p}, F(\widehat{x})] = -i\hbar\frac{\partial F(\widehat{x})}{\partial\widehat{x}}, \tag{3}$$

Análogamente

$$[\widehat{x}, F(\widehat{p})] = i\hbar\frac{\partial F(\widehat{p})}{\partial\widehat{p}}.$$

La ecuación de Schrödinger

En adelante asumiremos que el Hamiltoniano del sistema se expresa mediante la fórmula

$$\widehat{H} = \widehat{T} + \widehat{V}, \quad \widehat{T} = \sum_{i=1}^{3} \frac{\widehat{p}_k^2}{2m},$$

y $\widehat{V} = V(\widehat{x}_1, \widehat{x}_2, \widehat{x}_3) = V(x_1, x_2, x_3)\widehat{I}$ sólo depende de las coordenadas x, y, z.[1]

[1] Recordemos que estamos usando indistintamente la notación x_1, x_2, x_3 y x, y, z para denotar las coordenadas espaciales.

La ecuación de Schrödinger

En adelante asumiremos que el Hamiltoniano del sistema se expresa mediante la fórmula

$$\widehat{H} = \widehat{T} + \widehat{V}, \quad \widehat{T} = \sum_{i=1}^{3} \frac{\widehat{p}_k^2}{2m},$$

y $\widehat{V} = V(\widehat{x}_1, \widehat{x}_2, \widehat{x}_3) = V(x_1, x_2, x_3)\widehat{I}$ sólo depende de las coordenadas x, y, z.[1]

Por simplicidad trabajaremos sólo con la proyección en el eje OX. Como $[\widehat{p}, \widehat{T}] = 0$, tenemos, usando (3) que

$$[\widehat{p}, \widehat{H}] = [\widehat{p}, V(\widehat{x})] = -i\hbar \frac{\partial V(\widehat{x})}{\partial \widehat{x}} = -i\hbar \frac{\partial \widehat{H}}{\partial \widehat{x}} \qquad (4)$$

[1] Recordemos que estamos usando indistintamente la notación x_1, x_2, x_3 y x, y, z para denotar las coordenadas espaciales.

La ecuación de Schrödinger

Supongamos ahora que los vectores de estado no dependen del tiempo (los operadores sí que pueden, en principio, depender del tiempo). Entonces del postulado 5 se tiene que

$$\frac{d\widehat{p}}{dt} = -\frac{\partial \widehat{H}}{\partial \widehat{x}},$$

de donde se sigue que

$$\frac{d\widehat{p}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\widehat{p}, \widehat{H}]. \tag{5}$$

La ecuación de Schrödinger

Supongamos ahora que los vectores de estado no dependen del tiempo (los operadores sí que pueden, en principio, depender del tiempo). Entonces del postulado 5 se tiene que

$$\frac{d\widehat{p}}{dt} = -\frac{\partial \widehat{H}}{\partial \widehat{x}},$$

de donde se sigue que

$$\frac{d\widehat{p}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\widehat{p}, \widehat{H}]. \tag{5}$$

De forma análoga, pero usando que $[\widehat{x}, F(\widehat{p})] = i\hbar \dfrac{\partial F(\widehat{p})}{\partial \widehat{p}}$, se deduce la segunda ecuación de Heisenberg

$$\frac{d\widehat{x}}{dt} = -\frac{i}{\hbar}[\widehat{x}, \widehat{H}]. \tag{6}$$

La ecuación de Schrödinger

Las ecuaciones anteriores se conocen como *ecuaciones dinámicas* de la mecánica cuántica en la *representación de Heisenberg*: es decir, cuando las funciones de onda son vectores independientes del tiempo pero los operadores no lo son.

La ecuación de Schrödinger

Las ecuaciones anteriores se conocen como *ecuaciones dinámicas* de la mecánica cuántica en la *representación de Heisenberg*: es decir, cuando las funciones de onda son vectores independientes del tiempo pero los operadores no lo son.

