

## 6.9 Esquemas de Schrödinger y Heisenberg

Hemos estudiado los operadores unitarios en el contexto de los cambios de base o representación, donde en dichos cambios de representación el ket del sistema no cambia, solamente lo hacen los coeficientes del desarrollo en una dada representación a otra y por supuesto la base. También, cuando hemos introducido la translación de un estado y en la evolución temporal de un estado ( ya veremos en el próximo capítulo en general el papel de los operadores unitarios y las transformaciones). Lo que hacíamos era decir que el estado del sistema  $|\psi\rangle$  sufría por ejemplo *una translación espacial como un todo o una translación temporal* por la cual

$$|\psi\rangle \rightarrow \hat{U} |\psi\rangle,$$

y ahora  $\hat{U} |\psi\rangle$  corresponde al estado que ha sufrido la transformación. Es importante notar que como  $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$  los productos internos entre estados antes y después se mantienen iguales, es decir

$$(|\psi\rangle, |\phi\rangle) = \langle\psi | \phi\rangle = \langle\psi | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \phi\rangle = (\hat{U} |\psi\rangle, \hat{U} |\phi\rangle).$$

Podríamos *adoptar otro punto de vista*, y usando la propiedad de asociación

$$(\langle\psi | \hat{U}^\dagger) \hat{O} (\hat{U} |\phi\rangle) = \langle\psi | (\hat{U}^\dagger \hat{O} \hat{U}) |\phi\rangle,$$

pensar que los que *se transforman son los observables* y que

$$\hat{O} \rightarrow \hat{U}^\dagger \hat{O} \hat{U},$$

*dejando invariantes los kets*. Ya veremos en el próximo capítulo que significa ésto físicamente, pero veamos un ejemplo

### Ejemplo:

Tomemos el operador translación para una partícula que ya estudiábamos antes para las funciones de onda  $\hat{U}(\epsilon) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{p}} \cdot \epsilon$  y tomemos  $\hat{O} = \hat{\mathbf{r}}$  (el sombrero no indica versor), entonces usando la relación de conmutación  $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$  tendremos a orden  $\epsilon$

$$\begin{aligned} \hat{U}(\epsilon)^\dagger \hat{\mathbf{r}} \hat{U}(\epsilon) &= \left( \hat{I} + \frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{p}} \cdot \epsilon \right) \hat{\mathbf{r}} \left( \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{p}} \cdot \epsilon \right) \\ &\simeq \hat{\mathbf{r}} + \frac{i}{\hbar} [\hat{\mathbf{p}} \cdot \epsilon, \hat{\mathbf{r}}] = \hat{\mathbf{r}} + \epsilon_i (\delta_{ix}, \delta_{iy}, \delta_{iz}) = \hat{\mathbf{r}} + \epsilon, \end{aligned}$$

*en conexión con el proceso de medida* se tiene  $\langle \hat{\mathbf{r}} \rangle \rightarrow \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle + \langle \epsilon \rangle = \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle + \epsilon$ . Notemos que si hubiéramos cambiado los estados  $|\psi\rangle \rightarrow \left( \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{p}} \cdot \epsilon \right) |\psi\rangle$  tendríamos en la representación de posición

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \psi \rangle &\rightarrow \langle \mathbf{r} | \left( \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \hat{\mathbf{p}} \cdot \boldsymbol{\epsilon} = \hat{I} - \nabla \cdot \boldsymbol{\epsilon} \right) | \psi \rangle \approx \langle \mathbf{r} - \boldsymbol{\epsilon} | \psi \rangle \text{ pues } \langle \mathbf{r} | \hat{I} - \nabla \cdot \boldsymbol{\epsilon} | \psi \rangle = (\mathbf{1} - \nabla \cdot \boldsymbol{\epsilon}) \psi(\mathbf{r}) \approx \psi(\mathbf{r} - \boldsymbol{\epsilon}) \\ \psi(\mathbf{r}) &\rightarrow \psi(\mathbf{r} - \boldsymbol{\epsilon}) \\ \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle &= \int d^3 r \psi(\mathbf{r})^* \mathbf{r} \psi(\mathbf{r}) \rightarrow \int d^3 r \psi(\mathbf{r} - \boldsymbol{\epsilon})^* \mathbf{r} \psi(\mathbf{r} - \boldsymbol{\epsilon}) \stackrel{\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \boldsymbol{\epsilon}}{=} \langle \mathbf{r} \rangle + \boldsymbol{\epsilon}, \end{aligned}$$

o sea *da lo mismo que transformar los estados*.

