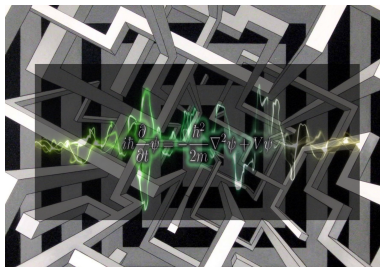


Mecánica Cuántica en espacios de Hilbert

Renato Álvarez-Nodarse



FISMAT2015, Sevilla, 29 de junio – 10 de julio de 2015

- ① Espacios de Hilbert y operadores
- ② Introducción a la Mecánica Cuántica en espacios de Hilbert

Definición

Se dice que un espacio vectorial \mathbb{E} es un espacio euclídeo si dados dos elementos cualesquiera $x, y \in \mathbb{E}$ existe un número denominado producto escalar y que denotaremos por $\langle x, y \rangle$ tal que

- 1 Para todo $x, y \in \mathbb{E}$, $\langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle}$.
- 2 Para todo $x, y, z \in \mathbb{E}$, $\langle x, y + z \rangle = \langle x, y \rangle + \langle x, z \rangle$.
- 3 Para todo $x, y \in \mathbb{E}$ y $\lambda \in \mathbb{C}$, $\langle x, \lambda y \rangle = \lambda \langle x, y \rangle$
- 4 Para todo $x \in \mathbb{E}$, $x \neq 0$, $\langle x, x \rangle > 0$ y si $\langle x, x \rangle = 0$, entonces $x = 0$.

La desigualdad de Cauchy-Schwarz

$$|\langle f, g \rangle|^2 \leq \langle f, f \rangle \langle g, g \rangle.$$

Definición

Un espacio vectorial \mathbb{X} se denomina espacio normado si para todo $x \in \mathbb{X}$ existe un número real denominado norma, que denotaremos por $\|x\|$, que cumple con las condiciones

- 1 Para todo $x \in \mathbb{X}$, $\|x\| \geq 0$ y si $\|x\| = 0$ entonces $x = 0$.
- 2 Para todo $x \in \mathbb{X}$ y $\lambda \in \mathbb{R}$, $\|\lambda x\| = |\lambda| \|x\|$.
- 3 Para todo $x, y \in \mathbb{X}$ se tiene la desigualdad triangular

$$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|.$$

Definición

Un espacio vectorial \mathbb{X} se denomina espacio normado si para todo $x \in \mathbb{X}$ existe un número real denominado norma, que denotaremos por $\|x\|$, que cumple con las condiciones

- 1 Para todo $x \in \mathbb{X}$, $\|x\| \geq 0$ y si $\|x\| = 0$ entonces $x = 0$.
- 2 Para todo $x \in \mathbb{X}$ y $\lambda \in \mathbb{R}$, $\|\lambda x\| = |\lambda| \|x\|$.
- 3 Para todo $x, y \in \mathbb{X}$ se tiene la desigualdad triangular

$$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|.$$

Teorema

Todo espacio euclídeo \mathbb{E} es normado si en él definimos la norma mediante la fórmula $\|f\| = \sqrt{\langle f, f \rangle}$. Además, $\|f\| \cdot \|g\| \geq |\langle f, g \rangle|$.

Definición

Un espacio euclídeo \mathbb{E} completo respecto a la norma inducida por un producto escalar se denomina espacio de Hilbert y lo denotaremos por \mathbb{H} .

Definición

Sea el sistema de vectores $\{\phi_n\}_{n=1}^{\infty}$ de \mathbb{H} linealmente independiente –es decir, que cualquier subsistema finito es linealmente independiente–. Diremos que $\{\phi_n\}_{n=1}^{\infty}$ es un sistema ortogonal dos a dos si

$$\langle \phi_n, \phi_m \rangle = \delta_{n,m} \|\phi_n\|^2, \quad \forall n, m \in \mathbb{N}.$$

Teorema

En un espacio de Hilbert \mathbb{H} de cualquier conjunto de vectores linealmente independiente se puede construir un conjunto de vectores ortogonales.

Sea el sistema de funciones l.i. $(\phi_n)_{n=1}^{\infty}$ de \mathbb{H} . Definamos el sistema de funciones $(\psi_n)_{n=1}^{\infty}$ de forma que

$$\psi_1 = \phi_1, \quad \psi_2 = \phi_2 + \alpha_{2,1}\psi_1, \quad \psi_n = \phi_n + \sum_{k=1}^{n-1} \alpha_{n,k}\psi_k,$$

donde las constantes $\alpha_{n,k}$, $n \in \mathbb{N}$, $k = 1, \dots, n-1$ son tales que ψ_k es ortogonal a todos los vectores ϕ_j , $j = 1, 2, \dots, k-1$, anteriores. El proceso anterior se denomina proceso de ortogonalización de Gram-Schmidt.

Aquí nos interesarán los espacios de Hilbert \mathbb{H} **separables**, es decir, aquellos que contienen un subconjunto numerable denso (Ejemplo \mathbb{R} es separable pues $\mathbb{Q} \subset \mathbb{R}$ es numerable y denso en \mathbb{R}).

Aquí nos interesarán los espacios de Hilbert \mathbb{H} **separables**, es decir, aquellos que contienen un subconjunto numerable denso (Ejemplo \mathbb{R} es separable pues $\mathbb{Q} \subset \mathbb{R}$ es numerable y denso en \mathbb{R}).

Teorema

Todo espacio de Hilbert \mathbb{H} separable tiene una base ortonormal.

Teorema

Si un espacio euclídeo \mathbb{E} es separable, entonces cualquier sistema ortogonal (ortonormal) de \mathbb{E} es numerable.

Luego, si \mathbb{H} es separable, \mathbb{H} tiene una base ortonormal numerable.

Definición

Un operador $\hat{\mathcal{L}}$ es una aplicación de \mathbb{H} en \mathbb{H}_1 , dos espacios de Hilbert, $\hat{\mathcal{L}} : \mathbb{H} \mapsto \mathbb{H}_1$.

En adelante asumiremos que $\mathbb{H}_1 \subset \mathbb{H}$ o bien $\mathbb{H}_1 = \mathbb{H}$.

Definición

Un operador $\hat{\mathcal{L}}$ es lineal si $\forall \alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}$, y $\Psi_1, \Psi_2 \in \mathbb{H}$,

$$\hat{\mathcal{L}}(\alpha_1\Psi_1 + \alpha_2\Psi_2) = \alpha_1\hat{\mathcal{L}}\Psi_1 + \alpha_2\hat{\mathcal{L}}\Psi_2.$$

Definición

El operador $\hat{O} : \mathbb{H} \mapsto \mathbb{H}$ se denomina operador nulo si

$$\forall \Psi \in \mathbb{H}, \quad \hat{O}\Psi = 0.$$

Definición

El operador $\hat{I} : \mathbb{H} \mapsto \mathbb{H}$ se denomina operador identidad si

$$\forall \Psi \in \mathbb{H}, \quad \hat{I}\Psi = \Psi.$$

Definición

El operador $\hat{\mathcal{L}}^{-1} : \mathbb{H} \mapsto \mathbb{H}$ se denomina operador inverso de $\hat{\mathcal{L}}$ si

$$\hat{\mathcal{L}}\hat{\mathcal{L}}^{-1} = \hat{\mathcal{L}}^{-1}\hat{\mathcal{L}} = \hat{I}.$$

Definición

Definiremos el producto $\hat{\mathcal{L}} = \hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}}$ de dos operadores $\hat{\mathcal{A}}$ y $\hat{\mathcal{B}}$ al operador $\hat{\mathcal{L}}$ que obtiene al actuar consecutivamente los operadores $\hat{\mathcal{A}}$ y luego $\hat{\mathcal{B}}$, i.e.,

$$\Phi = \hat{\mathcal{B}}\Psi, \quad \hat{\mathcal{L}}\Psi = \hat{\mathcal{A}}\Phi \quad \implies \quad \hat{\mathcal{L}}\Psi = \hat{\mathcal{A}}(\hat{\mathcal{B}}\Psi).$$

En general $\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} \neq \hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}}$, i.e., la multiplicación de operadores **no** es conmutativa.

Definición

Llamaremos conmutador de dos operadores $\hat{\mathcal{A}}$ y $\hat{\mathcal{B}}$ al operador

$$[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}] := \hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}} - \hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}}.$$

Así pues, dos operadores conmutan si y sólo si su conmutador es el operador nulo.

En adelante vamos a usar la notación de Dirac para los vectores, los operadores y los productos escalares.

Así, un vector de \mathbb{H} lo denotaremos por $|\Psi\rangle$ (ket vector) y su correspondiente conjugado $\langle\Psi|$ (brac vector).

Así, denotaremos el producto escalar $\langle\Psi, \Phi\rangle$ por $\langle\Psi|\Phi\rangle$ y además

$$\langle\Psi|\widehat{\mathcal{L}}|\Phi\rangle := \langle\Psi|\widehat{\mathcal{L}}\Phi\rangle.$$

A los productos anteriores les denominaremos *elementos matriciales* del operador $\widehat{\mathcal{L}}$.

