



Departamento de Matemáticas, Facultad de Ciencias
Universidad Autónoma de Madrid

Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica

TRABAJO DE FIN DE GRADO

Grado en Matemáticas

Autor: Óscar Pinto Santamaría

Tutor: Daniel Faraco Hurtado

Curso 2020-2021

Resumen

En este trabajo daremos una introducción a las herramientas matemáticas en las que se basa la formulación actual de la mecánica cuántica, basándonos en el libro de Leonard Susskind con el mismo objetivo. Para ello, obtendremos una serie de axiomas a partir de los principios básicos que son conocidos experimentalmente, y a partir de ellos derivaremos los conceptos más avanzados. En concreto, estudiaremos la representación de los estados de un sistema cuántico usando un espacio vectorial sobre los complejos y la representación de las cantidades medibles físicamente como los autovalores reales de operadores lineales sobre este espacio de estados. A partir de esos conceptos, llegaremos a definir conceptos vitales en la Mecánica Cuántica como son las ecuaciones de Schrödinger, el entrelazamiento cuántico y los principios de incertidumbre. Concluiremos el trabajo aplicando nuestros resultados al problema de la posición de una partícula con masa y derivando el Principio de Incertidumbre de Heisenberg.

Abstract

In this work we will provide an overview of the mathematical tools which the field of Quantum Mechanics is built on, based on the book by Leonard Susskind which shares our objective. To this end, we will aim to axiomatize the basic principles of quantum systems which are already known experimentally, and use those to derive more advanced concepts. Specifically, we will study how to define the state of a quantum system using vectors in a complex vector space, and how to represent physical observables using the eigenvalues of lineal operators over that space of states. Using this concepts we will proceed to derive some of the most vital concepts of Quantum Mechanics, such as the Schrödinger equations, quantum entanglement and the uncertainty principles. To conclude, we will apply these concepts to the quantum system composed by a single particle with mass, and thus prove the Heisenberg Uncertainty Principle.

Índice general

1	Introducción	1
1.1	Introducción	1
2	El <i>spin</i> de un electrón	2
2.1	Descripción del <i>spin</i>	2
2.2	Axiomas	3
2.3	Espacio de estados	4
3	Principios fundamentales de la física cuántica	6
3.1	Operadores lineales	6
3.2	Estimadores de operadores lineales	8
3.3	Principios de la física cuántica	9
3.4	Estados físicamente incompatibles	9
3.5	Los operadores del <i>spin</i>	10
3.6	Operadores sobre 3-vectores	11
3.7	Principio de polarización	12
4	Evolución temporal de los sistemas cuánticos	13
4.1	Evolución temporal del estado	13
4.1.1	La evolución en el tiempo es unitaria	14
4.2	El Hamiltoniano cuántico	15
4.3	Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo	16
4.4	Cantidades conservadas y energía	16
4.5	Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo	18
5	Sistemas compuestos e incertidumbre	20
5.1	Sistemas con varios observables	20
5.2	Función de onda	22
5.3	Principios de la incertidumbre	23
6	Entrelazamiento cuántico	25
6.1	Combinando sistemas cuánticos	25
7	El principio de incertidumbre de Heisenberg	30
7.1	Sistemas continuos	30
7.2	Operadores sobre el espacio de funciones	33
7.3	El estado de una partícula	34
7.4	Transformada de Fourier	36
8	Conclusiones	40
A	Observaciones sobre el Hamiltoniano	42

CAPÍTULO 1

Introducción

1.1. Introducción

Desde el principio de los tiempos, el ser humano ha estado fascinado por el mundo que le rodea. Sin embargo, la dificultad de obtener mecanismos para explicar los eventos que ocurrían en el mismo hizo que lo más habitual fuera inventar mitos y religiones para aportar explicaciones satisfactorias para los sucesos físicos. Con el curso de la historia, cada vez más personas fueron aproximando los problemas físicos del mundo a través de la ciencia y el método científico. Para cuando Isaac Newton publicó sus *Principia Mathematica*, el mundo científico estaba suficientemente desarrollado como para aceptar su descripción matemática de la física. Desde entonces, las matemáticas y la física han estado permanentemente ligadas.

En 1788, el matemático francés Joseph-Louis Lagrange publicó una nueva teoría de la mecánica clásica, que utilizaba el Principio de Mínima Acción para generalizar las Leyes de Newton, y proporcionar un mecanismo para obtener distintos conjuntos de Leyes Físicas, por lo que era capaz de adaptarse mucho mejor a distintos sistemas que las Leyes de Newton. Notoriamente, eran mucho más indicadas para trabajar en sistemas de referencia no inerciales. Sin embargo, la sofisticación matemática del método de Lagrange limitó la escala de su adopción.

Basándose en el trabajo anterior de Lagrange, el matemático irlandés William Rowan Hamilton publicó en 1833 una nueva ampliación de la teoría de la mecánica clásica. Al igual que la mecánica Lagrangiana, la formulación de Hamilton permite derivar las Leyes de Newton. Además, introduce conceptos como la conservación del Hamiltoniano que trascienden el campo original de su aplicación.

A principios de siglo XX ya se había descubierto que había fenómenos físicos que ocurrían a muy pequeña escala que no eran explicables en el marco de las teorías clásicas de la física. Por tanto, se debió desarrollar una nueva teoría que englobara estos fenómenos y tuviera a la física clásica como consecuencia: la Mecánica Cuántica. En este trabajo exploraremos tanto las motivaciones para el desarrollo de esta nueva rama de la física, como las herramientas matemáticas empleadas en la misma.

