

## 6 Postulados de la mecánica cuántica

Ya hemos formulado postulados (porque no pueden demostrarse) de la mecánica cuántica dentro del marco de la mecánica ondulatoria. Ahora tenemos un marco matemático más general y nuestros objetivos son:

- Cómo podemos describir un estado de un sistema cuántico en un dado tiempo?
- Dado un estado como se pueden predecir los resultados de la medición de las diferentes magnitudes físicas?
- Como podemos conocer el estado del sistema en un tiempo  $t$  si lo conocíamos en un tiempo anterior  $t_0$ .

### 6.1 Primer postulado: descripción de un estado

Hemos hecho una correspondencia  $\psi(\mathbf{r}, t_0) \in \mathcal{F} \rightarrow |\psi(t_0)\rangle \in \mathcal{E}_{\mathbf{r}}$  y vimos a la función de onda como la componente de un ket en la base de posición. También vimos que hay kets que no tienen una función de onda de cuadrado integrable, pero que pueden ser parte de una base y además que podría haber otros grados de libertad además de las coordenadas. Además podemos tener sistemas de más de una partícula. Por esto se postula :

*A un tiempo  $t_0$  el estado de un sistema es especificado por un ket  $|\psi(t_0)\rangle$  perteneciente a un espacio vectorial de estados  $\mathcal{E}$ .*

Es importante notar que al pedir que el ket pertenezca a un espacio vectorial estamos asumiendo el principio de superposición.

La **dimensión de  $\mathcal{E}$  depende de la naturaleza del sistema físico**. Por ejemplo el átomo de Plata en el experimento de Stern-Gerlach podía seguir dos trayectorias dependiendo del valor de  $\hat{S}_z$  y tenemos dimensión 2. Ya vimos que cuando medimos posición o impulso se pueden obtener  $\infty$  resultados y así la dimensión del espacio será  $\infty$ .

Podemos tener **numerabilidad o no numerabilidad** de los espacios de dimensión infinita como por ejemplo en los estados del pozo  $\infty$  o en los estados de posición o impulso, respectivamente.

### 6.2 Segundo postulado: descripción de una cantidad física

Hemos estudiado operadores que fueron introducidos para definir el valor medio de una magnitud cuando realizábamos mediciones sobre el estado de una partícula y hemos introducido el operador Hamiltoniano  $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r})$  que representa la energía de una partícula en la representación de posición y que al resolver la ec. de Schrödinger independiente del tiempo en un problema concreto, podía conducir a la cuantificación de la energía al resolver un problema de autovalores. Podemos generalizar esto mediante el 2do postulado:

*Toda magnitud física  $L$  está descrita por un operador  $\hat{L} : \mathcal{E} \rightarrow \mathcal{E}$  que es un observable, es decir es lineal, hermítico, y tiene un conjunto de autovectores que son base del espacio.*

Así como habíamos mencionado antes cambiamos la descripción clásica de un estado de una partícula en el tiempo  $t$  mediante seis coordenadas  $\mathbf{r}(t), \mathbf{v}(t)$  por una descripción cuántica de infinitas coordenadas  $\psi(\mathbf{r}, t)$  (el valor de la función de onda en cada punto) y el concepto de trayectoria como sucesión de las posiciones

en el tiempo por evolución de la función de onda en el tiempo y que los valores medios de la magnitud  $\lambda$  se determinan con un operador lineal asociado  $\hat{\lambda}(\mathbf{r}, \nabla)$ . **Ahora estamos generalizando independientemente de la representación diciendo que el estado es un ket y las magnitudes se representan por operadores que actúan en el espacio de kets.**

### 6.3 Tercer postulado: medición de magnitudes físicas

Hemos trabajado en diversos problemas determinando el espectro del operador Hamiltoniano  $\hat{H}$  en la representación de posición y comprobamos que los únicos valores que puede tomar la energía son los valores propios de este operador en el espacio de funciones de onda, y que dicho espectro podía ser continuo o discreto según el problema y el rango de energías. Ahora queremos generalizar ésto a cualquier magnitud diferente de la energía y lo resumimos en el tercer postulado:

*Los únicos resultados posibles en la medición de una magnitud física  $L$  son los autovalores de su observable asociado  $\hat{L}$ .*

Es importante hacer las siguientes observaciones:

- Los valores de  $L$  son números reales y por lo tanto necesariamente  $\hat{L}$  debe ser un operador hermítico ya que como vimos tienen autovalores reales
- Cuando el espectro de autovalores es discreto, como en el caso de las energías en el pozo finito o infinito, decimos que la magnitud física está cuantizada.

### 6.4 Cuarto postulado: probabilidad de medir cierto valor de una magnitud (pio. desc. espectral)

Consideremos un estado  $|\psi(t)\rangle \equiv |\psi\rangle$  normalizado y supongamos que queremos predecir la medida en este tiempo de una magnitud  $L$  asociada al observable  $\hat{L}$ . Sabemos que debemos dar una interpretación de tipo probabilístico para obtener alguno de los autovalores  $\lambda$  del operador. Sabemos que el espectro de autovalores puede ser discreto o continuo, degenerado o no. Enunciémoslo para el caso discreto no degenerado y luego lo generalizamos a otros casos.

Supongamos el espectro enteramente discreto  $\{\lambda_n\}$  donde  $\hat{L}|u_n\rangle = \lambda_n|u_n\rangle$ , siendo  $|u_n\rangle$  los autoestados correspondientes. Como  $\hat{L}$  es un observable  $\{|u_n\rangle\}$  son una base de  $\mathcal{E}$  que podemos considerar ortonormal, por lo tanto se puede desarrollar al estado  $|\psi\rangle$  como  $(c_n(t) \equiv c_n)$

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |u_n\rangle, \quad (148)$$

vemos que **hemos desarrollado al estado en estados donde lo que vamos a medir tiene un valor definido**, y aquí viene el postulado

*Cuando la magnitud física  $L$  es medida sobre un estado normalizado  $|\psi\rangle$  la probabilidad de obtener  $\lambda_n$  no degenerado en la medición es :*

$$\mathcal{P}(\lambda_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2, \quad (149)$$

Vemos que esta es una generalización de lo que analizamos al principio del curso con la mecánica ondulatoria  $|\langle \mathbf{r} | \psi \rangle|^2 = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ . En caso de que sea un autovalor degenerado con degeneración  $g_n$  ahora la expansión del estado  $|\psi\rangle$  será

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle, \quad (150)$$

y ahora la probabilidad de medir  $\lambda_n$  será

$$\mathcal{P}(\lambda_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2, \quad (151)$$

donde esta probabilidad debería ser independiente de la base  $\{|u_n^i\rangle\}$ , que elegimos en  $\mathcal{E}_n$  que no es única. Lo que puede verse es que

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i | \psi \rangle = \sum_n \hat{P}_n |\psi\rangle, \quad (152)$$

pero como  $\hat{P}_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i|$ , que cumple con la propiedad  $\hat{P}_n^2 = \hat{P}_n$  por ser un proyector independientemente de la base ortonormal elegida en  $\mathcal{E}_n$ , es único y así

$$\mathcal{P}(\lambda_n) = \sum_{i=1}^{g_n} \langle \psi | u_n^i \rangle \langle u_n^i | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle,$$

es único. Es decir cualquiera sea la base elegida en  $\mathcal{E}_n$  la probabilidad de medir  $\lambda_n$  es la misma.