Definición

El operador $\widehat{\mathcal{L}}^+$ se denomina conjugado o adjunto de $\widehat{\mathcal{L}}$ si,

$$\langle \Psi | \widehat{\mathcal{L}} | \Phi \rangle = \overline{\langle \Phi | \widehat{\mathcal{L}}^+ | \Psi \rangle}, \quad \forall \Phi, \Psi,$$

o, equivalentemente,

$$\langle \Psi | \widehat{\mathcal{L}} \Phi \rangle = \langle \widehat{\mathcal{L}}^+ \Psi | \Phi \rangle = \overline{\langle \Phi | \widehat{\mathcal{L}}^+ \Psi \rangle}$$

Definición

El operador $\widehat{\mathcal{L}}^+$ se denomina conjugado o adjunto de $\widehat{\mathcal{L}}$ si,

$$\langle \Psi | \widehat{\mathcal{L}} | \Phi \rangle = \overline{\langle \Phi | \widehat{\mathcal{L}}^+ | \Psi \rangle}, \quad \forall \Phi, \Psi,$$

o, equivalentemente,

$$\langle \Psi | \widehat{\mathcal{L}} \Phi \rangle = \langle \widehat{\mathcal{L}}^+ \Psi | \Phi \rangle = \overline{\langle \Phi | \widehat{\mathcal{L}}^+ \Psi \rangle}$$

De la definición anterior se deduce fácilmente que

① $(\widehat{\mathcal{L}}^+)^+ = \widehat{\mathcal{L}},$

Definición

El operador $\widehat{\mathcal{L}}^+$ se denomina conjugado o adjunto de $\widehat{\mathcal{L}}$ si,

$$\langle \Psi | \widehat{\mathcal{L}} | \Phi \rangle = \overline{\langle \Phi | \widehat{\mathcal{L}}^+ | \Psi \rangle}, \quad \forall \Phi, \Psi,$$

o, equivalentemente,

$$\langle \Psi | \widehat{\mathcal{L}} \Phi \rangle = \langle \widehat{\mathcal{L}}^+ \Psi | \Phi \rangle = \overline{\langle \Phi | \widehat{\mathcal{L}}^+ \Psi \rangle}$$

De la definición anterior se deduce fácilmente que

- 1 $(\widehat{\mathcal{L}}^+)^+ = \widehat{\mathcal{L}}$,
- 2 $(\alpha \widehat{\mathcal{L}})^+ = \bar{\alpha} \widehat{\mathcal{L}}^+, \forall \alpha \in \mathbb{C}$,

Definición

El operador $\widehat{\mathcal{L}}^+$ se denomina conjugado o adjunto de $\widehat{\mathcal{L}}$ si,

$$\langle \Psi | \widehat{\mathcal{L}} | \Phi \rangle = \overline{\langle \Phi | \widehat{\mathcal{L}}^+ | \Psi \rangle}, \quad \forall \Phi, \Psi,$$

o, equivalentemente,

$$\langle \Psi | \widehat{\mathcal{L}} \Phi \rangle = \langle \widehat{\mathcal{L}}^+ \Psi | \Phi \rangle = \overline{\langle \Phi | \widehat{\mathcal{L}}^+ \Psi \rangle}$$

De la definición anterior se deduce fácilmente que

- 1 $(\widehat{\mathcal{L}}^+)^+ = \widehat{\mathcal{L}}$,
- 2 $(\alpha \widehat{\mathcal{L}})^+ = \bar{\alpha} \widehat{\mathcal{L}}^+, \forall \alpha \in \mathbb{C}$,
- 3 $(\widehat{\mathcal{L}} \widehat{\mathcal{N}})^+ = \widehat{\mathcal{N}}^+ \widehat{\mathcal{L}}^+$ y

Definición

El operador $\widehat{\mathcal{L}}^+$ se denomina conjugado o adjunto de $\widehat{\mathcal{L}}$ si,

$$\langle \Psi | \widehat{\mathcal{L}} | \Phi \rangle = \overline{\langle \Phi | \widehat{\mathcal{L}}^+ | \Psi \rangle}, \quad \forall \Phi, \Psi,$$

o, equivalentemente,

$$\langle \Psi | \widehat{\mathcal{L}} \Phi \rangle = \langle \widehat{\mathcal{L}}^+ \Psi | \Phi \rangle = \overline{\langle \Phi | \widehat{\mathcal{L}}^+ \Psi \rangle}$$

De la definición anterior se deduce fácilmente que

- 1 $(\widehat{\mathcal{L}}^+)^+ = \widehat{\mathcal{L}}$,
- 2 $(\alpha \widehat{\mathcal{L}})^+ = \bar{\alpha} \widehat{\mathcal{L}}^+, \forall \alpha \in \mathbb{C}$,
- 3 $(\widehat{\mathcal{L}} \widehat{\mathcal{N}})^+ = \widehat{\mathcal{N}}^+ \widehat{\mathcal{L}}^+$ y
- 4 $\langle \Psi | \widehat{\mathcal{L}} \widehat{\mathcal{N}} | \Phi \rangle = \langle \widehat{\mathcal{L}}^+ \Psi | \widehat{\mathcal{N}} | \Phi \rangle, \forall \Psi, \Phi \in \mathbb{H}$.

Un ejemplo especialmente importante es el caso cuando \mathbb{H} es de dimensión finita. En este caso si $(\phi_n)_{n=1}^N$ es una base (en particular, una base ortogonal) de \mathbb{H} , entonces

$$\widehat{\mathcal{L}}\phi_n = \sum_{k=1}^N L_{n,k}\phi_k,$$

y por tanto a $\widehat{\mathcal{L}}$ se le puede hacer corresponder una matriz $(L_{i,j})_{i,j=1}^N$. Si denotamos por $L_{i,j}^+$ la matriz asociada al operador $\widehat{\mathcal{L}}^+$, entonces $L_{i,j}^+ = \overline{L_{j,i}}$.

Definición

Si $\hat{\mathcal{L}} = \hat{\mathcal{L}}^+$, se dice que el operador es hermítico o autoadjunto.

Por ejemplo, si \mathbb{H} es de dimensión finita, $\hat{\mathcal{L}}$ es hermítico si su correspondiente matriz satisface $L_{i,j} = \overline{L_{j,i}}$.

Definición

Si $\hat{\mathcal{L}} = \hat{\mathcal{L}}^+$, se dice que el operador es hermítico o autoadjunto.

Por ejemplo, si \mathbb{H} es de dimensión finita, $\hat{\mathcal{L}}$ es hermítico si su correspondiente matriz satisface $L_{i,j} = \overline{L_{j,i}}$.

Si $\mathbb{H} = L^2(\mathbb{R})$, los operadores definidos por

$$\hat{x}\Psi(x) = x\Psi(x), \quad \hat{p}\Psi(x) = -i\hbar\frac{d\Psi(x)}{dx}, \quad \hat{\mathcal{P}}\Psi(x) = \Psi(-x),$$

son hermíticos.

Proposición

El producto $\hat{\mathcal{L}} = \hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}}$ de dos operadores $\hat{\mathcal{A}}$ y $\hat{\mathcal{B}}$ hermíticos es hermítico si y sólo si $\hat{\mathcal{A}}$ y $\hat{\mathcal{B}}$ conmutan, i.e., $[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}] = 0$.

Proposición

El producto $\hat{\mathcal{L}} = \hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}}$ de dos operadores $\hat{\mathcal{A}}$ y $\hat{\mathcal{B}}$ hermíticos es hermítico si y sólo si $\hat{\mathcal{A}}$ y $\hat{\mathcal{B}}$ conmutan, i.e., $[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}] = 0$.

Proposición

El conmutador $[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}]$ de dos operadores hermíticos $\hat{\mathcal{A}}$ y $\hat{\mathcal{B}}$ es tal que

$$[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}] = i\hat{\mathcal{L}},$$

con $\hat{\mathcal{L}}$ hermítico.

Proposición

El producto $\hat{\mathcal{L}} = \hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}}$ de dos operadores $\hat{\mathcal{A}}$ y $\hat{\mathcal{B}}$ hermíticos es hermítico si y sólo si $\hat{\mathcal{A}}$ y $\hat{\mathcal{B}}$ conmutan, i.e., $[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}] = 0$.

Proposición

El conmutador $[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}]$ de dos operadores hermíticos $\hat{\mathcal{A}}$ y $\hat{\mathcal{B}}$ es tal que

$$[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}] = i\hat{\mathcal{L}},$$

con $\hat{\mathcal{L}}$ hermítico.

Demostración: Supongamos que $[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}] = \hat{\mathcal{N}}$. Entonces

$$\hat{\mathcal{N}}^+ = ([\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}])^+ = -[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}] = -\hat{\mathcal{N}} \implies \hat{\mathcal{N}} = i\hat{\mathcal{L}},$$

con $\hat{\mathcal{L}}$ hermítico ($(i\hat{\mathcal{L}})^+ = -i\hat{\mathcal{L}}^+ = -i\hat{\mathcal{L}}$).



Definición

Sea $|\Psi\rangle \in \mathbb{H}$ con $\| |\Psi\rangle \| \neq 0$. Si existe $\lambda \in \mathbb{C}$ tal que

$$\hat{\mathcal{L}}|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle,$$

entonces se dice que $|\Psi\rangle$ es un autovector de $\hat{\mathcal{L}}$ y λ es su correspondiente autovalor.

Nota: En ocasiones es cómodo denotar a un autovector asociado a λ por $|\Psi_\lambda\rangle$ (suponiendo que λ es un autovalor simple). Si además el conjunto de autovalores es numerable entonces se suele simplificar aún más la notación: $|n\rangle := |\Psi_{\lambda_n}\rangle$.

Proposición

Si $\hat{\mathcal{L}}$ es hermítico, entonces sus autovalores son reales.

Proposición

Si $\hat{\mathcal{L}}$ es hermítico, entonces sus autovalores son reales.