En mecánica clásica no tenemos kets pero sí hemos hablado de transformaciones que cambian las magnitudes físicas  $\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{L}$ , etc, que tienen asociados observables en mecánica cuántica, por esta razón *la transformación de observables es quien tendrá la conexión con la mecánica clásica*. Resumiendo tenemos dos esquemas

- Esquema 1

$$|\psi\rangle \rightarrow \hat{U} |\psi\rangle, \hat{O} \text{ no cambia,}$$

- Esquema 2

$$\hat{O} \rightarrow \hat{U}^\dagger \hat{O} \hat{U}, |\psi\rangle \text{ no cambia.}$$

Ahora volvamos a la evolución temporal. Cuando la estudiamos hemos seguido el *esquema de Schrödinger donde los estados evolucionan con el tiempo pero no los observables*.

Ahora veremos *el esquema de Heisenberg donde cambian los observables y quedan fijos los kets*. Definamos ahora un observable en el esquema de Heisenberg como

$$\hat{O}^H(t) = \hat{U}(t, 0)^\dagger \hat{O}^S \hat{U}(t, 0), \quad (171)$$

siendo  $\hat{U}(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t}$  es el operador evolución entre  $t_0 = 0$  y  $t$ . Notemos que los operadores en ambos esquemas coinciden a  $t = 0$  o sea

$$\hat{O}^H(0) = \hat{O}^S,$$

y que los autoestados en el esquema de Heisenberg, los cuales no varían en el tiempo quedan definidos como

$$|\psi(t)\rangle_H = |\psi(0)\rangle_H = |\psi(0)\rangle_S.$$

Tratándose de que la conexión se hace mediante un operador unitario (el operador evolución) ya sabemos que los valores esperados deben coincidir

$$\langle \psi(t) | \hat{O}^S | \psi(t) \rangle_S = \langle \psi(0) | \hat{U}^\dagger(t) \hat{O}^S \hat{U}(t) | \psi(0) \rangle_S = \langle \psi | \hat{O}^H(t) | \psi \rangle_H,$$

donde al ket en el esquema de Heisenberg no le ponemos el tiempo porque es redundante.

Ahora no tendremos una ecuación de Schrödinger para los estados  $|\psi\rangle_H$  pues no dependen del tiempo y tendremos una ecuación para la evolución temporal de  $\hat{O}^H(t)$ . Tomemos la derivada considerando que  $\hat{O}^S$  no depende explícitamente del tiempo, como en todas las aplicaciones que veremos en el curso, y que en general el operador evolución satisface

$$i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} = \hat{H} \hat{U}(t), \hat{U}(t, 0) \equiv \hat{U}(t),$$

tendremos

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{O}^H(t)}{dt} &= \frac{d\hat{U}(t)^\dagger \hat{O}^S \hat{U}(t)}{dt} = \frac{d\hat{U}(t)^\dagger}{dt} \hat{O}^S \hat{U}(t) + \hat{U}(t)^\dagger \hat{O}^S \frac{d\hat{U}(t)}{dt} \\ &= \frac{\partial \hat{U}(t)^\dagger}{\partial t} \hat{O}^S \hat{U}(t) + \hat{U}(t)^\dagger \hat{O}^S \frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} \\ &= \frac{-1}{i\hbar} \hat{U}(t)^\dagger \hat{H} \overbrace{\hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t)}^{\hat{I}} \hat{O}^S \hat{U}(t) + \frac{1}{i\hbar} \overbrace{\hat{U}(t)^\dagger \hat{O}^S \hat{U}(t)}^{\hat{O}^H(t)} \hat{U}^\dagger(t) \hat{H} \hat{U}(t) \\ &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{O}^H(t), \hat{U}^\dagger(t) \hat{H} \hat{U}(t)], \end{aligned}$$

donde primeramente pasamos a la derivada parcial en el tiempo pues no hay dependencia explícita con la posición en  $\hat{U}$ , luego tenemos en cuenta que  $\hat{H} \equiv \hat{H}^S$  y que así  $\hat{H}^H(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{H} \hat{U}(t)$ . Sin embargo ya que hemos asumido para el curso que  $\hat{H}$  no depende explícitamente del tiempo y que así es  $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}$ , el cual conmuta con  $\hat{H}$  y así

$$\hat{H}^H(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{H} \hat{U}(t) = \hat{H}^S = \hat{H}$$

tendremos

$$\frac{d\hat{O}^H(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{O}^H(t), \hat{H}], \quad (172)$$