A pesar de estar hablando de un sólo sistema físico, para determinar la probabilidad (149) debemos considerar una gran cantidad de mediciones sobre lo que se conoce como un ensamble, que es una colección de sistemas físicos idénticamente preparados cada uno caracterizado por el mismo ket  $|\psi\rangle$ .

Por ejemplo cuando filtramos las partículas del experimento de Stern-Gerlach con  $S_z = +\frac{\hbar}{2}$  estas forman un ensamble de sistemas igualmente preparados que tienen el mismo ket  $|S_z = +\frac{\hbar}{2}\rangle$  ahora podría por ejemplo medir de vuelta e inmediatamente  $\hat{S}_z$  y preguntarme por la probabilidad de obtener una proyección dada. Por ejemplo

$$\mathcal{P}(S_z = +\frac{\hbar}{2}) = \left| \left\langle S_z = +\frac{\hbar}{2} \mid S_z = +\frac{\hbar}{2} \right\rangle \right|^2 = 1, \quad \mathcal{P}(S_z = -\frac{\hbar}{2}) = \left| \left\langle S_z = -\frac{\hbar}{2} \mid S_z = +\frac{\hbar}{2} \right\rangle \right|^2 = 0$$

vemos que en esos casos extremos el postulado funciona.

En cambio si preparé al ensamble en  $|S_x \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{z+}\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{z-}\rangle$  (lo vimos al comienzo del curso) tendremos

$$\mathcal{P}(S_z = +\frac{\hbar}{2}) = \left| \left\langle S_z = +\frac{\hbar}{2} \mid S_x = +\frac{\hbar}{2} \right\rangle \right|^2 = \frac{1}{2},$$

y así **la mitad de las veces mediremos ese valor.**

En el caso de que todo el espectro sea continuo y no degenerado tendremos

$$\begin{aligned} \hat{L} |v_\lambda\rangle &= \lambda |v_\lambda\rangle \\ |\psi\rangle &= \int d\lambda c(\lambda) |v_\lambda\rangle, \end{aligned} \quad (153)$$

y aquí deberemos definir una densidad de probabilidad  $\rho(\lambda)$  de manera que la probabilidad de medir una magnitud entre  $\lambda$  y  $\lambda + d\lambda$  sea

$$\begin{aligned} d\mathcal{P}(\lambda) &= \rho(\lambda)d\lambda, \\ \rho(\lambda) &= |c(\lambda)|^2 = |\langle \lambda | \psi \rangle|^2. \end{aligned} \quad (154)$$

Algunas observaciones

- En cualquier caso se debe cumplir que (supongamos que hay parte discreta y otra continua)

$$\begin{aligned} \sum_n \mathcal{P}(\lambda_n) + \int d\lambda \rho(\lambda) &= \sum_{n,i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 + \sum_{i=1}^{g(\lambda)} \int d\lambda |c(\lambda)|^2 \\ &= \langle \psi | \psi \rangle = 1, \end{aligned} \quad (155)$$

es decir **la probabilidad de medir alguno de los autovalores es certeza y por esta razón el ket sobre el cual se mide debe estar normalizado.** En caso de que no fuera así debemos redefinir las probabilidades como

$$\mathcal{P}(\lambda_n) = \frac{\sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle}, \rho(\lambda) = \frac{|\langle \lambda | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (156)$$

- Notemos que es imprescindible que el operador asociado a la magnitud a medir ( $\hat{L}$ ) sea un observable ya que debemos poder desarrollar nuestro estado cualquiera sea en su base de autovectores.
- Los kets  $|\psi\rangle, |\psi\rangle e^{i\theta}$  representan el mismo estado físico ya que su norma no cambia y el módulo al cuadrado de sus coeficientes tampoco, lo cual indica que un fase global no cambia las predicciones, pero fases relativas en una combinación lineal sí lo hacen o sea que

$$|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle \neq |\psi_1\rangle e^{i\theta_1} + |\psi_2\rangle e^{i\theta_2},$$

desde el punto de vista de la probabilidad de obtener un dado autovalor.

## Valores medios:

La interpretación probabilística del 4to postulado debe interpretarse que cuando uno realiza  $N \rightarrow \infty$  experimentos idénticos sobre un sistema que se encuentra en el mismo estado físico la proporción de veces que se mide un determinado autovalor corresponde a la probabilidad teórica que nos da el postulado es decir

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N(\lambda_n)}{N} \rightarrow \mathcal{P}(\lambda_n), \sum_n N(\lambda_n) = N,$$

y así el valor medio de la magnitud medida en un estado  $|\psi\rangle$  normalizado será

$$\begin{aligned} \langle \hat{L} \rangle &= \sum_n \frac{N(\lambda_n)}{N} \lambda_n \stackrel{\lim_{N \rightarrow \infty}}{=} \sum_n \lambda_n \mathcal{P}(\lambda_n) \\ &= \sum_n \lambda_n \sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2 = \sum_n \lambda_n \sum_{i=1}^{g_n} \langle u_n^i | \psi \rangle \langle \psi | u_n^i \rangle, \hat{L} |u_n^i\rangle = \lambda_n |u_n^i\rangle \\ &= \langle \psi | \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \hat{L} |u_n^i\rangle \langle u_n^i | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle, \end{aligned} \quad (157)$$

donde vemos que **el valor medio en un estado es independiente de la representación** y donde hemos utilizado la clausura ya de la base pues el operador es un observable. Cuando el estado no está normalizado la definición se modifica para dar

$$\langle \hat{L} \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{L} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle},$$

y también puede extenderse a espectro continuo definiendo  $\langle \hat{L} \rangle = \int \lambda d\mathcal{P}(\lambda) = \int \lambda |u_\lambda|^2 d\lambda$ . No debemos confundir el valor medio de un observable con los autovalores del observable. Veamos los siguiente ejemplos.

### Ejemplo1:

Supongamos tener un estado  $|S_x \pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{z+}\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}} |S_{z-}\rangle$  obtenido inmediatamente después de medir  $\hat{S}_x$ , el valor medio en dicho estado de  $\hat{S}_z$  sería

$$\langle \hat{S}_z \rangle = \frac{1}{2} \hbar |\langle S_{z+} | S_x \pm \rangle|^2 - \frac{1}{2} \hbar |\langle S_{z-} | S_x \pm \rangle|^2 = \frac{1}{2} \hbar \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \hbar \frac{1}{2} = 0,$$

donde se ve claramente la diferencia entre el valor medio y los autovalores.

### Ejemplo2:

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle &= \int d^3r \langle \psi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \psi \rangle = \int d^3r \psi(\mathbf{r})^* \frac{\hbar}{i} \nabla \psi(\mathbf{r}) \\ &= \int d^3r \langle \psi | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \hat{\mathbf{p}} | \psi \rangle = \int d^3p c(\mathbf{p})^* \mathbf{p} c(\mathbf{p}), \end{aligned}$$

valor medio del operador impulso de una partícula en la representación de posición e impulso respectivamente.

## 6.5 5to Postulado :Reducción del paquete de ondas

Siguiendo lo que dice P.A.M. Dirac : "Una medida siempre causa que el sistema físico salte a un autoestado de la variable dinámica que está siendo medida", o sea la medición cambia al estado y esto en un lenguaje moderno se conoce como reducción del paquete de ondas.

La única excepción es cuando el estado ya está en un determinado autoestado de dicha variable dinámica. Ya habíamos visto en uno de los experimentos analizados con luz que despues de pasar por un primer analizador un fotón quedaba con una polarización dada.