Demostración:

$$\hat{\mathcal{L}}|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle \implies \langle\Psi|\hat{\mathcal{L}}|\Psi\rangle = \lambda\langle\Psi|\Psi\rangle = \lambda.$$

Por otro lado de la definición de operador hermítico

$$\langle\Psi|\hat{\mathcal{L}}^+|\Psi\rangle = \overline{\langle\Psi|\hat{\mathcal{L}}|\Psi\rangle} = \bar{\lambda}\langle\Psi|\Psi\rangle = \bar{\lambda},$$

luego, como $\hat{\mathcal{L}}$ es hermítico $\hat{\mathcal{L}} = \hat{\mathcal{L}}^+$ por tanto $\lambda = \bar{\lambda}$. □

Proposición

Si $\hat{\mathcal{L}}$ es hermítico, entonces los autovectores correspondientes a autovalores distintos son ortogonales.

Proposición

Si $\hat{\mathcal{L}}$ es hermítico, entonces los autovectores correspondientes a autovalores distintos son ortogonales.

Demostración: Sea $\hat{\mathcal{L}}|\psi_1\rangle = \lambda_1|\psi_1\rangle$, $\hat{\mathcal{L}}|\psi_2\rangle = \lambda_2|\psi_2\rangle$, entonces

$$\begin{aligned}\langle\psi_2|\hat{\mathcal{L}}|\psi_1\rangle &= \lambda_1\langle\psi_2|\psi_1\rangle = \\ \langle\psi_2|\hat{\mathcal{L}}^\dagger|\psi_1\rangle &= \overline{\langle\psi_1|\hat{\mathcal{L}}|\psi_2\rangle} = \lambda_2\overline{\langle\psi_1|\psi_2\rangle} = \lambda_2\langle\psi_2|\psi_1\rangle,\end{aligned}$$

i.e. $(\lambda_1 - \lambda_2)\langle\psi_2|\psi_1\rangle = 0$, luego como $\lambda_1 \neq \lambda_2$, $\langle\psi_2|\psi_1\rangle = 0$. □

Definición

Un operador \hat{U} se denomina unitario si

$$\hat{U}\hat{U}^+ = \hat{U}^+\hat{U} = \hat{I}.$$

Definición

Un operador \hat{U} se denomina unitario si

$$\hat{U}\hat{U}^+ = \hat{U}^+\hat{U} = \hat{I}.$$

Proposición

Si \hat{U} es unitario, entonces todos sus autovalores son tales que $|\lambda| = 1$.

Demostración: Sea $\hat{U}|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle$, entonces

$$1 = \langle\Psi|\hat{U}^+\hat{U}|\Psi\rangle = \lambda\langle\Psi|\hat{U}^+|\Psi\rangle = \lambda\overline{\langle\Psi|\hat{U}|\Psi\rangle} = \lambda\bar{\lambda}\langle\Psi|\Psi\rangle = |\lambda|^2$$

□

Definición

Sea \hat{U} un operador unitario. La transformación

$$|\Psi\rangle \mapsto |\psi\rangle = \hat{U}^+ |\Psi\rangle, \quad \hat{\mathcal{L}} \mapsto \hat{\ell} = \hat{U}^+ \hat{\mathcal{L}} \hat{U},$$

la denominaremos transformación unitaria de $|\Psi\rangle$ y $\hat{\mathcal{L}}$ y la denotaremos por $\{U\}$.

Definición

Sea \hat{U} un operador unitario. La transformación

$$|\Psi\rangle \mapsto |\psi\rangle = \hat{U}^+ |\Psi\rangle, \quad \hat{\mathcal{L}} \mapsto \hat{\ell} = \hat{U}^+ \hat{\mathcal{L}} \hat{U},$$

la denominaremos transformación unitaria de $|\Psi\rangle$ y $\hat{\mathcal{L}}$ y la denotaremos por $\{U\}$.

Proposición

Las transformaciones unitarias conservan

- 1 Las relaciones de conmutación de los operadores.
- 2 La propiedad de hermiticidad de un operador.
- 3 Los autovalores de un operador.
- 4 Los productos escalares y elementos matriciales de $\hat{\mathcal{L}}$.

Demostración: 1. Sean \hat{A} , \hat{B} y \hat{C} tres operadores tales que $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}$ y sea $\{U\}$ una transformación unitaria. Denotemos por \hat{a} , \hat{b} y $\hat{\ell}$ los operadores correspondientes a \hat{A} , \hat{B} y \hat{C} después de la transformación. Entonces como $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C} \implies$

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = \hat{C} \implies \hat{U}^+ \hat{A} \hat{B} \hat{U} - \hat{U}^+ \hat{B} \hat{A} \hat{U} = \hat{U}^+ \hat{C} \hat{U} = \hat{\ell},$$

pero

$$(\hat{U}^+ \hat{A} \hat{U})(\hat{U}^+ \hat{B} \hat{U}) - (\hat{U}^+ \hat{B} \hat{U})(\hat{U}^+ \hat{A} \hat{U}) = \hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a} \implies [\hat{a}, \hat{b}] = \hat{\ell}.$$

Demostración: 1. Sean \hat{A} , \hat{B} y \hat{C} tres operadores tales que $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}$ y sea $\{U\}$ una transformación unitaria. Denotemos por \hat{a} , \hat{b} y $\hat{\ell}$ los operadores correspondientes a \hat{A} , \hat{B} y \hat{C} después de la transformación. Entonces como $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C} \implies$

$$\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = \hat{C} \implies \hat{U}^+ \hat{A} \hat{B} \hat{U} - \hat{U}^+ \hat{B} \hat{A} \hat{U} = \hat{U}^+ \hat{C} \hat{U} = \hat{\ell},$$

pero

$$(\hat{U}^+ \hat{A} \hat{U})(\hat{U}^+ \hat{B} \hat{U}) - (\hat{U}^+ \hat{B} \hat{U})(\hat{U}^+ \hat{A} \hat{U}) = \hat{a}\hat{b} - \hat{b}\hat{a} \implies [\hat{a}, \hat{b}] = \hat{\ell}.$$

2. Sea $\hat{C} = \hat{C}^+$. Sea $\hat{\ell} = \hat{U}^+ \hat{C} \hat{U}$, entonces

$$\hat{\ell}^+ = (\hat{U}^+ \hat{C} \hat{U})^+ = \hat{U}^+ \hat{C}^+ \hat{U} = \hat{U}^+ \hat{C} \hat{U} = \hat{\ell}.$$

3. Sea $\widehat{\mathcal{L}}|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle$, entonces

$$(\widehat{u}^+ \widehat{\mathcal{L}} \widehat{u})(\widehat{u}^+)|\Psi\rangle = \lambda(\widehat{u}^+|\Psi\rangle) \implies \widehat{\ell}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle.$$

3. Sea $\widehat{\mathcal{L}}|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle$, entonces

$$(\widehat{u}^+ \widehat{\mathcal{L}} \widehat{u})(\widehat{u}^+)|\Psi\rangle = \lambda(\widehat{u}^+|\Psi\rangle) \implies \widehat{\ell}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle.$$

4.

$$\begin{aligned} \langle \Psi_1 | \widehat{\mathcal{L}} | \Psi_2 \rangle &= \langle \Psi_1 | \widehat{u} \widehat{u}^+ \widehat{\mathcal{L}} \widehat{u} \widehat{u}^+ | \Psi_2 \rangle = \langle \widehat{u}^+ \Psi_1 | \widehat{u}^+ \widehat{\mathcal{L}} \widehat{u} | \widehat{u}^+ \Psi_2 \rangle \\ &= \langle \psi_1 | \widehat{\ell} | \psi_2 \rangle. \end{aligned}$$

□

Sea $\epsilon > 0$ tan pequeño como se quiera, y supongamos que \hat{U}_ϵ admite el desarrollo

$$\hat{U}_\epsilon = \hat{\mathcal{I}} + i\epsilon\hat{\mathcal{A}} + O(\epsilon^2).$$

Entonces su conjugado es, a primer orden,

$$\hat{U}_\epsilon^+ = \hat{\mathcal{I}} - i\epsilon\hat{\mathcal{A}}^+ + O(\epsilon^2).$$

De aquí, con un pequeño cálculo

$$\hat{\mathcal{I}} = \hat{U}_\epsilon^+ \hat{U}_\epsilon = \hat{\mathcal{I}} + i\epsilon(\hat{\mathcal{A}} - \hat{\mathcal{A}}^+) + O(\epsilon^2) \implies \hat{\mathcal{A}} = \hat{\mathcal{A}}^+$$

Sea $\epsilon > 0$ tan pequeño como se quiera, y supongamos que \hat{U}_ϵ admite el desarrollo

$$\hat{U}_\epsilon = \hat{\mathcal{I}} + i\epsilon\hat{\mathcal{A}} + O(\epsilon^2).$$

Entonces su conjugado es, a primer orden,

$$\hat{U}_\epsilon^+ = \hat{\mathcal{I}} - i\epsilon\hat{\mathcal{A}}^+ + O(\epsilon^2).$$

De aquí, con un pequeño cálculo

$$\hat{\mathcal{I}} = \hat{U}_\epsilon^+ \hat{U}_\epsilon = \hat{\mathcal{I}} + i\epsilon(\hat{\mathcal{A}} - \hat{\mathcal{A}}^+) + O(\epsilon^2) \implies \hat{\mathcal{A}} = \hat{\mathcal{A}}^+$$

Además si elegimos $\epsilon = \alpha/N$, con $N \in \mathbb{N}$ entonces que

$$\hat{U}_\epsilon^N = \left(\hat{\mathcal{I}} + \frac{i\alpha\hat{\mathcal{A}}}{N} \right)^N \longrightarrow \boxed{\hat{U}(\alpha) = e^{i\alpha\hat{\mathcal{A}}}}$$

Supongamos que $\hat{\mathcal{L}}$ es un operador que tiene asociados un conjunto numerable de autovectores y que además dicho conjunto es un sistema completo y sea $(|\Psi_n\rangle)_n$ su dicho conjunto.

