

CURSO DE MÉTODOS DE LA FÍSICA MATEMÁTICA AXIOMAS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

1. MECÁNICA LAGRANGIANA

La *acción* de un sistema clásico descrito por las coordenadas $q_k, k = 1, 2, \dots, N$ está dada por la integral

$$(1.1) \quad S[q(\cdot)] = \int_{t_1}^{t_2} L(q_k, \dot{q}_k; t) dt,$$

donde el Lagrangiano $L(q_k, \dot{q}_k; t)$ es una función de las coordenadas (generalizadas), sus derivadas respecto del tiempo y, eventualmente, del tiempo.

Las ecuaciones clásicas de movimiento se deducen del principio de Hamilton (acción extrema): para variaciones arbitrarias de soporte compacto contenido en el intervalo (t_1, t_2) (con $\delta q_k(t_{1,2}) = 0$) se impone que

$$(1.2) \quad \delta S[q(\cdot)] = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = 0,$$

que son las ecuaciones de Euler-Lagrange del sistema. En particular, $p_k := \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}$ es el *momento conjugado* de la coordenada q_k .

2. FORMULACIÓN HAMILTONIANA

Mediante una transformación de Legendre, que elimina la velocidad \dot{q}_k en favor del momento p_k , se define el Hamiltoniano del sistema por

$$(2.1) \quad H(p, q) := p_k \dot{q}_k(p, q) - L(q_k, \dot{q}_k; t),$$

donde se supone que es posible despejar las velocidades en términos de coordenadas y momentos.

Para la diferencial de H tenemos

$$(2.2) \quad \begin{aligned} dH &= dp_k \dot{q}_k + p_k d\dot{q}_k - \left\{ \frac{\partial L}{\partial q_k} dq_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} d\dot{q}_k + \frac{\partial L}{\partial t} dt \right\} = \\ &= \dot{q}_k dp_k - \frac{\partial L}{\partial q_k} dq_k - \frac{\partial L}{\partial t} dt, \end{aligned}$$

lo que muestra que, efectivamente, sus variables independientes son p_k y q_k , con $k = 1, 2, \dots, N$, aparte de su eventual dependencia en el tiempo. De allí resulta

$$(2.3) \quad \frac{\partial H}{\partial p_k} = \dot{q}_k(p, q), \quad \frac{\partial H}{\partial q_k} = -\frac{\partial L}{\partial q_k}(q, \dot{q}(p, q))$$

que, *sobre las trayectorias clásicas* (1.2), se reducen a las *ecuaciones de Hamilton*,

$$(2.4) \quad \frac{\partial H}{\partial p_k} = \dot{q}_k, \quad \frac{\partial H}{\partial q_k} = -\dot{p}_k.$$

Actualizado el 21 de junio de 2022.

Se trata de un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden que tiene solución única una vez especificados (por ejemplo) los valores iniciales de coordenadas y momentos. En ese sentido, el estado del sistema clásico queda unívocamente determinado por esos valores iniciales.

En términos del Hamiltoniano, la acción puede escribirse como funcional de dos argumentos,

$$(2.5) \quad S[p(\cdot), q(\cdot)] = \int_{t_1}^{t_2} \{p_k \dot{q}_k - H(p, q; t)\} dt,$$

donde \dot{q}_k es la derivada de la función $q_k(t)$ respecto del parámetro de integración. A partir de ella, las ecuaciones de Hamilton (2.4) se deducen del principio de acción extrema frente a variaciones independientes (y de soporte compacto en (t_1, t_2)) de coordenadas y momentos,

$$(2.6) \quad \delta S[p(\cdot), q(\cdot)] = 0,$$

como puede verificarse fácilmente.

Esta formulación es invariante frente a *transformaciones canónicas*, $(p, q) \rightarrow (P, Q)$, donde las nuevas coordenadas y momentos son funciones de las anteriores que satisfacen que

$$(2.7) \quad H'(P, Q) - P_k \dot{Q}_k = H(p, q) - p_k \dot{q}_k + \frac{dF}{dt},$$

donde $H'(P(p, q), Q(p, q)) = H(p, q)$, y $\frac{dF}{dt}$ es una derivada total de una función de un conjunto de $2N$ de esas variables (función generatriz de la transformación canónica), que evidentemente no contribuye a las ecuaciones de movimiento, las que entonces mantienen su forma.