Vamos a generalizar ésto a cualquier medición. Antes de medir una magnitud  $L$  sobre un estado  $|\psi\rangle$  hablamos de probabilidad de obtener un dado valor de dicha magnitud, es decir un autovalor del observable asociado. Inmediatamente realizada la medición ya no podemos hablar de probabilidad porque un dado valor fue obtenido. Ahora tenemos información adicional y es comprensible que nuestro estado original haya cambiado y sea diferente. Esto lo afirma el quinto postulado el cual enunciaremos y analizaremos posteriormente en detalle.

Si una medición de una magnitud física  $L$  se realiza sobre un sistema descrito por el ket  $|\psi(t_0)\rangle$  dando un resultado  $\lambda_n$  el estado del sistema **inmediatamente después de la medición** es la proyección normalizada sobre el espacio propio de  $\lambda_n$

$$|\psi\rangle \rightsquigarrow \frac{\hat{P}_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_n | \psi \rangle}} = \frac{\hat{P}_n |\psi\rangle}{\sqrt{\|\hat{P}_n |\psi\rangle\|^2}} \quad (158)$$

que desarrollado sería, si el estado justo antes de medir es expandido en la base de autovectores de autovalores  $\{\lambda_n\}$  como

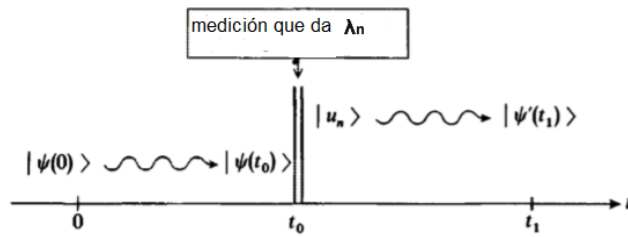
$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |\psi_n^i\rangle$$

entonces inmediatamente despues una vez que se mide un determinado valor  $a_n$  este queda modificado a

$$|\psi(t_0)\rangle \rightsquigarrow |\psi'(t_0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2}} \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle = \frac{\hat{P}_n |\psi\rangle}{\sqrt{\langle \psi_n | \hat{P}_n | \psi_n \rangle}}, \quad (159)$$

donde vemos que **el estado resultante no es un vector cualquiera de  $\mathcal{E}_n$  sino la proyección normalizada de  $|\psi\rangle$** . Y que cuando no hay degeneración ( $g_n = 1$ ) tendremos

$$|\psi'(t_0)\rangle = \frac{1}{\sqrt{\sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2}} \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle = \frac{c_n}{|c_n|} |u_n^i\rangle = e^{i \text{Arg}(c_n)} |u_n\rangle \equiv |u_n\rangle.$$



Cuando un aparato de medida hace que el estado cambie a  $|\lambda_n\rangle$  se dice que el valor de  $L$  medido es  $\lambda_n$ , *es en este sentido que el resultado de medida debe ser una de los autovalores del observable  $\hat{L}$* . Por ejemplo cuando teníamos átomos de plata antes de pasar por el experimento de Stern-Gerlach el espín  $\hat{S}_z$  de los mismos podían tener valores arbitrarios  $S_z = \pm\hbar/2$  es decir cada átomo estaba caracterizado por el estado

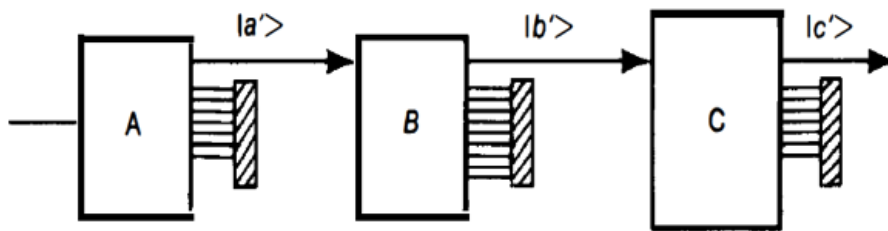
$$|\psi\rangle = c_+ |\hbar/2\rangle + c_- |-\hbar/2\rangle,$$

una vez que pasaron por el aparato estarán en  $|\hbar/2\rangle$  ó  $|-\hbar/2\rangle$ , es decir la medición afecta al estado. Más aún si bloqueamos una de las trayectorias, la otra que subsiste tiene un valor de  $S_z$  determinado. *Esto se llama además filtrar un autoestado.*

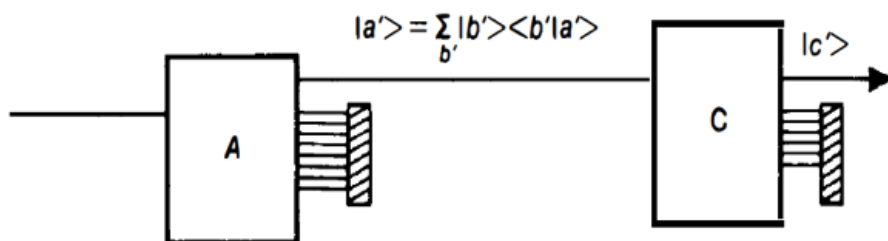
### Ejemplo:

Consideremos un ejemplo que involucra a tres observables que no conmutan entre sí  $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ ,  $[\hat{A}, \hat{C}] \neq 0$ ,  $[\hat{C}, \hat{B}] \neq 0$  con lo cual no pueden tener una base común de autoestados, esto puede demostrarse por el absurdo suponiendo lo contrario dos a dos de ellos.

Supongamos realizar medidas consecutivas como se muestra en la siguiente figura



(a)



donde  $a', b', c'$  son autovalores de los respectivos observables  $\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ . Cada aparato ha seleccionado uno de los autovalores posibles de cada observable. Estamos interesados cual es la probabilidad de obtener el valor  $c'$ . Esta probabilidad será la de obtener  $|c'\rangle$  a partir de  $|b'\rangle$  multiplicada por la de obtener  $|b'\rangle$  a partir de  $|a'\rangle$ . Ahora como  $|b'\rangle$  es un estado intermedio y podríamos tener diferentes valores  $b'$  deberíamos sumar sobre todos ellos así

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(c') &= \sum_{b'} |\langle c' | b' \rangle|^2 |\langle b' | a' \rangle|^2 = \sum_{b'} \langle c' | b' \rangle^* \langle c' | b' \rangle \langle b' | a' \rangle^* \langle b' | a' \rangle \\ &= \sum_{b'} \langle c' | b' \rangle \langle b' | a' \rangle \langle a' | b' \rangle \langle b' | c' \rangle \neq |\langle c' | a' \rangle|^2, \end{aligned}$$

pues tenemos doble producto  $|b'\rangle \langle b'|$  y no podemos usar  $\sum_{b'} |b'\rangle \langle b'| = I$ .

Si ahora seguimos el arreglo experimental de abajo donde el detector correspondiente a  $\hat{B}$  no esta o esta desactivado, pensamos al estado  $|a'\rangle$  desarrollado en estados  $|c'\rangle$  y asi la probabilidad será  $\mathcal{P}(c') = |\langle c' | a' \rangle|^2$  diferente a lo obtenido con el primer arreglo. Lo notable es que el resultado obtenido para la probabilidad de medir  $c'$  depende de que el detector  $\hat{B}$  este o no. O sea el hecho de medir en el medio altera el resultado y esto está dentro del corazón de la mecánica cuántica.

Ya discutiremos con mayor detalle el proceso de medición y el espectro continuo más adelante pero es importante no detenernos ahora para poder tener una idea completa de los postulados.