Supongamos que $\hat{\mathcal{L}}$ es un operador que tiene asociados un conjunto numerable de autovectores y que además dicho conjunto es un sistema completo y sea $(|\Psi_n\rangle)_n$ su dicho conjunto.

Si todos los autovalores son simples entonces, como ya hemos visto, los correspondientes autovectores son ortogonales. En el caso de que tengamos autovalores múltiples sus correspondientes autovectores se pueden ortogonalizar usando el método de Gram-Schmidt que describimos antes. Así pues asumiremos que $(|\Psi_n\rangle)_n$ es un sistema ortonormal (ortogonal con $\| |\Psi_n\rangle \| = 1$).

Supongamos que $\hat{\mathcal{L}}$ es un operador que tiene asociados un conjunto numerable de autovectores y que además dicho conjunto es un sistema completo y sea $(|\Psi_n\rangle)_n$ su dicho conjunto.

Si todos los autovalores son simples entonces, como ya hemos visto, los correspondientes autovectores son ortogonales. En el caso de que tengamos autovalores múltiples sus correspondientes autovectores se pueden ortogonalizar usando el método de Gram-Schmidt que describimos antes. Así pues asumiremos que $(|\Psi_n\rangle)_n$ es un sistema ortonormal (ortogonal con $\| |\Psi_n\rangle \| = 1$).

Sea $|\Phi\rangle$ un vector cualquiera de \mathbb{H} , entonces $|\Phi\rangle$ se puede desarrollar en serie de Fourier respecto $(|\Psi_n\rangle)_n$

$$|\Phi\rangle = \sum_n f_n |\Psi_n\rangle, \quad f_n = \langle \Psi_n | \Phi \rangle.$$

En otras palabras, $(|\Psi_n\rangle)_n$ es una *base ortonormal completa* de \mathbb{H} .

Las bases juegan un papel fundamental. En particular el de aquellas bases asociadas a operadores hermíticos.

Las bases juegan un papel fundamental. En particular el de aquellas bases asociadas a operadores hermíticos.

Sea $(|\Psi_n\rangle)_n$ una base ortonormal completa de \mathbb{H} y sea $\hat{\mathcal{A}}$ un operador lineal, entonces

$$\hat{\mathcal{A}}|\Psi_n\rangle \in \mathbb{H} \implies \hat{\mathcal{A}}|\Psi_n\rangle = \sum_m A_{m,n}|\Psi_m\rangle \implies A_{m,n} = \langle\Psi_m|\hat{\mathcal{A}}|\Psi_n\rangle.$$

A la cantidad $\langle\Psi_m|\hat{\mathcal{A}}|\Psi_n\rangle$ la denominaremos elemento matricial del operador $\hat{\mathcal{A}}$ en la base $(|\Psi_n\rangle)_n$.

Si $(|\Psi_n\rangle)_n$ es la base asociada al operador hermítico $\hat{\mathcal{L}}$ se dice que la matriz $A = (A_{m,n})$ es la matriz de $\hat{\mathcal{A}}$ en la $\hat{\mathcal{L}}$ -representación. Nótese que la matriz del operador $\hat{\mathcal{L}}$ en su propia representación (la $\hat{\mathcal{L}}$ -representación) es diagonal con los autovalores en la diagonal.

Si $(|\Psi_n\rangle)_n$ es la base asociada al operador hermítico $\hat{\mathcal{L}}$ se dice que la matriz $A = (A_{m,n})$ es la matriz de $\hat{\mathcal{A}}$ en la $\hat{\mathcal{L}}$ -representación. Nótese que la matriz del operador $\hat{\mathcal{L}}$ en su propia representación (la $\hat{\mathcal{L}}$ -representación) es diagonal con los autovalores en la diagonal.

Más aún, así como el conjunto de números $(f_n)_n$ define biunívocamente a $|\Phi\rangle$, la matriz A define biunívocamente a $\hat{\mathcal{A}}$ (en la base correspondiente se sobrentiende). Luego, el operador $\hat{\mathcal{A}}$ será hermítico si su matriz A es autoconjugada, i.e., $A_{m,n} = \overline{A_{n,m}}$, $\hat{\mathcal{A}}$ será unitario si su matriz A es unitaria, i.e., $\sum_k A_{m,k} \overline{A_{n,k}} = \delta_{m,n}$, etc.

Si $(|\Psi_n\rangle)_n$ es la base asociada al operador hermítico $\hat{\mathcal{L}}$ se dice que la matriz $A = (A_{m,n})$ es la matriz de $\hat{\mathcal{A}}$ en la $\hat{\mathcal{L}}$ -representación. Nótese que la matriz del operador $\hat{\mathcal{L}}$ en su propia representación (la $\hat{\mathcal{L}}$ -representación) es diagonal con los autovalores en la diagonal.

Más aún, así como el conjunto de números $(f_n)_n$ define biunívocamente a $|\Phi\rangle$, la matriz A define biunívocamente a $\hat{\mathcal{A}}$ (en la base correspondiente se sobrentiende). Luego, el operador $\hat{\mathcal{A}}$ será hermítico si su matriz A es autoconjugada, i.e., $A_{m,n} = \overline{A_{n,m}}$, $\hat{\mathcal{A}}$ será unitario si su matriz A es unitaria, i.e., $\sum_k A_{m,k} \overline{A_{n,k}} = \delta_{m,n}$, etc.

Nótese que si $\dim \mathbb{H} = N$, las correspondientes matrices son matrices cuadradas $N \times N$, pero si $\dim \mathbb{H} = \infty$, entonces las correspondientes matrices son infinitas.

Proposición

Si dos operadores $\hat{\mathcal{L}}$ y $\hat{\mathcal{N}}$ tienen un sistema completo de autovectores $(|\Psi_n\rangle)_n$ común, entonces $[\hat{\mathcal{L}}, \hat{\mathcal{N}}] = 0$.

Proposición

Si dos operadores $\hat{\mathcal{L}}$ y $\hat{\mathcal{N}}$ tienen un sistema completo de autovectores $(|\Psi_n\rangle)_n$ común, entonces $[\hat{\mathcal{L}}, \hat{\mathcal{N}}] = 0$.

El recíproco también es cierto:

Proposición

Si dos operadores $\hat{\mathcal{L}}$ y $\hat{\mathcal{N}}$ con sistemas completos de autovectores conmutan ($[\hat{\mathcal{L}}, \hat{\mathcal{N}}] = 0$), entonces tienen un sistema completo de autovectores $(|\Psi_n\rangle)_n$ común.

Definición

Sea $F(z)$ una función analítica en un entorno de $z = 0$ y sea $F(z) = \sum_{n \geq 0} f_n z^n$ su desarrollo en serie de potencias. Definiremos al operador $F(\hat{\mathcal{L}})$ mediante la serie

$$F(\hat{\mathcal{L}}) = \sum_{n \geq 0} f_n \hat{\mathcal{L}}^n.$$

Definición

Sea $F(z)$ una función analítica en un entorno de $z = 0$ y sea $F(z) = \sum_{n \geq 0} f_n z^n$ su desarrollo en serie de potencias. Definiremos al operador $F(\hat{\mathcal{L}})$ mediante la serie

$$F(\hat{\mathcal{L}}) = \sum_{n \geq 0} f_n \hat{\mathcal{L}}^n.$$

Definición

La derivada operacional $\partial F(\hat{\mathcal{L}})/\partial \hat{\mathcal{L}}$ es el operador que se obtiene mediante la fórmula

$$\frac{\partial F(\hat{\mathcal{L}})}{\partial \hat{\mathcal{L}}} = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{F(\hat{\mathcal{L}} + \varepsilon \hat{\mathcal{I}}) - F(\hat{\mathcal{L}})}{\varepsilon}.$$

Por ejemplo

$$\frac{\partial \hat{\mathcal{L}}^n}{\partial \hat{\mathcal{L}}} = n\hat{\mathcal{L}}^{n-1}.$$

Por ejemplo

$$\frac{\partial \widehat{\mathcal{L}}^n}{\partial \widehat{\mathcal{L}}} = n \widehat{\mathcal{L}}^{n-1}.$$

Sean $\widehat{\mathcal{A}}$ y $\widehat{\mathcal{A}}^+$ tales que $[\widehat{\mathcal{A}}, \widehat{\mathcal{A}}^+] = \widehat{\mathcal{I}}$. Entonces tenemos

$$[\widehat{\mathcal{A}}, (\widehat{\mathcal{A}}^+)^k] = k(\widehat{\mathcal{A}}^+)^{k-1}, \quad k \geq 1.$$

Por ejemplo

$$\frac{\partial \widehat{\mathcal{L}}^n}{\partial \widehat{\mathcal{L}}} = n \widehat{\mathcal{L}}^{n-1}.$$

Sean $\widehat{\mathcal{A}}$ y $\widehat{\mathcal{A}}^+$ tales que $[\widehat{\mathcal{A}}, \widehat{\mathcal{A}}^+] = \widehat{\mathcal{I}}$. Entonces tenemos

$$[\widehat{\mathcal{A}}, (\widehat{\mathcal{A}}^+)^k] = k(\widehat{\mathcal{A}}^+)^{k-1}, \quad k \geq 1.$$

Proposición

Si $F(z)$ es una función analítica en un entorno de $z = 0$ y sean $\widehat{\mathcal{A}}$ y $\widehat{\mathcal{A}}^+$ tales que $[\widehat{\mathcal{A}}, \widehat{\mathcal{A}}^+] = \widehat{\mathcal{I}}$. Entonces

$$[\widehat{\mathcal{A}}, F(\widehat{\mathcal{A}}^+)] = \frac{dF(\widehat{\mathcal{A}}^+)}{d\widehat{\mathcal{A}}^+}.$$

Por ejemplo

$$\frac{\partial \widehat{\mathcal{L}}^n}{\partial \widehat{\mathcal{L}}} = n \widehat{\mathcal{L}}^{n-1}.$$

Sean $\widehat{\mathcal{A}}$ y $\widehat{\mathcal{A}}^+$ tales que $[\widehat{\mathcal{A}}, \widehat{\mathcal{A}}^+] = \widehat{\mathcal{I}}$. Entonces tenemos

$$[\widehat{\mathcal{A}}, (\widehat{\mathcal{A}}^+)^k] = k(\widehat{\mathcal{A}}^+)^{k-1}, \quad k \geq 1.$$

Proposición

Si $F(z)$ es una función analítica en un entorno de $z = 0$ y sean $\widehat{\mathcal{A}}$ y $\widehat{\mathcal{A}}^+$ tales que $[\widehat{\mathcal{A}}, \widehat{\mathcal{A}}^+] = \widehat{\mathcal{I}}$. Entonces

$$[\widehat{\mathcal{A}}, F(\widehat{\mathcal{A}}^+)] = \frac{dF(\widehat{\mathcal{A}}^+)}{d\widehat{\mathcal{A}}^+}.$$

Demostración: Basta escribir la serie de potencias de F y la eq. anterior.