*llamada ecuación de movimiento de Heisenberg.*

## Comparación con mecánica clásica:

Sería instructivo comparar la ecuación de Heisenberg con su similar clásica. Antes de seguir recordemos las relaciones de conmutación entre las componentes del operador posición y el operador impulso, que siguen siendo válidas en el esquema de Heisenberg si las calculamos *a un mismo tiempo* ( $\hat{O}^H(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{O}^S \hat{U}(t)$ )

$$[\hat{x}_i^H(t), \hat{p}_j^H(t)] = [\hat{U}^\dagger(t)\hat{x}_i U(t), \hat{U}^\dagger(t)\hat{p}_j \hat{U}(t)] \quad (173)$$

$$= \hat{U}^\dagger(t)\hat{x}_i U(t) \hat{U}^\dagger(t) \hat{p}_j \hat{U}(t) - \hat{U}^\dagger(t)\hat{p}_j U(t) \hat{U}^\dagger(t) \hat{x}_i \hat{U}(t) i\hbar\delta_{ij} \quad (174)$$

$$= \hat{U}^\dagger(t) [\hat{x}_i, \hat{p}_j] \hat{U}(t) = i\hbar\delta_{ij}, \quad (175)$$

$$[\hat{x}_i^H(t), \hat{p}_j^H(t)] = i\hbar\delta_{ij}, \quad (176)$$

llamadas por Dirac "condiciones cuánticas fundamentales" y normalmente conocidas como *relaciones canónicas de conmutación*.

De hecho fue Dirac quien propuso en 1925 una correspondencia entre el corchete de Poisson clásico y conmutadores cuánticos como

$$[,]_{\text{clásico}} \rightarrow \frac{[,] }{i\hbar}, \quad (177)$$

donde hemos introducido los Corchetes de Poisson

$$\begin{aligned} [\mathcal{A}(q_i, p_i), \mathcal{B}(q_j, p_j)]_{\text{clásico}} &= \sum_k \left( \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial q_k} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial p_k} - \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial p_k} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial q_k} \right) \\ &= -[\mathcal{B}(q_j, p_j), \mathcal{A}(q_i, p_i)]_{\text{clásico}}. \end{aligned} \quad (178)$$

por ejemplo para el caso especial  $\mathcal{A} = q_i = x_i$ ,  $\mathcal{B} = p_j (-i\hbar\partial/\partial x_j)$  (omitimos H de Heisenberg en los observables cuánticos) tendríamos

$$\begin{aligned} [x_i, p_j]_{\text{clásico}} &= \sum_k \left( \frac{\partial x_i}{\partial x_k} \frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial x_i}{\partial p_k} \frac{\partial p_j}{\partial x_k} \right) = \delta_{ij} \\ \text{Dirac} \longrightarrow [\hat{x}_i, \hat{p}_j] &= i\hbar\delta_{ij}. \end{aligned}$$

Esta correspondencia es posible porque *los corchetes de Poisson y los conmutadores satisfacen las mismas propiedades algebraicas*. Sin embargo debemos tener en cuenta que:

- las dimensiones de los corchetes no es la misma que los conmutadores pues involucran derivadas.
- Además los corchetes entre cantidades reales son siempre reales mientras que los conmutadores pueden dar cosas imaginarias, es decir  $[,]_{\text{clásico}}^* = [,]_{\text{clásico}}$  pero por ejemplo  $[\hat{x}_i, \hat{p}_j]^* = -i\hbar\delta_{ij}$ ,  $i^* = -1$ .
- La correspondencia propuesta por Dirac resulta ser útil cuando nuestros observables dependen de las coordenadas generalizadas. Pero no cuando tenemos observables que no tienen un contraparte clásica como por ejemplo el espín. De hecho nosotros pudimos antes deducir las relaciones de conmutación entre posición e impulso a partir del operador de traslación que permitió definir el impulso. También para definir los conmutadores de observables como el espín podemos usar dicho camino cuando definamos el generador de rotaciones espaciales.