## 6.6 Evolución temporal del sistema

Ya hemos mencionado que en mecánica cuántica no relativista el tiempo es solamente un parámetro y no tiene asociado un operador como los otros observables. No es lo mismo hablar de tiempo que de posición pues tenemos un operador posición  $\hat{\mathbf{r}}$  pero no un  $\hat{t}$ . Y a pesar de que se habló de conexión entre energía y tiempo esto no es lo mismo que posición e impulso que tienen observables asociados que satisfacen una relación de incerteza. En teoría relativista de campos  $\mathbf{r}$  y  $t$  son ambos parámetros y tenemos un campo cuántico  $\hat{\Psi}(\mathbf{r}, t)$  que depende de ellos.

Cuando estuvimos trabajando con la mecánica ondulatoria hemos introducido esencialmente la ecuación de Schrödinger para una partícula.

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi,$$

donde si el Hamiltoniano no depende explícitamente del tiempo sabemos que nos da la energía del sistema. Ahora, como siempre podemos pensar que esto fue hecho en una representación dada, la de posición, y para una partícula podemos generalizar para un estado abstracto del espacio de Hilbert y el postulado nos dice:

*La evolución temporal de un vector de estado  $|\psi(t)\rangle$  esta determinado por la ecuación de Schrödinger*

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

donde  $\hat{H}(t)$  sería el observable asociado a la energía cuando no tiene dependencia explícita con el tiempo.

Existe una manera de derivar la ecuación de Schrödinger sin pasar por su versión en la mecánica ondulatoria. Recordemos que el operador impulso del sistema y de una partícula lo habíamos encontrado estudiando traslaciones espaciales de la función de onda y este aparecía en el operador  $\hat{U} = 1 - \frac{i}{\hbar} \sum_i \epsilon \cdot \hat{\mathbf{p}}_i$  que generaba la **traslación infinitesimal sobre la función de onda del sistema**. Notemos que

$$\hat{U}\hat{U}^\dagger = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \sum_i \epsilon \cdot \hat{\mathbf{p}}_i\right) \left(1 + \frac{i}{\hbar} \sum_i \epsilon \cdot \hat{\mathbf{p}}_i\right) = 1 + \mathcal{O}(\epsilon^2) \approx 1$$

o sea es unitario.

Supongamos ahora tener un operador unitario (ya veremos porque) que genera una traslación temporal sobre el ket del sistema

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (160)$$

$$\lim_{t \rightarrow t_0} |\psi(t)\rangle = |\psi(t_0)\rangle, \Rightarrow \lim_{t \rightarrow t_0} \hat{U}(t, t_0) = \hat{I} \quad (161)$$

pues el tiempo es un parámetro continuo, y que denominaremos **operador evolución**. Este operador nos dice **cual será el ket del sistema en tiempo  $t$  si lo conocemos en tiempo  $t_0$** .

Este operador debe cumplir ciertos requerimientos. Supongamos que nuestro ket en  $t_0$  es

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_n c_n(t_0) |\lambda_n\rangle,$$

escrito en cierta base de autovectores de un observable  $\hat{L}$ , luego en la misma base pero en tiempo  $t$  se escribirá

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\lambda_n\rangle,$$

donde si bien los coeficientes no serán los mismo debe cumplirse que la probabilidad de medir algún autovalor o de que el sistema esté en algún autoestado (pues el sistema de autovectores es completo y el sistema no puede desaparecer) debe conservarse en el tiempo, y esto debe ser 1 si está normalizado. O sea

$$\sum_n |c_n(t_0)|^2 = \sum_n |c_n(t)|^2 = 1,$$

que es lo mismo que decir que la norma se conserve en el tiempo pues

$$\sum_n |c_n(t)|^2 = \langle \Psi(t) | \psi(t) \rangle$$

y así deberemos tener

$$\langle \Psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = \langle \Psi(t) | \psi(t) \rangle,$$

lo cual a partir de la definición (160) se cumplirá si

$$\hat{U}^\dagger(t, t_0) \hat{U}(t, t_0) = \hat{I},$$

es decir **el operador evolución  $\hat{U}$  es unitario**. Además sería lógico suponer que el operador cumple con la propiedad de composición

$$\hat{U}(t_2, t_0) = \hat{U}(t_2, t_1) \hat{U}(t_1, t_0), \quad t_2 > t_1 > t_0,$$

donde notemos que en cuántica la evolución temporal se lee de derecha a izquierda.

Ahora si consideramos la evolución entre  $t_0, t_0 + \epsilon$  y como ya sabemos que  $\hat{U}(t, t_0)$  varía continuamente con  $t$  se cumplirá para un desplazamiento pequeño haciendo un desarrollo a primer orden alrededor de  $t_0$

$$\hat{U}(t_0 + \epsilon, t_0) = \hat{I} - i\hat{\Omega}\epsilon,$$

donde pediremos que  $\hat{\Omega} = \hat{\Omega}^\dagger$ , es decir sea hermítico (si depende del tiempo lo evaluamos en  $t_0$ ). Puede comprobarse que a primer orden en  $\epsilon$

$$\begin{aligned} \hat{U}(t_0 + \epsilon, t_0)^\dagger \hat{U}(t_0 + \epsilon, t_0) &\approx \hat{I}, \\ \hat{U}(t_0 + \epsilon_1 + \epsilon_2, t_0) &\approx \hat{U}(t_0 + \epsilon_1 + \epsilon_2, t_0 + \epsilon_1) \hat{U}(t_0 + \epsilon_1, t_0). \end{aligned}$$

Finalmente nos falta ver quien es  $\hat{\Omega}$ . Tiene dimensiones de  $1/t$  para que  $\hat{U}$  sea adimensional, o sea de frecuencia. Sabemos por los experimentos del comienzo que la frecuencia en cuántica se relaciona con la energía como  $\omega = \frac{E}{\hbar}$  y también en la mecánica clásica se puede definir un generador de las traslaciones espaciales que es el Hamiltoniano de un sistema. Por lo tanto la elección natural será

$$\hat{\Omega} = \frac{\hat{H}}{\hbar},$$

y de aquí tendremos

$$\hat{U}(t_0 + \epsilon, t_0) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \epsilon. \quad (162)$$

Ahora usando esto tendremos que aplicando las propiedades anteriores y haciendo finalmente  $\epsilon \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \hat{U}(t + \epsilon, t_0) &= \hat{U}(t + \epsilon, t) \hat{U}(t, t_0) = \left( \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \epsilon \right) \hat{U}(t, t_0) \\ \hat{U}(t + \epsilon, t_0) - \hat{U}(t, t_0) &= - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \epsilon \hat{U}(t, t_0) \\ \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\hat{U}(t + \epsilon, t_0) - \hat{U}(t, t_0)}{\epsilon} &= - \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{U}(t, t_0) \\ &\Downarrow \\ i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} &= \hat{H} \hat{U}(t, t_0), \end{aligned} \quad (163)$$

que es la ecuación de Schrödinger para el operador evolución. Finalmente como el estado  $|\psi(t_0)\rangle$  no depende de  $t$  podemos insertarlo y tendremos

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \left( \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \right)}{\partial t} &= \hat{H} \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \\ i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} &= \hat{H} |\psi(t)\rangle, \quad |\psi(t = t_0)\rangle = |\psi(t_0)\rangle \end{aligned}$$

donde tenemos una condición inicial como corresponde a toda ecuación diferencial de primer orden. Si bien no lo hemos puesto explícitamente  $\hat{H}$  puede depender en general del tiempo. Para resolver