3. CORCHETES DE POISSON

Se define el Corchete de Poisson de dos magnitudes representadas por sendas funciones de coordenadas y momentos, $f(p, q)$ y $g(p, q)$, por la forma bilineal y antisimétrica

$$(3.1) \quad \{f, g\} := \sum_{k=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial p_k} \frac{\partial g}{\partial q_k} - \frac{\partial f}{\partial q_k} \frac{\partial g}{\partial p_k} \right).$$

En particular,

$$(3.2) \quad \{p_i, q_j\} = \delta_{ij}, \quad \{p_i, p_j\} = 0, \quad \{q_i, q_j\} = 0.$$

Se demuestra que el resultado de evaluar el corchete de Poisson de dos magnitudes es independiente del conjunto de coordenadas canónicas que se emplee,

$$(3.3) \quad \{f, g\}_{(P, Q)} = \{f, g\}_{(p, q)}.$$

Es decir, independientemente del conjunto de coordenadas canónicas respecto de las cuales se expresen las funciones f y g , su corchete de Poisson representa a la misma magnitud física (aunque resulte expresada en términos de distintas variables). En particular

$$(3.4) \quad \{P_i, Q_j\}_{(p, q)} = \delta_{ij}, \quad \{P_i, P_j\}_{(p, q)} = 0, \quad \{Q_i, Q_j\}_{(p, q)} = 0.$$

Las ecuaciones Hamiltonianas (2.4) pueden expresarse en términos de corchetes de Poisson como

$$(3.5) \quad \dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k} = \{H, q_k\}, \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k} = \{H, p_k\}.$$

Y, para la evolución de cierta magnitud $M(p, q, t)$ sobre las trayectorias clásicas, tenemos

$$(3.6) \quad \begin{aligned} \frac{dM}{dt} &= \sum_{k=1}^N \left(\frac{\partial M}{\partial p_k} \dot{p}_k + \frac{\partial M}{\partial q_k} \dot{q}_k \right) + \frac{\partial M}{\partial t} = \\ &= \sum_{k=1}^N \left(-\frac{\partial M}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} + \frac{\partial M}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} \right) + \frac{\partial M}{\partial t} = \{H, M\} + \frac{\partial M}{\partial t}, \end{aligned}$$

donde el miembro de la derecha ha de evaluarse sobre las soluciones de las ecuaciones (3.5).

4. AXIOMAS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

A nivel cuántico, el principio de incerteza de Heisenberg establece que no es posible fijar simultáneamente los valores de las coordenadas y de sus momentos canónicos conjugados. Entonces, el estado de un sistema cuántico no puede ser especificado a partir de los valores iniciales de las variables canónicas.

Esa imposibilidad implica que coordenadas y momentos no son simplemente variables que toman valores reales que estén simultáneamente especificados en un dado estado del sistema. Más generalmente, debemos admitir que existan diferentes magnitudes físicas que, aún teniendo una definición precisa en la teoría cuántica, no adopten simultáneamente valores definidos en un determinado estado del sistema cuántico.

Por ello se *postula* que, en la teoría cuántica, las magnitudes físicas están representadas por operadores autoadjuntos (*observables*) definidos sobre un espacio de Hilbert \mathcal{H} , que el estado del sistema está especificado por un vector de ese espacio, y que el resultado de una medida *individual* de una magnitud M sólo puede tomar el valor de alguno de los *autovalores* del correspondiente operador¹,

$$(4.1) \quad \begin{aligned} M(p, q) &\rightarrow \hat{M} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}, \\ \hat{M}|\mu\rangle &= \mu|\mu\rangle, \quad \text{con } \mu \in \sigma(\hat{M}) \subset \mathbb{R}, \quad |\mu\rangle \in \mathcal{H}. \end{aligned}$$

Dado que todo operador autoadjunto tiene un *sistema ortogonal y completo de autovectores*, el vector de estado $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ es el *límite* de un desarrollo de la forma

$$(4.2) \quad |\psi\rangle = \sum_{\mu \in \sigma(\hat{M})} c_\mu |\mu\rangle, \quad \text{donde } c_\mu = \langle \mu | \psi \rangle$$

(con los autovectores convenientemente normalizados).

Se postula que la *probabilidad* de que al medir la magnitud M cuando el sistema se encuentra en el estado $|\psi\rangle$ se obtenga el valor $\mu \in \sigma(\hat{M})$ está dada por $|c_\mu|^2 =$

¹Recordemos que el espectro de un operador autoadjunto, unión de su espectro puntual y su espectro continuo, está contenido en la recta real.