Obviamente hay otra posibilidad y es que los operadores no dependan del tiempo y las funciones de onda sí. En este caso usando el postulado 5 y la fórmula (4) ($\frac{\partial \widehat{H}}{\partial \widehat{x}} = i/\hbar[\widehat{p}, \widehat{H}]$), obtenemos

$$\frac{d}{dt}\langle \Phi, \widehat{p}\Psi \rangle = -\left\langle \Phi, \frac{\partial \widehat{H}}{\partial \widehat{x}}\Psi \right\rangle = -\frac{i}{\hbar}\langle \Phi, [\widehat{p}, \widehat{H}]\Psi \rangle.$$

La ecuación de Schrödinger

Luego, por un lado,

$$\left\langle \frac{\partial \Phi}{\partial t}, \widehat{p}\Psi \right\rangle + \left\langle \Phi, \widehat{p}\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \Phi}{\partial t}, \widehat{p}\Psi \right\rangle + \left\langle \widehat{p}\Phi, \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle$$

La ecuación de Schrödinger

Luego, por un lado,

$$\left\langle \frac{\partial\Phi}{\partial t}, \widehat{p}\Psi \right\rangle + \left\langle \Phi, \widehat{p}\frac{\partial\Psi}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial\Phi}{\partial t}, \widehat{p}\Psi \right\rangle + \left\langle \widehat{p}\Phi, \frac{\partial\Psi}{\partial t} \right\rangle$$

y, por otro, $\dfrac{i}{\hbar}\langle\Phi, [\widehat{p}, \widehat{H}]\Psi\rangle =$

$$= \frac{i}{\hbar}\Big(\langle\Phi, \widehat{p}\widehat{H}\Psi\rangle - \langle\Phi, \widehat{H}\widehat{p}\Psi\rangle\Big) = \left\langle \widehat{p}\Phi, \frac{i}{\hbar}\widehat{H}\Psi \right\rangle + \left\langle \frac{i}{\hbar}\widehat{H}\Phi, \widehat{p}\Psi \right\rangle,$$

La ecuación de Schrödinger

Luego, por un lado,

$$\left\langle \frac{\partial \Phi}{\partial t}, \widehat{p}\Psi \right\rangle + \left\langle \Phi, \widehat{p}\frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \Phi}{\partial t}, \widehat{p}\Psi \right\rangle + \left\langle \widehat{p}\Phi, \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle$$

y, por otro, $\dfrac{i}{\hbar}\langle \Phi, [\widehat{p}, \widehat{H}]\Psi \rangle =$

$$= \frac{i}{\hbar}\Big(\langle \Phi, \widehat{p}\widehat{H}\Psi \rangle - \langle \Phi, \widehat{H}\widehat{p}\Psi \rangle \Big) = \left\langle \widehat{p}\Phi, \frac{i}{\hbar}\widehat{H}\Psi \right\rangle + \left\langle \frac{i}{\hbar}\widehat{H}\Phi, \widehat{p}\Psi \right\rangle,$$

de donde se sigue que

$$\left\langle \widehat{p}\Phi, \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\widehat{H}\Psi \right\rangle + \left\langle \frac{\partial \Phi}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\widehat{H}\Phi, \widehat{p}\Psi \right\rangle = 0,$$

cualquiera sean los vectores Φ y Ψ.

La ecuación de Schrödinger

Por tanto, necesariamente tenemos

la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \widehat{H}\Psi. \tag{7}$$

La ecuación anterior es la ecuación de evolución de la mecánica cuántica cuando los operadores no dependen del tiempo.

El principio de incertidumbre de Heissenberg

Sean dos operadores hermíticos $\widehat{A}$ y $\widehat{B}$. Definamos los operadores

$$\triangle\widehat{A} = \widehat{A} - \langle A\rangle\widehat{I}, \qquad \triangle\widehat{B} = \widehat{B} - \langle B\rangle\widehat{I},$$

donde $\langle A\rangle$ y $\langle B\rangle$ son los valores medios de $\widehat{A}$ y $\widehat{B}$ en el estado Ψ. Entonces, como $[\widehat{A}, \widehat{B}] = i\widehat{L}$, con $\widehat{L}$ hermítico, $\Longrightarrow [\triangle\widehat{A}, \triangle\widehat{B}] = i\widehat{L}$.