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} = \hat{H}(t) \hat{U}(t, t_0), \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I} \quad (164)$$
se

nos pueden presentar tres situaciones

1. El Hamiltoniano no depende explícitamente del tiempo  $\hat{H} \neq \hat{H}(t)$  lo que implica que aunque el parámetro tiempo cambie no lo hace el Hamiltoniano. Por ejemplo cuando el espín interactúa con un campo magnético estacionario. La solución es sencilla y aunque no hemos analizado como evaluar la función de un operador (mediante desarrollo en serie) sería

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)},$$

2. **El Hamiltoniano depende del tiempo pero conmuta con si mismo a tiempos diferentes**  $[\hat{H}(t'), \hat{H}(t)] = 0$ , como por ejemplo el campo magnético donde está el espín cambia de intensidad en el tiempo pero no de dirección. Y obtendremos

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t') dt'}$$

3. **El Hamiltoniano no conmuta con si mismo a tiempos diferentes.** Si el campo magnético cambia también su dirección en el tiempo, como se acopla a las diferentes componentes de  $\hat{\mathbf{S}}$  el Hamiltoniano de interacción no conmutará a diferentes tiempos. La solución formal será la serie

$$\hat{U}(t, t_0) = \hat{I} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{H}(t_1) \hat{H}(t_2) \dots \hat{H}(t_n),$$

que ya verán como se demuestra en cuántica II.

**Durante el presente curso los problemas a tratar estará dentro de la categoría 1.**, pasemos entonces a demostrar que el operador evolución que satisface (164) cuando  $\hat{H} \neq \hat{H}(t)$  es  $\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)}$ . Para esto, como veremos con mas detalle luego, primeramente asumimos que existe un desarrollo en serie

$$e^{\hat{O}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{O}^n}{n!} = \hat{I} + \hat{O} + \hat{O}^2/2! + \dots$$

siendo en este caso  $\hat{O} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)$ . Derivando se obtiene (observen que  $\hat{H}$  no depende del tiempo)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} \hat{H} + \left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}\right)^2 (t-t_0) + \dots = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \left(\hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0) + \dots\right) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{U}(t, t_0) \\ i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t, t_0)}{\partial t} &= \hat{H} \hat{U}(t, t_0), \quad \hat{U}(t_0, t_0) = \hat{I} + 0 + 0^2/2! + \dots = \hat{I}. \end{aligned}$$

Para saber como actua  $\hat{U}(t, t_0 = 0) \equiv \hat{U}(t)$ , donde tomamos  $t_0 = 0$ , sobre  $|\psi(0)\rangle$  **deberíamos conocer como actua sobre los elementos de la base donde lo vamos a expandir.** Esto es particularmente sencillo cuando dicha base corresponde a un COCOOCO **donde  $\hat{H}$  está incluido**, es decir tenemos un conjunto de observables  $\{\hat{H}, \hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots\}$  donde

$$\begin{aligned} [\hat{H}, \hat{A}] &= [\hat{H}, \hat{B}] = [\hat{H}, \hat{C}] = \dots = 0 \\ [\hat{A}, \hat{B}] &= [\hat{A}, \hat{C}] = \dots = [\hat{B}, \hat{C}] = \dots = 0, \end{aligned}$$

y así tendremos una base de autovectores comunes  $\{|E_k, k \equiv a, b, c, \dots\}$  que satisfacen

$$\begin{aligned}
\hat{H} |E_k, k\rangle &= E_k |E_k, k\rangle \\
\hat{A} |E_k, k\rangle &= a |E_k, k\rangle \\
\hat{B} |E_k, k\rangle &= b |E_k, k\rangle \\
&\vdots \\
&\vdots
\end{aligned}$$

y así se puede desarrollar en esa base a  $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$  como (usando la descomposición espectral de  $\hat{H}$ )

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\sum_{\kappa} |\kappa\rangle E_{\kappa} \langle \kappa| t} = \sum_{\kappa} |\kappa\rangle e^{(-\frac{i}{\hbar}E_{\kappa}t)} \langle \kappa|, \quad \kappa \equiv E_k, k.$$

Así actuando sobre  $|\psi(0)\rangle = \sum_{\kappa} c_{\kappa}(0) |\kappa\rangle$  tendremos usando la ortogonalidad de la base

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle &= \left( \sum_{\kappa'} |\kappa'\rangle e^{(-\frac{i}{\hbar}E_{\kappa'}t)} \langle \kappa'| \right) \left( \sum_{\kappa} c_{\kappa}(0) |\kappa\rangle \right) \\
&= \sum_{\kappa} c_{\kappa}(0) e^{(-\frac{i}{\hbar}E_{\kappa}t)} |\kappa\rangle \equiv \sum_{\kappa} c_{\kappa}(t) |\kappa\rangle.
\end{aligned}$$

Notemos que si se da el caso especial  $|\psi(0)\rangle = |\kappa\rangle$  tendremos  $|\psi(t)\rangle = e^{(-\frac{i}{\hbar}E_{\kappa}t)} |\kappa\rangle$ , y como una fase no hace diferencia dicho estado sigue siendo un autoestado del COCOOCO a cualquier tiempo. **En este sentido el conjunto de observables  $\{\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}, \dots\}$  compatibles con  $\hat{H}$ , son constantes de movimiento.** Entonces para resolver la evolución temporal de un estado es fundamental un conjunto de observables que conmuten con  $\hat{H}$ , desarrollar el estado en dicha base y así tendremos los coeficientes del desarrollo para todo tiempo.

Veamos ahora como evolucionan en el tiempo los valores medios de un observable cualquiera  $\hat{O}$  que no necesariamente conmute con  $\hat{H}$ . Supongamos que tenemos un estado  $|\psi(0)\rangle = \sum_{\kappa} c_{\kappa}(0) |\kappa\rangle$ , donde seguimos usando la misma base anterior. Calculemos ahora el valor esperado de  $\hat{O}$  en  $t$

$$\begin{aligned}
\langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle &= \sum_{\kappa'} c_{\kappa'}^*(t) \langle \kappa' | \hat{O} \sum_{\kappa} c_{\kappa}(t) |\kappa\rangle = \sum_{\kappa, \kappa'} c_{\kappa'}^*(t) c_{\kappa}(t) \langle \kappa' | \hat{O} | \kappa \rangle \\
&= \sum_{\kappa, \kappa'} c_{\kappa'}^*(0) c_{\kappa}(0) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_{\kappa} - E_{\kappa'})t} \langle \kappa' | \hat{O} | \kappa \rangle,
\end{aligned}$$

donde notamos que las distintas contribuciones de  $\langle \kappa' | \hat{O} | \kappa \rangle$  oscilan con la frecuencia  $(E_{\kappa} - E_{\kappa'})/\hbar$ . **Si tienes el caso particular donde  $|\psi(0)\rangle = |\kappa\rangle \Rightarrow c_{\kappa'}(0) = \delta_{\kappa'\kappa}$  tendremos**

$$\langle \kappa(t) | \hat{O} | \kappa(t) \rangle = \langle \kappa | \hat{O} | \kappa \rangle = \langle \kappa(0) | \hat{O} | \kappa(0) \rangle,$$

con lo cual vemos que el valor esperado para dicho estado no cambia en el tiempo, por esto se denomina estado estacionario.