$|\langle \mu | \psi \rangle|^2$, de modo que el valor medio de un gran número de medidas de M en el estado $|\psi\rangle$ está dado por

$$(4.3) \quad \langle M \rangle = \sum_{\mu \in \sigma(\hat{M})} \mu |c_\mu|^2 = \langle \psi | \left\{ \sum_{\mu \in \sigma(\hat{M})} |\mu\rangle \mu \langle \mu| \right\} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{M} | \psi \rangle.$$

Naturalmente, esta interpretación probabilística impone que $|\psi\rangle$ sea un *vector unitario*,

$$(4.4) \quad \langle \psi | \psi \rangle = \sum_{\mu \in \sigma(\hat{M})} |c_\mu|^2 = 1.$$

Entonces, para que una magnitud física M tenga un valor definido μ , el estado del sistema debe estar representado por un autovector del operador \hat{M} correspondiente a ese autovalor (definido a menos de una fase). Pero, en esas condiciones, la medición de una segunda magnitud N representada por un operador \hat{N} que no conmuta con \hat{M} no resultará en un valor determinado, sino que coincidirá con alguno de los autovalores de \hat{N} con probabilidad $|\langle \nu | \mu \rangle|^2$, donde $|\nu\rangle$ es un autovector (normalizado) de \hat{N} correspondiente al autovalor ν . Su valor medio estará dado por

$$(4.5) \quad \langle N \rangle = \langle \mu | \hat{N} | \mu \rangle = \sum_{\nu \in \sigma(\hat{N})} \langle \mu | \nu \rangle \nu \langle \nu | \mu \rangle = \sum_{\nu \in \sigma(\hat{N})} \nu |\langle \nu | \mu \rangle|^2.$$

Dado un vector unitario $|\chi\rangle \in \mathcal{H}$, podemos definir el *operador de proyección*² $\hat{P}_\chi := |\chi\rangle \langle \chi|$ ($= \hat{P}_\chi^\dagger$), e interpretar a su valor medio en el estado $|\psi\rangle$ como la probabilidad de encontrar al sistema en el estado $|\chi\rangle$ (o *probabilidad de transición*³ de $|\psi\rangle$ a $|\chi\rangle$),

$$(4.6) \quad \langle P_\chi \rangle = \langle \psi | \hat{P}_\chi | \psi \rangle = |\langle \chi | \psi \rangle|^2,$$

donde $\langle \chi | \psi \rangle$ es la *amplitud de probabilidad de transición*.

Por otra parte, el corchete de Poisson de dos magnitudes (forma bilineal y antisimétrica) da por resultado una tercera magnitud que, por lo que hemos visto, está unívocamente determinada. Por consistencia, los correspondientes operadores deben satisfacer una relación similar. La operación de conmutación nos provee de una forma bilineal y antisimétrica sobre operadores. Para hacer coincidir las dimensiones del operador resultante, debemos dividir el conmutador por una constante \hbar con unidades de momento angular: $[p][q] = \text{masa} \times \text{longitud}^2 / \text{tiempo}$. Y para que de esa operación resulte un operador hermítico debemos además multiplicar al conmutador por la unidad imaginaria i .

En consecuencia, si a nivel clásico tenemos $\{f, g\} = h$, y

$$(4.7) \quad f \rightarrow \hat{f}, \quad g \rightarrow \hat{g}, \quad h \rightarrow \hat{h}, \quad \text{entonces} \quad \frac{i}{\hbar} [\hat{f}, \hat{g}] = \hat{h}.$$

En particular,

$$(4.8) \quad [\hat{p}_k, \hat{q}_l] = -i\hbar \delta_{kl}, \quad [\hat{p}_k, \hat{p}_l] = 0, \quad [\hat{q}_k, \hat{q}_l] = 0,$$

²Nótese que $|\chi\rangle$ es autovector de \hat{P}_χ correspondiente al autovalor 1.

³Con $\langle \chi | \psi \rangle$ la correspondiente *amplitud de probabilidad de transición*.

mientras que, para la evolución temporal del operador \hat{M} , la ecuación (3.6) implica

$$(4.9) \quad \frac{d\hat{M}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{M}] + \frac{\partial \hat{M}}{\partial t},$$

donde \hat{H} es el *operador Hamiltoniano* del sistema y el último término da cuenta de la dependencia *explícita* de la magnitud M con el tiempo. Las *constantes de movimiento* son magnitudes sin dependencia explícita del tiempo que se corresponden con *operadores autoadjuntos que conmutan con el Hamiltoniano*.