El principio de incertidumbre de Heissenberg

Sean dos operadores hermíticos $\widehat{A}$ y $\widehat{B}$. Definamos los operadores

$$\triangle\widehat{A} = \widehat{A} - \langle A\rangle\widehat{I}, \qquad \triangle\widehat{B} = \widehat{B} - \langle B\rangle\widehat{I},$$

donde $\langle A\rangle$ y $\langle B\rangle$ son los valores medios de $\widehat{A}$ y $\widehat{B}$ en el estado Ψ. Entonces, como $[\widehat{A},\widehat{B}] = i\widehat{L}$, con $\widehat{L}$ hermítico, $\Longrightarrow [\triangle\widehat{A},\triangle\widehat{B}] = i\widehat{L}$.

Las *dispersiones* de las cantidades A y B en el estado Ψ vendrán dadas por

$$\triangle A := \sqrt{\langle\Psi,(\triangle\widehat{A})^2\Psi\rangle} = \|\triangle\widehat{A}\Psi\|,$$

$$\triangle B := \sqrt{\langle\Psi,(\triangle\widehat{B})^2\Psi\rangle} = \|\triangle\widehat{B}\Psi\|.$$

Si usamos la desigualdad de Cauchy-Schwarz

$$\|\triangle\widehat{A}\Psi\|\|\triangle\widehat{B}\Psi\| \geq |\langle\triangle\widehat{A}\Psi,\triangle\widehat{B}\Psi\rangle| \geq |\Im\langle\triangle\widehat{A}\Psi,\triangle\widehat{B}\Psi\rangle|$$

El principio de incertidumbre de Heissenberg

Calculemos la parte imaginaria de

$$\langle \triangle \widehat{A}\Psi, \triangle \widehat{B}\Psi\rangle = \langle \Psi, \triangle \widehat{A} \triangle \widehat{B}|\Psi\rangle$$

–recordemos que A es hermítico, luego $\triangle \widehat{A}$ también lo es pues $\langle A\rangle$ es real–. Obtenemos

$$\begin{aligned}
\Im\langle \Psi, \triangle \widehat{A} \triangle \widehat{B}|\Psi\rangle =& \frac{1}{2i}\left(\langle \Psi, \triangle \widehat{A} \triangle \widehat{B}|\Psi\rangle - \overline{\langle \Psi, \triangle \widehat{A} \triangle \widehat{B}|\Psi\rangle}\right) \\
=& \frac{1}{2i}\left(\langle \Psi, \triangle \widehat{A} \triangle \widehat{B}|\Psi\rangle - \langle \Psi, \triangle \widehat{B}^{+} \triangle \widehat{A}^{+}|\Psi\rangle\right) \\
=& \frac{1}{2i}\left(\langle \Psi, \triangle \widehat{A} \triangle \widehat{B}|\Psi\rangle - \langle \Psi, \triangle \widehat{B} \triangle \widehat{A}|\Psi\rangle\right) \\
=& \frac{1}{2i}\langle \Psi, [\triangle \widehat{A}, \triangle \widehat{B}]|\Psi\rangle = \frac{1}{2}\langle \Psi, \widehat{L}|\Psi\rangle.
\end{aligned}$$

El principio de incertidumbre de Heissenberg

Como $\widehat{L}$ es hermítico, $\langle \Psi, \widehat{L} | \Psi \rangle$ es un número real que denotaremos por l; así,

$$\triangle A \triangle B \geq \frac{|l|}{2}.$$

Lo anterior aplicado a los operadores $\widehat{p}$ y $\widehat{x}$

$$[\widehat{p}, \widehat{x}] = -i\hbar \widehat{I}$$

nos conduce al principio de incertidumbre de Heisenberg

$$\triangle x \triangle p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Lo anterior significa que no podemos medir al mismo tiempo con precisión infinita las coordenadas y la velocidad de una partícula.