**Ejemplo:**

Consideremos para ejemplificar lo visto e un sistema de carga  $q = -e$  y masa  $m$  de espín  $1/2$  inmerso en un campo magnético uniforme y estacionario, con dirección  $Z$ , así el Hamiltoniano de interacción correspondiente será

$$\hat{H} = -\left(\frac{q}{mc}\right)\hat{\mathbf{S}}\cdot\mathbf{B} = -\left(\frac{qB}{mc}\right)\hat{S}_z,$$

es claro que se cumple  $[\hat{H}, \hat{S}_z] = 0$ , y que tendremos una base común de autovectores  $\{|\kappa = \pm\rangle \equiv |E_{\pm} = \pm\frac{eB\hbar}{2mc}, S_z = \pm\frac{\hbar}{2}\rangle\}$ . Si usamos la diferencia en energía entre ambos estados  $\omega = \frac{E_+ - E_-}{\hbar} = \frac{eB}{m\hbar}$  el Hamiltoniano y operador evolución pueden escribirse como

$$\hat{H} = \omega\hat{S}_z, \quad \hat{U}(t) = e^{-i\omega\hat{S}_z t}.$$

Según lo que hemos visto si  $|\psi(0)\rangle = c_+|+\rangle + c_-|-\rangle$  tendremos a un tiempo  $t$

$$|\psi(t)\rangle = c_+e^{-\frac{i\omega t}{2}}|+\rangle + e^{\frac{i\omega t}{2}}c_-|-\rangle,$$

y podemos ver algunos casos especiales:

- $|\psi(0)\rangle = |+\rangle$  : en este caso vemos que  $|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i\omega t}{2}}|+\rangle$  y sigue en todo tiempo siendo una estado con espín up.
- $|\psi(0) = S_x = \frac{\hbar}{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|-\rangle$  que es un autoestado de  $\hat{S}_x$  según hemos visto, y así en un tiempo  $t$  tendremos

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-\frac{i\omega t}{2}}|+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}e^{\frac{i\omega t}{2}}|-\rangle,$$

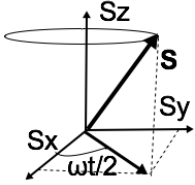
sin embargo  $[\hat{S}_x, \hat{H}] \neq 0$  y entonces no es de esperar que si medimos  $S_x$  en ese tiempo posterior nos dé igual que en tiempo cero, así la probabilidad de obtener  $|S_x = \pm\frac{\hbar}{2}\rangle$  en una medición posterior será

$$\left|\left\langle S_x = \pm\frac{\hbar}{2} \mid \psi(t) \right\rangle\right|^2 = \left|\frac{1}{2}e^{-\frac{i\omega t}{2}} \pm \frac{1}{2}e^{\frac{i\omega t}{2}}\right|^2 = \begin{cases} \cos^2\frac{\omega t}{2} \\ \sin^2\frac{\omega t}{2} \end{cases},$$

o sea que a pesar de que originalmente estabamos en un autoestado  $|\psi(0) = S_x = \frac{\hbar}{2}\rangle$  un tiempo después tenemos probabilidad de medir ambos. Claramente la suma de probabilidades dá 1. **A ésto nos referiamos con reducción del paquete inmediatamente después**, porque como vemos debido a que la interacción puede no conmutar con el observables medido luego el estado podrá ser modificado ya no por una medida sino por la evolución. Más aún si calculamos el valor medio en un tiempo  $t$

$$\langle \hat{S}_x \rangle = \frac{\hbar}{2} \cos^2 \frac{\omega t}{2} - \frac{\hbar}{2} \sin^2 \frac{\omega t}{2} = \frac{\hbar}{2} \cos \omega t,$$

y si lo hicieramos para  $\langle \hat{S}_y \rangle = \frac{\hbar}{2} \sin \omega t$ ,  $\langle \hat{S}_z \rangle = 0$  lo que daría  $\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle = (\frac{\hbar}{2} \cos \omega t, \frac{\hbar}{2} \sin \omega t, 0)$  lo que se interpreta como una precesión.



## 6.7 Construcción de observables

Queremos ver como se construyen los observables. Para los sistemas que tienen un analogo clásico lo hacemos en función de los operadores posición  $\hat{\mathbf{r}}$  e impulso  $\hat{\mathbf{p}}$  en coordenadas cartesianas de las cuales conocemos las relaciones de conmutación

$$\begin{aligned} [\hat{r}_i, \hat{r}_j] &= [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0, i, j = x, y, z \\ [\hat{r}_i, \hat{p}_j] &= i\hbar \delta_{ij}, \end{aligned} \quad (165)$$

aquí  $\mathbf{r}, \mathbf{p}$  juegan el papel de coordenadas generalizadas de la partícula y así  $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{r}} = \mathbf{p}$  que puede coincidir o no con  $m\mathbf{v}$  según el Lagrangiano del sistema.

Ya hemos visto en el caso de la mecánica ondulatoria y en la representación de posición, el Hamiltoniano de una partícula sin spin obtenido a partir de las consideraciones de invariancia es el mismo que obtendríamos del Clásico  $\mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  haciendo la correspondencia  $\mathbf{r}, \mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}$  y esto puede extenderse a casos más generales y otros observables:

*El observable  $\hat{O}$  que describe la magnitud física  $\mathcal{O}(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  se obtiene reemplazando  $\mathbf{r}, \mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}$  y simetrizando los productos que involucran a  $\hat{r}_i \hat{p}_i$  pues estos operadores no conmutan.*

Aclaremos esta definición:

- Normalmente podemos definir la potencia de un operador arbitrario  $\hat{O}^n = \underbrace{\hat{O} \cdot \hat{O} \dots \hat{O}}_n$  como actuando  $n$  veces consecutivas sobre un mismo estado. Además puede definirse el inverso de un operador (si existe) como  $\hat{O}^{-1}$  siendo que cumple  $\hat{O} \hat{O}^{-1} = \hat{O}^{-1} \hat{O} = \hat{I}$ , y con estas definiciones podemos introducir potencias de operadores positivas o negativas. Entonces si nuestro observable clásico es una función  $\mathcal{O}(x)$  que en cierta variable se puede desarrollar como

$$\mathcal{O}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n x^n \Rightarrow \hat{O} = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \hat{x}^n,$$

entonces siendo  $\hat{x}$  cualquiera de los operadores involucrados. Claro podemos tener sólo algún término de la serie como por ejemplo cuando tenemos una partícula libre y

$$\mathcal{H}(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m = \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}/2m \rightarrow \hat{\mathbf{p}}^2/2m,$$

o por ejemplo una serie infinita

$$e^{\hat{O}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{O}^n}{n!} = \hat{I} + \hat{O} + \hat{O}^2/2! + \dots$$

como un operador conmuta con si mismo no hay problemas de orden pero veamos **que pasa cuando aparecen multiplicados operadores que no conmutan.**

- Cuando  $\mathcal{O}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \sim \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}$  debemos tener en cuenta que si bien clásicamente se cumple que  $\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} = \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}$  no cuanticamente  $\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} \neq \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{r}}$  y que además  $(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}})^\dagger = \hat{\mathbf{p}}^\dagger \cdot \hat{\mathbf{r}}^\dagger = \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{r}} \neq \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$  o sea no es hermítico y no puede ser un observable por lo tanto debemos agregar una regla adicional en estos casos; la correspondencia la hacemos como  $\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \rightarrow \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{r}})$  que ahora si es hermítico .