Entonces si ahora aplicamos la prescripción (177) a la ecuación clásica

$$\frac{d\mathcal{O}(q_k, p_k)}{dt} = [\mathcal{O}(q_k, p_k), \mathcal{H}(q_k, p_k)]_{\text{clásico}},$$

obtendremos la ecuación de Heisenberg (172) para los observables cuánticos correspondientes **que tienen una contraparte clásica**. Sin embargo la ecuación de Heisenberg es más general pues se puede aplicar por ejemplo al espín que no tiene una contraparte clásica y así

$$\frac{d\hat{S}_i^H(t)}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{S}_i^H(t), \hat{H}],$$

y podríamos con esto estudiar la precesión que antes analizamos en el esquema de Schrödinger. Pero veremos un ejemplo más clásico.

### Ejemplo:

Consideremos una partícula libre cuyo Hamiltoniano es

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m},$$

donde  $\hat{\mathbf{p}}^H \equiv \hat{\mathbf{p}}(t)$ , como  $[\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}(t)] = 0$  (las relaciones de conmutación no dependen del esquema) entonces  $\frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] = 0 \Rightarrow \hat{\mathbf{p}}(t) = \hat{\mathbf{p}}(0)$  o sea es una constante de movimiento. Veamos ahora como evoluciona  $\hat{\mathbf{r}}^H \equiv \hat{\mathbf{r}}(t)$ ,

$$\frac{d\hat{x}_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}_i, \hat{H}],$$

si trabajamos en la representación de posición y recordando que el conmutador se puede calcular en la representación de S pues dá lo mismo

$$\begin{aligned} [\hat{x}_i, \hat{\mathbf{p}}^2] \psi(\mathbf{r}) &= x_i (i\hbar)^2 \sum_j \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \psi(\mathbf{r}) - (i\hbar)^2 \sum_j \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} x_i \psi(\mathbf{r}) \\ &= x_i (i\hbar)^2 \sum_j \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \psi(\mathbf{r}) - (i\hbar)^2 \sum_j \frac{\partial}{\partial x_j} (\delta_{ij} \psi(\mathbf{r}) + x_i \frac{\partial}{\partial x_j} \psi(\mathbf{r})) \\ &= \cancel{x_i (i\hbar)^2 \sum_j \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \psi(\mathbf{r})} - \cancel{(i\hbar)^2 \sum_j \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} x_i \psi(\mathbf{r})} - 2(i\hbar)^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(\mathbf{r}) \\ &= 2(i\hbar) \hat{p}_i \psi(\mathbf{r}), \end{aligned}$$

y así

$$\frac{d\hat{x}_i}{dt} = \frac{\hat{p}_i}{m} = \frac{\hat{p}_i(0)}{m} \Rightarrow \hat{x}_i(t) = \hat{x}_i(0) + \frac{\hat{p}_i(0)}{m}t,$$

que nos recuerda a la ecuación del MRU.

Notemos que  $[\hat{x}_i(t), \hat{x}_i(0)] = \frac{t}{m} [\hat{p}_i(0), \hat{x}_i(0)] = -i\hbar \frac{t}{m}$  o sea que sólo conmutan a  $t = 0$ . Esto tendrá la consecuencia de que **aunque la partícula este localizada en  $t = 0$  no lo estará en  $t$** , recordemos que un paquete de ondas se iba ensanchando.

Fialmente supongamos tener un Hamiltoniano con un potencial

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}),$$

si ahora calculamos la evolución temporal de  $\hat{\mathbf{p}}(t)$  y  $\hat{\mathbf{r}}(t)$  obtendriamos (trabajando como antes)