Postulados de la Mecánica cuántica

Postulado

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

Postulado

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

- 1 $\forall t$ el estado está determinado por un vector de \mathbb{H} tal que $\|\Psi\| = 1$.

Postulado

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

- 1 $\forall t$ el estado está determinado por un vector de \mathbb{H} tal que $\|\Psi\| = 1$.
- 2 Dados los estados $|\Psi_1\rangle, \dots, |\Psi_k\rangle$, la combinación lineal $|\Phi\rangle = \sum_{k=1}^n \alpha_k |\Psi_k\rangle$ también es un (posible) estado.

Postulado

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

- 1 $\forall t$ el estado está determinado por un vector de \mathbb{H} tal que $\|\Psi\| = 1$.
- 2 Dados los estados $|\Psi_1\rangle, \dots, |\Psi_k\rangle$, la combinación lineal $|\Phi\rangle = \sum_{k=1}^n \alpha_k |\Psi_k\rangle$ también es un (posible) estado.
- 3 $\forall t \in \mathbb{R}$ el vector $|\Psi\rangle$ siempre se puede normalizar a la unidad (a no ser $|\Psi\rangle = 0$).

Postulado

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

Postulado

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

Postulado

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

Este postulado requiere una aclaración.

Postulado

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

Este postulado requiere una aclaración. Al hacer una medición de $\hat{\mathcal{L}}$ el sistema cambia (las mediciones interfieren en el sistema).

Postulado

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

Este postulado requiere una aclaración. Al hacer una medición de $\hat{\mathcal{L}}$ el sistema cambia (las mediciones interfieren en el sistema).

Antes de medir L el sistema puede estar, formalmente, en *cualquier* estado Ψ , pero al realizar la medición, ésta cambia al sistema y lo deja en el estado determinado por el vector $|\Psi_\lambda\rangle$ que es un autovector de $\hat{\mathcal{L}}$ correspondiente a al autovalor λ .

Postulado

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

Este postulado requiere una aclaración. Al hacer una medición de $\hat{\mathcal{L}}$ el sistema cambia (las mediciones interfieren en el sistema).

Antes de medir L el sistema puede estar, formalmente, en *cualquier* estado Ψ , pero al realizar la medición, ésta cambia al sistema y lo deja en el estado determinado por el vector $|\Psi_\lambda\rangle$ que es un autovector de $\hat{\mathcal{L}}$ correspondiente a al autovalor λ .

O sea, la medición produce el colapso de la función de onda a una de las $|\Psi_\lambda\rangle$.

Postulado

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

Este postulado requiere una aclaración. Al hacer una medición de $\hat{\mathcal{L}}$ el sistema cambia (las mediciones interfieren en el sistema).

Antes de medir L el sistema puede estar, formalmente, en *cualquier* estado Ψ , pero al realizar la medición, ésta cambia al sistema y lo deja en el estado determinado por el vector $|\Psi_\lambda\rangle$ que es un autovector de $\hat{\mathcal{L}}$ correspondiente a al autovalor λ .

O sea, la medición produce el colapso de la función de onda a una de las $|\Psi_\lambda\rangle$. Este axioma introduce formalmente la interpretación de Copenhagen en la teoría.

Postulado

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

$$\langle L \rangle = \langle \Psi | \hat{\mathcal{L}} | \Psi \rangle.$$

Postulado

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

$$\langle L \rangle = \langle \Psi | \hat{\mathcal{L}} | \Psi \rangle.$$

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

$$\langle \Psi | \hat{\mathcal{L}} | \Psi \rangle = \overline{\langle \Psi | \hat{\mathcal{L}}^+ | \Psi \rangle} = \overline{\langle \Psi | \hat{\mathcal{L}} | \Psi \rangle} \implies \langle L \rangle \in \mathbb{R}.$$

Postulado

Los elementos matriciales de los operadores \hat{x}_i de la posición (coordenadas) x_i y \hat{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 $\langle \Phi | \hat{x}_i | \Psi \rangle$ y $\langle \Phi | \hat{p}_i | \Psi \rangle$, cualquiera sean $|\Phi\rangle$ y $|\Psi\rangle$ de \mathbb{H} satisfacen las ecuaciones de evolución

$$\frac{d}{dt} \langle \Phi | \hat{x}_i | \Psi \rangle = \left\langle \Phi \left| \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{p}_i} \right| \Psi \right\rangle, \quad \frac{d}{dt} \langle \Phi | \hat{p}_i | \Psi \rangle = - \left\langle \Phi \left| \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{x}_i} \right| \Psi \right\rangle,$$

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

Este postulado es equivalente a la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}} |\Psi\rangle.$$

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 ($\hbar \rightarrow 0$) la mecánica cuántica se transforma en la clásica (principio de correspondencia de Bohr).

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 ($\hbar \rightarrow 0$) 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 \hat{H} se obtiene cambiando las x_i por los correspondientes operadores \hat{x}_i y p_i por \hat{p}_i . Esto, aunque en apariencia es *trivial*, en general no lo es pues \hat{H} debe ser hermítico (ya que corresponde a la magnitud física energía).

Postulado

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

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

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

Postulado

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

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

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

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

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 \hat{x}_i y p_i por \hat{p}_i .

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 \hat{x}_i y p_i por \hat{p}_i .

Por ejemplo, la energía cinética viene dada por

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

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

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 \hat{x}_i y p_i por \hat{p}_i .

Por ejemplo, la energía cinética viene dada por

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

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

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

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 \hat{x}_i y p_i por \hat{p}_i .

Por ejemplo, la energía cinética viene dada por

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

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

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

$$\hat{W}_i = \frac{1}{2}(\hat{x}_i \hat{p}_i + \hat{p}_i \hat{x}_i).$$

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

$$\langle \Psi_n | \hat{\mathcal{L}} | \Psi_n \rangle = \lambda_n, \quad \langle \Psi_n | \hat{\mathcal{L}}^k | \Psi_n \rangle = \lambda_n^k,$$

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

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

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

Consideremos por sencillez el caso cuando el autovalor λ_k es simple. En ese caso la probabilidad de que el sistema estando en un estado original $|\Phi\rangle$ termine en el estado definido por $|\Psi_k\rangle$ es

$$\text{Prob}(|\Phi\rangle \mapsto |\Psi_k\rangle) = |f_k|^2 = |\langle\Psi_k|\Phi\rangle|^2.$$

Consideremos por sencillez el caso cuando el autovalor λ_k es simple. En ese caso la probabilidad de que el sistema estando en un estado original $|\Phi\rangle$ termine en el estado definido por $|\Psi_k\rangle$ es

$$\text{Prob}(|\Phi\rangle \mapsto |\Psi_k\rangle) = |f_k|^2 = |\langle\Psi_k|\Phi\rangle|^2.$$

Nótese que esta probabilidad es **invariante ante transformaciones unitarias**:

$$|\Psi_k\rangle \mapsto \hat{U}|\Psi_k\rangle = |\tilde{\Psi}_k\rangle, \quad |\Phi\rangle \mapsto \hat{U}|\Phi\rangle = |\tilde{\Phi}\rangle$$

pues

Consideremos por sencillez el caso cuando el autovalor λ_k es simple. En ese caso la probabilidad de que el sistema estando en un estado original $|\Phi\rangle$ termine en el estado definido por $|\Psi_k\rangle$ es

$$\text{Prob}(|\Phi\rangle \mapsto |\Psi_k\rangle) = |f_k|^2 = |\langle\Psi_k|\Phi\rangle|^2.$$

Nótese que esta probabilidad es **invariante ante transformaciones unitarias**:

$$|\Psi_k\rangle \mapsto \hat{U}|\Psi_k\rangle = |\tilde{\Psi}_k\rangle, \quad |\Phi\rangle \mapsto \hat{U}|\Phi\rangle = |\tilde{\Phi}\rangle$$

pues

$$\text{Prob}(|\Phi\rangle \mapsto |\Psi_k\rangle) = \text{Prob}(|\tilde{\Phi}\rangle \mapsto |\tilde{\Psi}_k\rangle)$$

Luego el sistema físico es invariante frente a cualquier transformación unitaria.

Lo anterior se puede ver muy bien usando los operadores de proyección o proyectores.

Imaginemos que tenemos la magnitud L y que el resultado de la medición es en valor λ_k que asumiremos simple. Tras la medición el sistema estará en el estado $|\Psi_k\rangle$, donde $|\Psi_k\rangle$ es el autovector asociado a λ_k .