## Ejemplos:

Ya hemos trabajado con Hamiltonianos de la forma  $\mathcal{H}(\mathbf{p}) = \mathbf{p}^2/2m + U(\mathbf{r})$  al que le corresponde el observable  $\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m + U(\hat{\mathbf{r}})$ , aqui no hay que aplicar la simetrización sin embargo por ejemplo en el caso de interacción de una partícula cargada con un campo electromagnético

$$\mathcal{H}(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = (\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}, t))^2/2m + qU(\mathbf{r}),$$

donde  $U, \mathbf{A}$  son los potencial escalar y vector respectivamente, cuando queremos expresar el operador Hamiltoniano debemos tener en cuenta que en general  $[\mathbf{p}, \mathbf{A}] \neq 0$  y por lo tanto se deberá escribir como

$$\hat{H} = \hat{\mathbf{p}}^2/2m - [q\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) + q\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}}]/2m + q^2 A^2(\hat{\mathbf{r}}, t),$$

notemos que en la representación de posición

$$\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t)\psi(\mathbf{r}, t) = -i\hbar\nabla \cdot (\mathbf{A}\psi) = -i\hbar\mathbf{A} \cdot \nabla\psi - i\hbar\psi\nabla \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}\psi,$$

sólo en el gauge de Coulomb donde  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ .

- Existirán sistemas sin analogo clásico y así definiremos los observables sin pasar por la correspondencia.
- Podríamos usar otras coordenadas no cartesianas pero deberíamos encontrar sus relaciones de conmutación y en general las expresiones matemáticas para los observables son más complicadas.



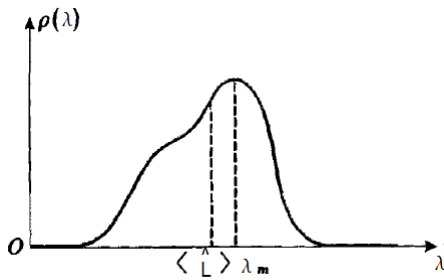
## 6.8 Algunas observaciones

### a) Dispersión media cuadrática:

Aunque el valor medio nos da una idea del orden de magnitud de lo que estamos midiendo, sabemos que habrá una dispersión de los resultados alrededor de él y la magnitud que nos permite cuatificarla es la desviación media cuadrática

$$\Delta \hat{L} = \sqrt{\langle \psi | (\hat{L} - \langle \hat{L} \rangle)^2 | \psi \rangle} = \sqrt{\langle \psi | (\hat{L}^2 - \langle \hat{L} \rangle^2) | \psi \rangle} = \sqrt{\langle \hat{L}^2 \rangle - \langle \hat{L} \rangle^2}, \quad (166)$$

que es la desviación media cuadrática usada en lugar de  $\langle \hat{L} - \langle \hat{L} \rangle \rangle = 0$  que da siempre cero. En la siguiente figura podemos ver como se ve la distribución de probabilidad para un observable de espectro continuo y es importante aclarar que no siempre el máximo de la distribución coincide con el valor medio pues  $\langle \hat{L} \rangle = \int \lambda \rho(\lambda) d\lambda / \int \rho(\lambda) d\lambda$  podriamos decir es el "centro de masa" del área bajo la curva



Asi en este caso del continuo tendremos  $\Delta \hat{L} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 \rho(\lambda) d\lambda - [\int_{-\infty}^{\infty} \lambda \rho(\lambda) d\lambda]^2}{\int \rho(\lambda) d\lambda}$ .

Podemos demostrar que dos observables conjugados  $\hat{q}, \hat{p}$  (desde el punto de vista de que son variables conjugadas) que tienen relación de conmutación  $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$  cumplen la relación

$$\Delta \hat{q} \Delta \hat{p} \geq \hbar/2, \quad (167)$$

o sea nos encontramos con las relaciones de incerteza de Heisenberg. Esto puede demostrarse generando una estado  $|\Phi\rangle = (\hat{q} + i\xi\hat{p})|\psi\rangle$ , usando la relación de conmutación entre  $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ , y calculando su norma que debe ser positiva

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = \langle \hat{q}^2 \rangle - \xi\hbar + \xi^2 \langle \hat{p}^2 \rangle, \geq 0$$

con lo que el discriminante de esta ecuación cuadrática en  $\xi$  debe ser negativo para no tener solución (y que no sea cero la norma) lo que da

$$\langle \hat{q}^2 \rangle \langle \hat{p}^2 \rangle \geq \hbar^2/4$$

con lo que si definimos observables "desplazados"  $\hat{q}' = \hat{q} - \langle \hat{q} \rangle, \hat{p}' = \hat{p} - \langle \hat{p} \rangle$  que cumplen con las mismas reglas de conmutación porque fueron corridos por un valor cte y podríamos volver a demostrar la anterior para ellos cumpliéndose

$$\langle \hat{q}'^2 \rangle \langle \hat{p}'^2 \rangle \geq \hbar^2/4$$

$$\sqrt{\langle (\hat{q} - \langle \hat{q} \rangle)^2 \rangle} \sqrt{\langle (\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle)^2 \rangle} = \Delta \hat{q} \Delta \hat{p} \geq \hbar/2.$$

Finalmente puede demostrarse que el valor mínimo  $\Delta \hat{q} \Delta \hat{p} = \hbar/2$  se realiza en el paquete gaussiano

$$\psi(q) = \frac{1}{[2\pi\Delta\hat{q}^2]^{1/4}} e^{i\langle \hat{p} \rangle q/\hbar} e^{-\left[\frac{q - \langle \hat{q} \rangle}{2\Delta\hat{q}}\right]^2}.$$

## b) Preparación de un estado:

Cuando medimos sobre  $|\psi\rangle$  un observable  $\hat{A}$  cuyo espectro de autovalores es no degenerado (supongamos discreto por simplicidad) al determinar  $a_n$ , inmediatamente el estado despues de la medición que definido como

$$|\psi\rangle' = \frac{c_n}{|c_n|} |u_n\rangle \sim |u_n\rangle$$

y este estado es independiente del estado inicial  $|\psi\rangle$  pues no queda rastro de  $c_n$ . Pero cuando hay degeneración, entonces el estado inmediatamente despues de la medición nos da

$$|\psi\rangle' = \frac{1}{\sqrt{\sum_{i=1}^{g_n} |c_n^i|^2}} \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle,$$

donde ahora como los coeficiente no desaparecen y son determinados por el estado inicial *hay una dependencia con éste*. Por lo tanto no podemos preparar un estado independientemente del estado inicial y *esto no es una descripción completa según los conceptos que hemos introducido al comienzo del curso*. Ahora si agrego otro observable  $\hat{B}$  que conmute con  $\hat{A}$  y que formen un COCOOCO entonces para cada par de valores  $(a_n, b_p)$  que obtengamos al medir a la vez ambos observables *tenemos un único estado*

$$|\psi\rangle' = \frac{c_{np}}{|c_{np}|} |u_{np}\rangle \sim |u_{np}\rangle,$$

después de la medición y tenemos ahora si una descripción completa. *Si no debemos agregar otro observable y así. Concluimos, que para que un estado después de una medición quede completamente definido, esta debe ser realizada sobre un COCOOCO.*

### c) Caso de espectro continuo:

Comencemos estudiando un aparato de medida que trabaja de la siguiente manera:

- Supongamos que sólo puede dar dos respuestas "si" ó "no".
- La respuesta es si cuando el autoestado de un observable  $\hat{O}$  del sistema medido cae dentro de un intervalo  $\Delta$  del eje real y no si cae fuera.