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} &= -\nabla V(\hat{\mathbf{r}}) \\ \frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}, \end{aligned}$$

y si ahora vemos la evolución de  $\frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt}$  usando la ecuación de Heisenberg de nuevo obtendriamos finalmente

$$m \frac{d^2 \hat{\mathbf{r}}(t)}{d^2 t} = -\nabla V(\hat{\mathbf{r}}),$$

analogamente a la segunda ley de Newton. Como los kets no dependen del tiempo en la representación de Heisenberg entonces

$$\begin{aligned} \langle \psi | m \frac{d^2 \hat{\mathbf{r}}(t)}{d^2 t} | \psi \rangle &= -\langle \psi | \nabla V(\hat{\mathbf{r}}) | \psi \rangle \\ m \frac{d^2 \langle \psi | \hat{\mathbf{r}}(t) | \psi \rangle}{d^2 t} &= -\langle \psi | \nabla V(\hat{\mathbf{r}}) | \psi \rangle \\ m \frac{d^2 \langle \hat{\mathbf{r}}(t) \rangle}{d^2 t} &= -\langle \nabla V(\hat{\mathbf{r}}) \rangle, \end{aligned}$$

denominado teorema de Ehrenferst. **Es finalmente independiente del esquema usado (Scrödinger o Heisenberg) ya que como sabemos los valores esperados no cambian al cambiar de esquema.**

## Cuantificación canónica

Podemos generalizar lo discutido previamente y elevarlo quizás al nivel de un postulado que suele llamarse de cuantificación canónica. Si tenemos un sistema que estudiamos en el esquema de Heisenberg (omitimos la H) y tiene un análogo clásico

- Los operadores  $\hat{q}_i, \hat{p}_i$  que corresponden a las coordenadas generalizadas del sistema según (177) y (178) deben cumplir

$$[q_i, p_j]_{\text{clásico}} = \sum_k \left( \frac{\partial q_i}{\partial q_k} \frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial q_i}{\partial p_k} \frac{\partial p_j}{\partial x_k} \right) = \delta_{ij}$$

$$[\hat{q}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}, \quad [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = [\hat{p}_i, \hat{p}_j] = 0.$$

- Todo observable que tenga un análogo clásico  $\mathcal{O}(q = q_1, \dots, p_1, \dots)$  se construye como  $\hat{O}(\hat{q}, \hat{p})$ .

Luego usando las reglas de conmutación de las coordenadas e impulso se pueden inferir las necesarias cuando interviene  $\hat{O}$ .

### Ejemplo:

Consideremos una partícula en un campo electromagnético cuyo Hamiltoniano clásico es (en cartesianas como coordenadas generalizadas)

$$\mathcal{H} = \mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{r}} - \mathcal{L} = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right)^2 + q\phi(\mathbf{r}, t)$$

$$\mathbf{p} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}} = m\dot{\mathbf{r}} + \frac{q}{c} \mathbf{A},$$

ahora el Hamiltoniano cuántico será

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) \right)^2 + q\phi(\hat{\mathbf{r}}, t) = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{q}{2mc} (\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) + \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}}) + \frac{1}{2m} \left( \frac{q}{c} \right)^2 \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t)^2 + q\phi(\hat{\mathbf{r}}, t).$$

Por ejemplo *si*  $\mathbf{B} = (0, 0, B) = \mathbf{cte} = \nabla \times \mathbf{A}$  entonces  $\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r})$  y notar que si  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$  entonces para este caso

$$\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}\psi(\mathbf{r}) = -i\hbar\nabla \cdot \frac{1}{2}(\mathbf{B} \times \mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = -i\hbar B \frac{1}{2}(-y, x, 0) \cdot \nabla\psi(\mathbf{r})$$

$$\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}}\psi(\mathbf{r}) = -i\hbar B \frac{1}{2}(-y, x, 0) \cdot \nabla\psi(\mathbf{r}),$$

finalmente notemos

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + i\hbar\frac{q}{m}B(-y, x, 0) \cdot \nabla + \frac{1}{2m} \left( \frac{q}{c} \right)^2 (x^2 + y^2) + q\phi(\hat{\mathbf{r}}, t),$$

y que en general  $[\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t), \hat{H}] = 0$  y no  $[\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}] = 0$  en presencia de un campo electromagnético cuando el potencial escalar es uniforme ( $\phi(\mathbf{r}, t) = \phi(t)$  tendremos invariancia frente a traslaciones) pues

$$\left[ \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t), \hat{H} \right] \psi(\mathbf{r}) = \left[ \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t), \phi(t) \right] \psi(\mathbf{r}) \sim \psi(\mathbf{r})\hat{\mathbf{p}}\phi(t) = \psi(\mathbf{r})(-i)\nabla\phi(t) = 0.$$