En resumen, en esta *descripción* de la Mecánica Cuántica, denominada *marco* o *picture de Heisenberg*, el estado del sistema está especificado por un vector (constante) del espacio de Hilbert, mientras que los operadores que representan las magnitudes físicas que caracterizan las propiedades del sistema evolucionan en el tiempo según (4.9). En particular, $\forall t$ tenemos que

$$(4.10) \quad \frac{d\hat{p}_k}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{p}_k], \quad \frac{d\hat{q}_k}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{q}_k],$$

y

$$(4.11) \quad \frac{d\hat{H}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = \frac{\partial \hat{H}}{\partial t},$$

de modo que el operador Hamiltoniano es *constante* a menos de que el sistema esté acoplado a fuerzas externas que dependan del tiempo.

5. OPERADOR DE EVOLUCIÓN

Cuando el operador Hamiltoniano es constante, la ecuación de evolución (4.9) para magnitudes *sin dependencia explícita en el tiempo* puede resolverse de la siguiente manera. Definimos un operador *unitario* $\hat{U}(t)$ como la solución de la ecuación diferencial

$$(5.1) \quad \hat{U}^\dagger(t) \dot{\hat{U}}(t) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} = -\dot{\hat{U}}^\dagger(t) \hat{U}(t), \quad \text{con } \hat{U}(0) = I,$$

que también escribimos *formalmente* como $\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t}$, y para su adjunto (que coincide con su inverso) $\hat{U}^\dagger(t) = \hat{U}^{-1}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}t}$. Entonces, la solución de (4.9) es

$$(5.2) \quad \hat{M}(t) = \hat{U}^\dagger(t) \hat{M}(0) \hat{U}(t).$$

En efecto,

$$(5.3) \quad \begin{aligned} \frac{d}{dt} \hat{M}(t) &= \dot{\hat{U}}^\dagger(t) \hat{M}(0) \hat{U}(t) + \hat{U}^\dagger(t) \hat{M}(0) \dot{\hat{U}}(t) = \\ &= \frac{i}{\hbar} \left(\hat{H} \hat{M}(t) - \hat{M}(t) \hat{H} \right) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{M}(t)]. \end{aligned}$$

En particular, para el Hamiltoniano tenemos

$$(5.4) \quad \hat{H}(t) = \hat{H} = \hat{U}^\dagger(t) \hat{H} \hat{U}(t) \quad \Rightarrow \quad \hat{U}(t) \hat{H} = \hat{H} \hat{U}(t),$$

de modo que el operador de evolución conmuta con \hat{H} : $[\hat{H}, \hat{U}(t)] = 0$.

Similarmente, el operador correspondiente a una constante de movimiento conmuta con el operador de evolución,

$$(5.5) \quad \hat{M}(t) = \hat{M} = \hat{U}^\dagger(t) \hat{M} \hat{U}(t) \quad \Rightarrow \quad [\hat{M}, \hat{U}(t)] = 0.$$

6. DESCRIPCIÓN DE SCHRÖDINGER

Los valores medios de operadores y las probabilidades de transición son invariantes frente a transformaciones unitarias de vectores y operadores. En particular, si realizamos esas transformaciones con el operador de evolución $\hat{U}(t)$ antes definido,

$$(6.1) \quad \hat{M}_H(t) \rightarrow \hat{M}_S(t) := \hat{U}(t)\hat{M}_H(t)\hat{U}^\dagger(t) = \hat{M}_H(0),$$

$$|\psi\rangle_H \rightarrow |\psi(t)\rangle_S := \hat{U}(t)|\psi\rangle_H,$$

pasamos del marco de Heisenberg a la *descripción* o *marco de Schrödinger* (donde los subíndices identifican el marco de referencia), en el cual los operadores que representan magnitudes sin dependencia explícita con el tiempo permanecen constantes y los vectores de estado evolucionan según la *ecuación de Schrödinger*

$$(6.2) \quad \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle_S = \hat{U}(t)\dot{|\psi\rangle}_H = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{U}(t)|\psi\rangle_H = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}|\psi(t)\rangle_S,$$

cuya solución puede expresarse (formalmente) como

$$(6.3) \quad |\psi(t)\rangle_S = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}|\psi(0)\rangle_S, \quad \text{con} \quad |\psi(0)\rangle_S = |\psi\rangle_H.$$

7. OPERADORES EN EL ESPACIO DE CONFIGURACIÓN DE UNA PARTÍCULA

Podemos realizar al espacio de Hilbert de estados de una partícula en el marco de Schrödinger en términos de funciones de cuadrado sumable de las coordenadas, $\psi(\vec{\mathbf{x}}) \in \mathbf{L}_2(\mathbb{R}^3)$, definiendo al *operador posición* como un operador (autoadjunto) multiplicativo,

$$(7.1) \quad \vec{\mathbf{x}}\psi(\vec{\mathbf{x}}) := \vec{\mathbf{x}}\psi(\vec{\mathbf{x}}).$$