Diríamos que  $\Delta$  es el poder de resolución del aparato, y si existe sólo un autovalor  $\lambda_n$  que cae dentro de  $\Delta$  el poder de resolución podría considerarse infinito pero si hay varios esto no es así. Podríamos entonces hacer la hipótesis, a la luz de la reducción de un paquete de ondas, de que el aparato deja pasar sin distorsión los autoestados del observable que están en ese intervalo o una combinación de ellos y que bloquea los autoestados que no pertenecen al intervalo. El problema con un aparato así es que hay varios estados que conducen a la respuesta "si" y queremos saber cuál es el estado después de la medición cuando entra al aparato un estado arbitrario.

Consideremos el subespacio  $\mathcal{E}_\Delta$  generado por los autoestados de autovalores comprendidos en  $\Delta$  y podemos definir un proyector

$$\hat{P}_\Delta = \sum_{\lambda_n \in \mathcal{E}_\Delta} \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle \langle u_n^i|,$$

que proyecta sobre dicho subespacio. Como cualquier estado puede pensarse como

$$|\psi\rangle = \hat{P}_\Delta |\psi\rangle + (1 - \hat{P}_\Delta) |\psi\rangle,$$

está claro que la primera parte es autovector con autovalor 1 de  $\hat{P}_\Delta$  y corresponde al "si" mientras que la segunda parte es autovector del autovalor cero correspondiendo al "no". Así ahora nuestro observable sería el proyector y podemos aplicar los postulados de medición

$$\mathcal{P}(1) = \langle \psi | \hat{P}_\Delta | \psi \rangle = \sum_{\lambda_n \in \mathcal{E}_\Delta} \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2 \quad (168)$$

además como el 5to postulado supone que el aparato no "modifica" o distorsiona lo que dejó pasar entonces el estado después de la medición será

$$|\psi\rangle' = \frac{1}{\sqrt{\langle \psi | \hat{P}_\Delta | \psi \rangle}} \hat{P}_\Delta |\psi\rangle,$$

que cuando sólo existe un autoestado en el intervalo  $\Delta$  se transforma en  $|\psi\rangle' \sim |u_n\rangle$ .

Ahora vayamos a la medición de un observable con espectro continuo. En este caso solamente aparatos que tienen un poder de resolución  $\Delta$  son los que pueden usarse ya que no sería posible imaginar un aparato que pudiera aislar un valor de un continuo de autovalores. Veamos que forma toma el 5to postulado en este caso.

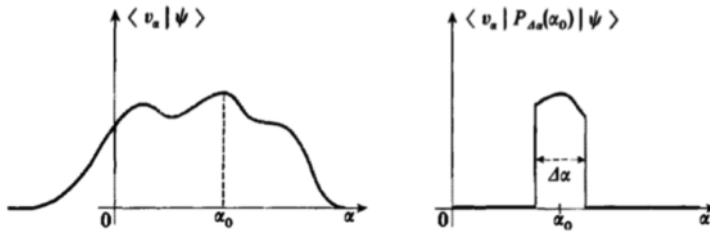
Supongamos un observable  $\hat{O}$  que presenta un espectro continuo, que asumiremos no degenerado por simplicidad entonces :

Si una medida de  $\hat{O}$  sobre un estado  $|\psi\rangle$  conduce a un resultado  $\alpha_0$  dentro de un intervalo  $\Delta_\alpha$  el estado inmediatamente después de la medición será:

$$|\psi'\rangle = \frac{1}{\sqrt{\langle\psi|\hat{P}_{\Delta_\alpha}(\alpha_0)|\psi\rangle}}\hat{P}_{\Delta_\alpha}(\alpha_0)|\psi\rangle,$$

$$\hat{P}_{\Delta_\alpha}(\alpha_0) = \int_{\alpha_0-\frac{\Delta_\alpha}{2}}^{\alpha_0+\frac{\Delta_\alpha}{2}} d\alpha |v_\alpha\rangle\langle v_\alpha| \quad (169)$$

Puede notarse que a pesar de que  $\Delta_\alpha$  sea pequeño nunca se puede preparar el sistema en un estado  $|v_{\alpha_0}\rangle$  porque para ésto deberíamos tener como componentes en la base a  $\langle v_\alpha | v_{\alpha_0}\rangle = \delta(\alpha - \alpha_0)$  sin embargo observaremos la reducción mostrada en la siguiente figura



#### d) Amplitud de correlación y relación de incerteza energía tiempo:

Podríamos buscar una magnitud que caracterice cuanto varía el contenido de un estado  $|\psi(0)\rangle$  en el que evoluciona a partir de él, o sea la magnitud

$$C(t) = \langle\psi(0)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|\hat{U}(t,0)|\psi(0)\rangle, \quad (170)$$

denominada **amplitud de correlación**. Hay casos extremos como por ejemplo cuando  $|\psi(0)\rangle = |E_n\rangle$  donde  $\hat{H}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle$ , es decir un autoestado del Hamiltoniano y en ese caso tendremos  $C(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$  donde  $|C(t)|^2 = 1$ , es decir no se pierde identidad a ningún tiempo.

Supongamos ahora el caso más general de tener una superposición

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n(0) |E_n\rangle,$$

$$C(t) = \sum_n |c_n(0)|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t}$$

$$= e^{-\frac{i}{\hbar}E_0 t} \sum_n |c_n(0)|^2 e^{-\frac{i}{\hbar}(E_n - E_0)t},$$

donde hemos factorizado la contribución del estado de menor energía  $E_0$ . **Notemos que cada contribución oscila con una frecuencia  $\omega = \frac{(E_n - E_0)}{\hbar}$**  y también, es de esperar que después de un tiempo  $t$  sólo subsistiran los que

oscilen lentamente ya que los otros tendran contribuciones positivas y negativas que se cancelaran. O sea los términos que contribuyan a la suma en forma importante serán aquellos donde el seno y coseno de la exponencial casi no cambien de signo, o sea

$$\begin{aligned} \frac{(E_n - E_0)t}{\hbar} &\sim 2\pi \\ \Delta E \Delta t &\sim 2\pi\hbar, \end{aligned}$$

donde hemos definido  $\Delta E = E_n - E_0$ ,  $\Delta t = t - 0$ , o sea contribuirán los estados dentro de un intervalo de energía y tiempo que cumplan con dicha *relación de incerteza*, que sin embargo no tiene la misma interpretación que la de incerteza entre observables conjugados no compatibles  $\Delta\hat{q}\Delta\hat{p} \geq \hbar/2$ , pues ya hemos dicho que el tiempo no es un observable en mecánica cuántica no relativista.

### Ejemplo:

Recordemos la precesión del espín estudiada antes donde  $|\psi(0)\rangle = |S_x = \pm\frac{\hbar}{2}\rangle$ , y después de un tiempo  $t$

$$|C(t)|^2 = \left| \left\langle S_x = \pm\frac{\hbar}{2} \mid \psi(t) \right\rangle \right|^2 = \left| \frac{1}{2}e^{-\frac{i\omega t}{2}} \pm \frac{1}{2}e^{-\frac{i\omega t}{2}} \right|^2 = \begin{cases} \cos^2\frac{\omega t}{2} \\ \sen^2\frac{\omega t}{2} \end{cases},$$

donde  $\omega = \frac{E_+ - E_-}{\hbar}$  y vemos que en estado inicial pierde su identidad en  $\omega t = \pi$ , que cumple la relación.