Definamos el **operador de proyección** P_k sobre el subespacio generado por $|\Psi_k\rangle$ de la siguiente forma

$$\hat{P}_k : \mathbb{H} \mapsto \mathbb{H}, \quad \hat{P}_k |\Psi\rangle = \langle \Psi_k | \Psi \rangle |\Psi_k\rangle.$$

Por comodidad escribiremos $\hat{P}_k = |\Psi_k\rangle \langle \Psi_k|$.

De la definición se tiene que

- 1 $\hat{\mathcal{P}}_k^2 := \hat{\mathcal{P}}_k \circ \hat{\mathcal{P}}_k = \hat{\mathcal{P}}_k$
- 2 $\hat{\mathcal{P}}_k$ es hermítico: $\hat{\mathcal{P}}_k^+ = \hat{\mathcal{P}}_k$
- 3 Los autovalores de $\hat{\mathcal{P}}_k$ son 0 ó 1.

De la definición se tiene que

- 1 $\hat{\mathcal{P}}_k^2 := \hat{\mathcal{P}}_k \circ \hat{\mathcal{P}}_k = \hat{\mathcal{P}}_k$
- 2 $\hat{\mathcal{P}}_k$ es hermítico: $\hat{\mathcal{P}}_k^+ = \hat{\mathcal{P}}_k$
- 3 Los autovalores de $\hat{\mathcal{P}}_k$ son o 0 ó 1.

¿Y si λ_k es degenerado, i.e., tiene asociado un subespacio de dimensión $K > 1$?

De la definición se tiene que

- 1 $\widehat{\mathcal{P}}_k^2 := \widehat{\mathcal{P}}_k \circ \widehat{\mathcal{P}}_k = \widehat{\mathcal{P}}_k$
- 2 $\widehat{\mathcal{P}}_k$ es hermítico: $\widehat{\mathcal{P}}_k^+ = \widehat{\mathcal{P}}_k$
- 3 Los autovalores de $\widehat{\mathcal{P}}_k$ son o 0 ó 1.

¿Y si λ_k es degenerado, i.e., tiene asociado un subespacio de dimensión $K > 1$?

En ese caso $\widehat{\mathcal{P}}_k$ es la suma de los proyectores asociados a cada uno de los vectores de la base ortonormal $(\Psi_{k,j})_{j=1}^K$ del autoespacio asociado a λ_k :

$$\widehat{\mathcal{P}}_k = \sum_{j=1}^K |\Psi_{k,j}\rangle \langle \Psi_{k,j}|$$

Es fácil comprobar que en este caso se tiene las mismas propiedades que en el caso cuando $K = 1$.

Todo lo anterior nos lleva a afirmar que tras la medición de la magnitud L del sistema, cuyo estado inicial (previo a la medición) era $|\Psi\rangle$, obtendremos el resultado λ_k con probabilidad

$$\text{Prob}(|\Phi\rangle \mapsto |\Psi_k\rangle) = \|\hat{\mathcal{P}}_k|\Psi\rangle\|^2$$

siendo el estado final del sistema el definido por el vector $\hat{\mathcal{P}}_k|\Psi\rangle$.

Esto es cierto aunque resultado de la medición sea más de un valor λ_k como ocurre en ciertos experimentos.

3. Dada cualquier cantidad física clásica L le podemos adicionar la cantidad $x_i p_j - p_j x_i$ sin cambiarla. Si transformamos L en su operador $\widehat{\mathcal{L}}$ ya no le podemos adicionar el correspondiente operador $\widehat{x}_i \widehat{p}_j - \widehat{p}_j \widehat{x}_i$ pues éste no es nulo (postulado VI).

Tomando las derivadas funcionales

$$\frac{\partial}{\partial \widehat{x}_i} (\widehat{x}_i \widehat{p}_j - \widehat{p}_j \widehat{x}_i) = \frac{\partial}{\partial \widehat{p}_i} (\widehat{x}_i \widehat{p}_j - \widehat{p}_j \widehat{x}_i) = 0,$$

i.e., $\widehat{x}_i \widehat{p}_j - \widehat{p}_j \widehat{x}_i$ es proporcional a $\widehat{\mathcal{L}} \implies \widehat{x}_i \widehat{p}_j - \widehat{p}_j \widehat{x}_i = \alpha \widehat{\mathcal{L}}$.

3. Dada cualquier cantidad física clásica L le podemos adicionar la cantidad $x_i p_j - p_j x_i$ sin cambiarla. Si transformamos L en su operador $\widehat{\mathcal{L}}$ ya no le podemos adicionar el correspondiente operador $\widehat{x}_i \widehat{p}_j - \widehat{p}_j \widehat{x}_i$ pues éste no es nulo (postulado VI).

Tomando las derivadas funcionales

$$\frac{\partial}{\partial \widehat{x}_i} (\widehat{x}_i \widehat{p}_j - \widehat{p}_j \widehat{x}_i) = \frac{\partial}{\partial \widehat{p}_i} (\widehat{x}_i \widehat{p}_j - \widehat{p}_j \widehat{x}_i) = 0,$$

i.e., $\widehat{x}_i \widehat{p}_j - \widehat{p}_j \widehat{x}_i$ es proporcional a $\widehat{\mathcal{I}}$ $\implies \widehat{x}_i \widehat{p}_j - \widehat{p}_j \widehat{x}_i = \alpha \widehat{\mathcal{I}}$.

Si además \widehat{x}_i y \widehat{p}_j son hermíticos entonces, necesariamente, $\alpha = i\hbar$ donde $\hbar \in \mathbb{R}$.

3. Dada cualquier cantidad física clásica L le podemos adicionar la cantidad $x_i p_j - p_j x_i$ sin cambiarla. Si transformamos L en su operador $\widehat{\mathcal{L}}$ ya no le podemos adicionar el correspondiente operador $\widehat{x}_i \widehat{p}_j - \widehat{p}_j \widehat{x}_i$ pues éste no es nulo (postulado VI).

Tomando las derivadas funcionales

$$\frac{\partial}{\partial \widehat{x}_i} (\widehat{x}_i \widehat{p}_j - \widehat{p}_j \widehat{x}_i) = \frac{\partial}{\partial \widehat{p}_i} (\widehat{x}_i \widehat{p}_j - \widehat{p}_j \widehat{x}_i) = 0,$$

i.e., $\widehat{x}_i \widehat{p}_j - \widehat{p}_j \widehat{x}_i$ es proporcional a $\widehat{\mathcal{L}} \implies \widehat{x}_i \widehat{p}_j - \widehat{p}_j \widehat{x}_i = \alpha \widehat{\mathcal{L}}$.

Si además \widehat{x}_i y \widehat{p}_j son hermíticos entonces, necesariamente, $\alpha = i\hbar$ donde $\hbar \in \mathbb{R}$. Se recupera la relación de conmutación del postulado VI.

El espacio de Hilbert más habitual en MC es $L^2(\Omega)$. En $L^2(\Omega)$ se puede probar que

$$\hat{x}_j := x_j \hat{\mathcal{I}} \implies \hat{x}^k \Psi(x) = x^k \Psi(x)$$

$$\hat{p}_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \implies \hat{p}_k \Psi(x) = -i\hbar \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x_k}$$

Es fácil comprobar que: $[\hat{p}, \hat{x}] = \hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} = -i\hbar \hat{\mathcal{I}}$.

El espacio de Hilbert más habitual en MC es $L^2(\Omega)$. En $L^2(\Omega)$ se puede probar que

$$\hat{x}_j := x_j \hat{\mathcal{I}} \implies \hat{x}^k \Psi(x) = x^k \Psi(x)$$

$$\hat{p}_k = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_k} \implies \hat{p}_k \Psi(x) = -i\hbar \frac{\partial \Psi(x)}{\partial x_k}$$

Es fácil comprobar que: $[\hat{p}, \hat{x}] = \hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p} = -i\hbar \hat{\mathcal{I}}$.

Ejercicio: A partir de lo anterior prueba que para cualquier función analítica $F(z)$

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

Supongamos que el Hamiltoniano del sistema es

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

donde $\hat{V} = V(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3) = V(x_1, x_2, x_3)\hat{\mathcal{I}}$ sólo depende de las coordenadas.

Supongamos que el Hamiltoniano del sistema es

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

donde $\hat{V} = V(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3) = V(x_1, x_2, x_3)\hat{\mathcal{I}}$ sólo depende de las coordenadas.

Por simplicidad trabajaremos sólo con la proyección en el eje OX .

Como $[\hat{p}, \hat{T}] = 0$ y $[\hat{p}, F(\hat{x})] = -i\hbar \frac{\partial F(\hat{x})}{\partial \hat{x}} \implies$

$$[\hat{p}, \hat{\mathcal{H}}] = [\hat{p}, V(\hat{x})] = -i\hbar \frac{\partial V(\hat{x})}{\partial \hat{x}} = -i\hbar \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{x}}$$

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

$$\frac{d}{dt} \langle \Phi | \hat{p}_i | \Psi \rangle = - \left\langle \Phi \left| \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{x}_i} \right| \Psi \right\rangle \implies \frac{d\hat{p}}{dt} = - \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{x}},$$

de donde se sigue que

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = - \frac{i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{\mathcal{H}}].$$

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

$$\frac{d}{dt} \langle \Phi | \hat{\rho}_i | \Psi \rangle = - \left\langle \Phi \left| \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{x}_i} \right| \Psi \right\rangle \implies \frac{d\hat{p}}{dt} = - \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{x}},$$

de donde se sigue que

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = - \frac{i}{\hbar} [\hat{p}, \hat{\mathcal{H}}].$$

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

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{x}, \hat{\mathcal{H}}].$$

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.