Entonces, para satisfacer las reglas de conmutación de la ecuación (4.8), el *operador impulso lineal* en ese espacio debe ser definido como

$$(7.2) \quad \vec{\mathbf{p}}\psi(\vec{\mathbf{x}}) := \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{\mathbf{x}}\psi(\vec{\mathbf{x}}),$$

es decir,

$$(7.3) \quad \hat{p}_k = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k} \quad \text{con,} \quad \left[\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x_k}, x_l\right] = -i\hbar\delta_{kl}.$$

Si, empleando la notación de Dirac, el vector unitario $|\psi\rangle$ representa al estado de la partícula y $|\vec{\mathbf{x}}\rangle$ es el *autovector* de $\vec{\mathbf{x}}$ correspondiente al autovalor $\vec{\mathbf{x}}$,

$$(7.4) \quad \vec{\mathbf{x}}|\vec{\mathbf{x}}\rangle = \vec{\mathbf{x}}|\vec{\mathbf{x}}\rangle,$$

entonces podemos escribir

$$(7.5) \quad \langle\vec{\mathbf{x}}|\vec{\mathbf{x}}|\psi\rangle = \vec{\mathbf{x}}\langle\vec{\mathbf{x}}|\psi\rangle$$

y, por comparación con (7.1), vemos que la *función de onda* $\psi(\vec{\mathbf{x}})$ corresponde a la *amplitud de probabilidad de transición* $\langle\vec{\mathbf{x}}|\psi\rangle$,

$$(7.6) \quad \psi(\vec{\mathbf{x}}) = \langle\vec{\mathbf{x}}|\psi\rangle, \quad \text{con} \quad \langle\psi|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\vec{\mathbf{x}})|^2 d^3x = 1,$$

de modo que $|\psi(\vec{\mathbf{x}})|^2$ debe interpretarse como la *densidad de probabilidad* de hallar a la partícula en la posición $\vec{\mathbf{x}}$.

A una partícula de masa m sometida a un potencial $V(\vec{x})$, clásicamente descrita por el Hamiltoniano $H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{x})$, se le asigna en esta representación el operador Hamiltoniano

$$(7.7) \quad \hat{H} := \frac{(\vec{\hat{p}})^2}{2m} + V(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{x}} + V(\vec{x}),$$

donde el primer término es un operador diferencial y el segundo uno multiplicativo. Y entonces la ecuación de Schrödinger se escribe como

$$(7.8) \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{x}} + V(\vec{x}) \right\} \psi(\vec{x}, t).$$

De ese modo, los estados con energía definida (autovectores de \hat{H}) están representados por las soluciones del problema de autovalores de un operador diferencial con dominio contenido en $\mathbf{L}_2(\mathbb{R}^3)$,

$$(7.9) \quad \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{x}} + V(\vec{x}) \right\} \psi_E(\vec{x}) = E \psi_E(\vec{x}), \quad \psi_E(\vec{x}) \in \mathbf{L}_2(\mathbb{R}^3).$$

8. OPERADORES EN EL ESPACIO DE IMPULSOS DE LA PARTÍCULA

Alternativamente, se puede realizar el espacio de Hilbert en términos de funciones de cuadrado sumable en $\mathbf{L}_2(\mathbb{R}^3)$ con el operador impulso lineal definido como operador multiplicativo. En ese caso tenemos

$$(8.1) \quad \vec{\hat{p}} \psi(\vec{p}) := \vec{p} \psi(\vec{p}), \quad \vec{\hat{x}} \psi(\vec{p}) := i\hbar \vec{\nabla}_{\mathbf{p}} \psi(\vec{p}),$$

donde $\psi(\vec{p}) = \langle \vec{p} | \psi \rangle$, con $\vec{p} | \vec{p} \rangle = \vec{p} | \vec{p} \rangle$, es la amplitud de probabilidad de encontrar a la partícula con impulso lineal \vec{p} ,

$$(8.2) \quad \langle \psi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\vec{p})|^2 d^3 p = 1.$$

El operador Hamiltoniano se expresa aquí como

$$(8.3) \quad \hat{H} := \frac{(\vec{\hat{p}})^2}{2m} + V(i\hbar \vec{\nabla}_{\mathbf{p}}).$$