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 V y que $\frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{x}} = i/\hbar [\hat{p}, \hat{\mathcal{H}}] \implies$

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

Luego, por un lado,

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

Luego, por un lado,

$$\left\langle \frac{\partial \Phi}{\partial t} \left| \hat{p} \right| \Psi \right\rangle + \left\langle \Phi \left| \hat{p} \right| \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \Phi}{\partial t} \left| \hat{p} \Psi \right\rangle + \left\langle \hat{p} \Phi \left| \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle \right.$$

y, por otro, $\frac{i}{\hbar} \langle \Phi | [\hat{p}, \hat{\mathcal{H}}] | \Psi \rangle =$

$$= \frac{i}{\hbar} \left(\langle \Phi | \hat{p} \hat{\mathcal{H}} | \Psi \rangle - \langle \Phi | \hat{\mathcal{H}} \hat{p} | \Psi \rangle \right) = \left\langle \hat{p} \Phi \left| \frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} \Psi \right\rangle + \left\langle \frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} \Phi \left| \hat{p} \Psi \right\rangle \right.,$$

Luego, por un lado,

$$\left\langle \frac{\partial \Phi}{\partial t} \left| \hat{p} \right| \Psi \right\rangle + \left\langle \Phi \left| \hat{p} \right| \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \Phi}{\partial t} \left| \hat{p} \Psi \right\rangle + \left\langle \hat{p} \Phi \left| \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle \right.$$

y, por otro, $\frac{i}{\hbar} \langle \Phi | [\hat{p}, \hat{\mathcal{H}}] | \Psi \rangle =$

$$= \frac{i}{\hbar} \left(\langle \Phi | \hat{p} \hat{\mathcal{H}} | \Psi \rangle - \langle \Phi | \hat{\mathcal{H}} \hat{p} | \Psi \rangle \right) = \left\langle \hat{p} \Phi \left| \frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} \Psi \right\rangle + \left\langle \frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} \Phi \left| \hat{p} \Psi \right\rangle \right.,$$

de donde se sigue que

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

cualquiera sean los vectores Φ y Ψ .

Por tanto, necesariamente tenemos

la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}|\Psi\rangle.$$

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

Por tanto, necesariamente tenemos

la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}|\Psi\rangle.$$

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

Las ecuaciones dinámicas del postulado V han de cumplirse independientemente de que escojamos la representación de Schrödinger (S) o la de Heisenberg (H). Además, los observables que medimos deben tener los mismos valores medios en ambas representaciones. Eso implica que ha de existir una transformación unitaria $\{U\}$ que pase de S a H y viceversa.

Probemos que ambas representaciones son equivalentes.

Para ello sean $|\psi\rangle$ y $\hat{\ell}$ la función de estado y el observable en la representación de Heisenberg y sean $|\Psi\rangle$ y $\hat{\mathcal{L}}$ en la de Schrödinger. Entonces entre ambas existe la relación:

$$|\Psi\rangle = \hat{U}^+ |\psi\rangle, \quad \hat{\mathcal{L}} = \hat{U}^+ \hat{\ell} \hat{U}, \quad \hat{U} = e^{i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar}.$$

donde $\hat{\mathcal{H}}$ es el operador hamiltoniano del sistema que se asume independiente del tiempo.

Si $|\psi\rangle$ no depende del tiempo, entonces

$$\frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \frac{\partial \hat{U}^+}{\partial t} |\psi\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} e^{-i\hat{\mathcal{H}}t/\hbar} |\psi\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{\mathcal{H}} |\Psi\rangle,$$

i.e., la ecuación de Schrödinger $i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}} |\Psi\rangle$.

Recordemos que $|\psi\rangle$ y $\hat{\ell}$ son la función de estado y el observable en la representación de Heisenberg y $|\Psi\rangle$ y $\hat{\mathcal{L}}$ en la de Schrödinger.

$$|\Psi\rangle = \hat{U}^+ |\psi\rangle, \quad \hat{\ell} = \hat{U} \hat{\ell} \hat{U}^+, \quad \hat{U} = e^{i\hat{H}t/\hbar}, \quad \hat{U}^+ = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$$

Supongamos que $\hat{\mathcal{L}}$ (representación de Schrödinger) no depende de t . Entonces,

$$\frac{\partial \hat{\ell}}{\partial t} = \frac{\partial \hat{U}}{\partial t} \hat{\ell} \hat{U}^+ + \hat{U} \underbrace{\frac{\partial \hat{\mathcal{L}}}{\partial t}}_{=0} \hat{U}^+ + \hat{U} \hat{\mathcal{L}} \frac{\partial \hat{U}^+}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{\ell} - \hat{\ell} \hat{H}) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\ell}].$$

Si escogemos $\hat{\ell}$ como el operador \hat{p} y \hat{x} recuperamos las ecuaciones de Heisenberg para el momento y la posición, respectivamente.

De lo anterior se sigue que en la representación de Heisenberg una cantidad física es independiente del tiempo si el operador asociado a dicha magnitud conmuta con el Hamiltoniano. Esta propiedad es además muy significativa desde el punto de vista físico como veremos a continuación.

De lo anterior se sigue que en la representación de Heisenberg una cantidad física es independiente del tiempo si el operador asociado a dicha magnitud conmuta con el Hamiltoniano. Esta propiedad es además muy significativa desde el punto de vista físico como veremos a continuación.

Definición

Se dice que una cantidad observable $\hat{\ell}$ es una integral de movimiento si

$$\frac{d}{dt}\langle a \rangle = \frac{d}{dt}\langle \Psi | \hat{\mathcal{A}} | \Psi \rangle = 0.$$

Es decir, una magnitud es una integral de movimiento si dicha magnitud se conserva en media.

Sea un observable $\hat{\mathcal{A}}$ y un estado definido por $|\Psi\rangle$.

Calculamos la derivada del elemento matricial

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi|\hat{\mathcal{A}}|\Psi\rangle = \left\langle\frac{\partial\Psi}{\partial t}\left|\hat{\mathcal{A}}\right|\Psi\right\rangle + \left\langle\Psi\left|\frac{\partial\hat{\mathcal{A}}}{\partial t}\right|\Psi\right\rangle + \left\langle\Psi\left|\hat{\mathcal{A}}\right|\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right\rangle.$$

Sea un observable \hat{A} y un estado definido por $|\Psi\rangle$.

Calculamos la derivada del elemento matricial

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \left\langle\frac{\partial\Psi}{\partial t}\left|\hat{A}\right|\Psi\right\rangle + \left\langle\Psi\left|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right|\Psi\right\rangle + \left\langle\Psi\left|\hat{A}\right|\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right\rangle.$$

Supongamos ahora que estamos en la representación de Schrödinger, i.e., A no depende de t y $|\Psi\rangle$ satisface la Ec. Sch. $i\hbar\frac{\partial|\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}|\Psi\rangle$

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \left\langle\Psi\left|\frac{i}{\hbar}[\hat{\mathcal{H}}, \hat{A}]\right|\Psi\right\rangle.$$

Entonces, $\frac{d}{dt}\langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = 0 \iff [\hat{A}, \hat{\mathcal{H}}] = 0$.

Si ahora escogemos la representación de Heisenberg entonces ($|\Psi\rangle$ no depende del tiempo, pero $\hat{\mathcal{A}}$ si puede)

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi|\hat{\mathcal{A}}|\Psi\rangle = \left\langle\Psi\left|\frac{\partial\hat{\mathcal{A}}}{\partial t}\right|\Psi\right\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\Psi|[\hat{\mathcal{H}},\hat{\mathcal{A}}]|\Psi\rangle,$$

donde hemos usado la Ec.de Heisenberg

$$\frac{\partial\hat{\mathcal{A}}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}[\hat{\mathcal{H}},\hat{\mathcal{A}}].$$

Si ahora escogemos la representación de Heisenberg entonces ($|\Psi\rangle$ no depende del tiempo, pero $\hat{\mathcal{A}}$ si puede)

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi|\hat{\mathcal{A}}|\Psi\rangle = \left\langle\Psi\left|\frac{\partial\hat{\mathcal{A}}}{\partial t}\right|\Psi\right\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle\Psi|[\hat{\mathcal{H}},\hat{\mathcal{A}}]|\Psi\rangle,$$

donde hemos usado la Ec.de Heisenberg

$$\frac{\partial\hat{\mathcal{A}}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}[\hat{\mathcal{H}},\hat{\mathcal{A}}].$$

Es decir, también en la representación de Heisenberg

$$\frac{d}{dt}\langle\Psi|\hat{\mathcal{A}}|\Psi\rangle = 0 \iff [\hat{\mathcal{A}},\hat{\mathcal{H}}] = 0.$$

Probamos que tenemos $d/dt(\|\Psi\rangle\|^2) = 0$, lo que implica que la probabilidad total no cambia en el tiempo.

Problemas que tenemos $d/dt(\|\Psi\rangle\|^2) = 0$, lo que implica que la probabilidad total no cambia en el tiempo.

Sea la ecuación de Schrödinger y su conjugada

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}|\Psi\rangle, \quad -i\hbar\frac{\partial\langle\Psi|}{\partial t} = \langle\Psi|\hat{\mathcal{H}}^+.$$

Probemos que tenemos $d/dt(\|\Psi\|^2) = 0$, lo que implica que la probabilidad total no cambia en el tiempo.

Sea la ecuación de Schrödinger y su conjugada

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}|\Psi\rangle, \quad -i\hbar \frac{\partial \langle\Psi|}{\partial t} = \langle\Psi|\hat{\mathcal{H}}^+.$$

Tomando el producto escalar de la 2ª por $|\Psi\rangle$ (por la derecha) y de la 1ª por $\langle\Psi|$ (por la izquierda) obtenemos, respectivamente

$$\langle\Psi|\hat{\mathcal{H}}^+|\Psi\rangle = -i\hbar \left\langle \frac{\partial\Psi}{\partial t} \middle| \Psi \right\rangle, \quad \langle\Psi|\hat{\mathcal{H}}|\Psi\rangle = i\hbar \left\langle \Psi \middle| \frac{\partial\Psi}{\partial t} \right\rangle,$$

Probemos que tenemos $d/dt(\|\Psi\|^2) = 0$, lo que implica que la probabilidad total no cambia en el tiempo.

Sea la ecuación de Schrödinger y su conjugada

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{\mathcal{H}}|\Psi\rangle, \quad -i\hbar \frac{\partial \langle\Psi|}{\partial t} = \langle\Psi|\hat{\mathcal{H}}^+.$$

Tomando el producto escalar de la 2ª por $|\Psi\rangle$ (por la derecha) y de la 1ª por $\langle\Psi|$ (por la izquierda) obtenemos, respectivamente

$$\langle\Psi|\hat{\mathcal{H}}^+|\Psi\rangle = -i\hbar \left\langle \frac{\partial\Psi}{\partial t} \middle| \Psi \right\rangle, \quad \langle\Psi|\hat{\mathcal{H}}|\Psi\rangle = i\hbar \left\langle \Psi \middle| \frac{\partial\Psi}{\partial t} \right\rangle,$$

de donde, restando ambas y usando la hermiticidad de $\hat{\mathcal{H}}$ tenemos

$$0 = \left\langle \frac{\partial\Psi}{\partial t} \middle| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \frac{\partial\Psi}{\partial t} \right\rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle\Psi|\Psi\rangle = \frac{\partial \|\Psi\|^2}{\partial t}.$$

Una transformación unitaria muy especial

Sea el operador unitario $U(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$, donde H es el Hamiltoniano del sistema.

Como los sistemas son invariantes frente a las transformaciones unitarias ello implica que si definimos el estado

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle$$

ambos han de describir el mismo estado.

Una transformación unitaria muy especial

Sea el operador unitario $U(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$, donde H es el Hamiltoniano del sistema.

Como los sistemas son invariantes frente a las transformaciones unitarias ello implica que si definimos el estado

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle$$

ambos han de describir el mismo estado. De lo anterior se deduce que para todo t_0 ,

$$|\Psi(t + t_0)\rangle = U(t)|\Psi(t_0)\rangle$$

es decir, que los estados físicos son invariantes frente a las traslaciones temporales y que $\|\Psi(t + t_0)\|^2 = \|\Psi(t_0)\|^2$, i.e., el **test de consistencia** de antes.

Sea el operador unitario $U(t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar}$, donde H es el Hamiltoniano del sistema.

Como los sistemas son invariantes frente a las transformaciones unitarias ello implica que si definimos el estado

$$|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle$$

ambos han de describir el mismo estado. De lo anterior se deduce que para todo t_0 ,

$$|\Psi(t + t_0)\rangle = U(t)|\Psi(t_0)\rangle$$

es decir, que los estados físicos son invariantes frente a las traslaciones temporales y que $\|\Psi(t + t_0)\|^2 = \|\Psi(t_0)\|^2$, i.e., el **test de consistencia** de antes.

Nótese que tomado derivadas respecto a t en $|\Psi(t)\rangle = U(t)|\Psi(0)\rangle$ obtenemos la **ecuación de Schrödinger**.

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

$$\Delta\hat{A} = \hat{A} - \langle A \rangle \hat{\mathcal{I}}, \quad \Delta\hat{B} = \hat{B} - \langle B \rangle \hat{\mathcal{I}},$$

donde $\langle A \rangle$ y $\langle B \rangle$ son los valores medios de \hat{A} y \hat{B} en el estado $|\Psi\rangle$.

Entonces, como $[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{\mathcal{L}}$, con $\hat{\mathcal{L}}$ hermítico, se sigue que $[\Delta\hat{A}, \Delta\hat{B}] = i\hat{\mathcal{L}}$.

Las dispersiones de las cantidades A y B en el estado $|\Psi\rangle$ vendrán dadas por

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

$$\Delta B := \sqrt{\langle \Psi | (\Delta \hat{B})^2 | \Psi \rangle} = \|\Delta \hat{B} \Psi\|.$$

Si usamos la desigualdad de Cauchy-Schwarz ($\|f\| \cdot \|g\| \geq |\langle f, g \rangle|$)

$$\|\Delta \hat{A} \Psi\| \|\Delta \hat{B} \Psi\| \geq |\langle \Delta \hat{A} \Psi | \Delta \hat{B} \Psi \rangle| \geq |\Im \langle \Delta \hat{A} \Psi | \Delta \hat{B} \Psi \rangle|$$

Calculemos la parte imaginaria de

$$\langle \Delta \hat{A} \Psi | \Delta \hat{B} \Psi \rangle = \langle \Psi | \Delta \hat{A} \Delta \hat{B} | \Psi \rangle$$

—recordemos que A es hermítico, luego $\Delta \hat{A}$ también lo es pues $\langle A \rangle$ es real—. Obtenemos

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

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

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{|I|}{2}.$$

Lo anterior aplicado a los operadores \hat{p} y \hat{x} (ver postulado V) nos conduce al principio de incertidumbre de Heisenberg

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

Supongamos que tenemos una base $(|\Psi_n\rangle)_n$ completa de vectores de \mathbb{H} . Entonces, todo vector $|\Psi\rangle$ de \mathbb{H} lo podemos escribir, como ya hemos visto, de la forma

$$|\Psi\rangle = \sum_n f_n |\Psi_n\rangle, \quad f_n = \langle \Psi_n | \Psi \rangle.$$

Es decir, a cada vector de \mathbb{H} le podemos hacer corresponder su vector $\mathbf{f} = (f_1, f_2, \dots)^T$. Análogamente, a cada operador $\hat{\mathcal{L}}$ le podemos hacer corresponder una matriz \mathbf{L} con entradas $L_{m,n} = \langle \Psi_m | \hat{\mathcal{L}} | \Psi_n \rangle$. Luego la ecuación $\frac{\partial \hat{\ell}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\ell}]$ se puede escribir en la forma

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, \mathbf{L}].$$

donde \mathbf{H} es la matriz correspondiente al hamiltoniano del sistema, i.e., recuperamos la también antes mencionada *mecánica matricial de Heisenberg*.

Supongamos que el observable L es independiente del tiempo y que $|\Psi\rangle$ es solución de la ecuación de Schrödinger, siendo $\hat{\mathcal{H}}$

$$\hat{\mathcal{H}} = \frac{\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 + \hat{p}_3^2}{2m} + V(\hat{x}_1, \hat{x}_2, \hat{x}_3) = \hat{T} + \hat{V}.$$

Entonces, la ecuación

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi | \hat{\mathcal{L}} | \Psi \rangle = \left\langle \Psi \left| \frac{\partial \hat{\mathcal{L}}}{\partial t} - \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{L}}, \hat{\mathcal{H}}] \right| \Psi \right\rangle$$

nos da

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathcal{L}} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{L}}] \rangle.$$

Sea $\hat{\mathcal{L}} = \hat{x}_k$. Usando $[\hat{x}, F(\hat{p})] = i\hbar \frac{\partial F(\hat{p})}{\partial \hat{p}}$ tenemos

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{x}_k] = [\hat{T}, \hat{x}_k] = -i\hbar \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{p}_k}.$$

Sustituyendo lo anterior en

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathcal{L}} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{L}}] \rangle,$$

obtenemos

$$\frac{d}{dt} \langle x_k \rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{p}_k} \right\rangle.$$

Sea $\hat{\mathcal{L}} = \hat{p}_k$. Entonces, usando que $[\hat{p}, F(\hat{x})] = -i\hbar \frac{\partial F(\hat{x})}{\partial \hat{x}}$

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{p}_k] = [\hat{V}, x_k] = i\hbar \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{x}_k},$$

de donde, usando otra vez $\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathcal{L}} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{L}}] \rangle \implies$

$$\frac{d}{dt} \langle p_k \rangle = - \left\langle \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{x}_k} \right\rangle.$$

Es decir, si la función de estado evoluciona según la ecuación de Schrödinger entonces las medias de las coordenadas e impulsos se comportan como en la mecánica hamiltoniana clásica.

Sea $\hat{\mathcal{L}} = \hat{p}_k$. Entonces, usando que $[\hat{p}, F(\hat{x})] = -i\hbar \frac{\partial F(\hat{x})}{\partial \hat{x}}$

$$[\hat{\mathcal{H}}, \hat{p}_k] = [\hat{V}, x_k] = i\hbar \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{x}_k},$$

de donde, usando otra vez $\frac{d}{dt} \langle \hat{\mathcal{L}} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle [\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{L}}] \rangle \implies$

$$\frac{d}{dt} \langle p_k \rangle = - \left\langle \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}}{\partial \hat{x}_k} \right\rangle.$$

Es decir, si la función de estado evoluciona según la ecuación de Schrödinger entonces las medias de las coordenadas e impulsos se comportan como en la mecánica hamiltoniana clásica.

¡El postulado V es equivalente a la ecuación de Schrödinger!

- 1 L. Debnath y P. Mikusinsk. Introduction to Hilbert spaces with applications, Eselvier Academic Press, 2005.
- 2 E. Prugovecki, *Quantum Mechanics in Hilbert space*. Academic Press, New York, 1971.
- 3 Steven Weinberg, *Lectures on Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, 2012.