CAPÍTULO 2

El *spin* de un electrón

2.1. Descripción del *spin*

Un buen comienzo para el estudio de la Mecánica Cuántica es el estudio del *spin* de un electrón. Procederemos a dar una descripción superficial de las características del mismo, a efectos de comprender la motivación para los siguientes pasos del trabajo (Susskind et al. 2014)[2].

Podemos abstraer el *spin* como una propiedad intrínseca de los electrones en el espacio tridimensional habitual. Esta propiedad puede ser detectada con un valor $\sigma = \pm 1$ por instrumentación que abstraeremos también.

Sin embargo, es importante destacar que a tan pequeña escala de medida, es físicamente imposible tomar medidas de un sistema sin influir en el mismo. Por tanto, es de suma importancia que al tomar repetidas medidas con el mismo instrumento en el mismo sistema y la misma dirección, se obtiene consistentemente el mismo valor de σ . Este hecho, si bien esperable en el contexto del comportamiento habitual de la física, contrasta con varios compartamientos del sistema formado por el *spin* que sí se alejan de lo natural.

Por ejemplo, imaginemos que tomamos la medida con el instrumento orientado en la dirección \vec{v} y obtenemos un cierto valor de σ . Si damos la vuelta al instrumento y lo orientamos en dirección $-\vec{v}$, el valor obtenido será $-\sigma$. Esto implica una cierta direccionalidad en el comportamiento del *spin*.

También es interesante el fenómeno que ocurre si cambiamos la dirección del instrumento a una ortogonal a la original. Supongamos que nuestra primera medida es $\sigma = +1$ en la dirección vertical dada por el vector unitario \hat{k} . Si rotamos el instrumento en el sentido \hat{i} , obtendremos o bien $\sigma = 1$ o bien $\sigma = -1$, indistintamente. De hecho, si repetimos el experimento numerosas veces podríamos confirmar que obtenemos cada valor con la misma probabilidad $P_i = 1/2$. Este resultado se corresponde en cierta manera con el que esperaríamos obtener en un sistema clásico, puesto que de media se obtendría el valor $\sigma = 0$, que tiene sentido pues habíamos medido que el *spin* se encontraba originalmente orientado en una dirección ortogonal a \hat{i} , por lo que su componente en \hat{i} esperaríamos que fuera $\sigma = 0$.

A pesar de este comportamiento clásico que ocurre con la media, con el comportamiento anterior queda claro que el *spin*, en general, no sigue las normas de la física clásica. El principal ejemplo de esto es el concepto de **preparación** del *spin*. Si repetimos el experimento anterior, y continuamos midiendo en la dirección \hat{i} , la inconsistencia desaparece. Pasaríamos a obtener constantemente el mismo valor de σ . ¿Cómo es posible esto? Pues bien: el efecto de la medida del *spin*, como hemos advertido antes, modifica el sistema. En concreto, cada vez que se mide cierto valor σ en cierta dirección \vec{v} , el *spin* pasa a tomar ese valor independientemente de su valor anterior. Se dice, en jerga, que el *spin* queda **preparado** en la dirección \vec{v} .

Si bien estos comportamientos pueden parecer arcanos para las personas poco versadas en la materia, realmente ya disponemos de toda la información necesaria para tratar de modelar el estado del *spin*. Pasaremos ahora a transformar las conclusiones obtenidas de esta pequeña descripción en una serie de axiomas en los que basar el modelo.

2.2. Axiomas

Lo primero que debemos hacer, si queremos definir la probabilidad de que el *spin* esté en cada dirección concreta, es observar que siempre debe hacerse en referencia a la dirección en la que se encuentra preparado.

Axioma 1. Siempre existe una dirección \vec{v} en la que el *spin* está preparado.

Una vez preparado el *spin*, ya podemos definir la probabilidad de obtener cada determinado valor de σ en una dirección ortogonal al mismo. Podríamos definirlo para cualquier dirección, pero de momento no va a ser necesario.

Axioma 2. Si el *spin* está preparado en una dirección \vec{v} , y dada otra dirección $\vec{w} \perp \vec{v}$, es equiprobable obtener $\sigma = +1$ que $\sigma = -1$ al medir en la dirección \vec{w} .

Ahora, observemos que habría tres dimensiones principales en las que orientar el instrumento en tres dimensiones: \hat{i} , \hat{j} y \hat{k} . En cada una de estas, puede tener dos sentidos: $\sigma = \pm 1$. Nombraremos a cada uno de estos, respectivamente, *up*, *down*; *right*, *left*; *in* y *out*. Sin embargo, la orientación tridimensional no se corresponde necesariamente con las propiedades del sistema. Vamos a dar una nueva definición de ortogonalidad que será más útil.

Axioma 3. Dos sucesos físicamente incompatibles son ortogonales.

Es decir, que cada uno de los pares anteriores está compuesto de dos vectores ortogonales.

Estos axiomas, tomados en conjunto, parecen indicar que una estructura de espacio de probabilidad, en la que se puedan definir vectores ortogonales, y en la que haya una correspondencia entre el módulo de los vectores y la probabilidad de que el *spin* esté orientado en la dirección de los mismos. En el siguiente apartado daremos una definición específica de un espacio vectorial que cumpla estos requisitos, y veremos algunas de sus propiedades.

2.3. Espacio de estados

Definición 2.1. Espacio de Estados del spin

Definiremos el espacio de estados del *spin* como un espacio vectorial $\mathbb{S} \subset \mathbb{C}^2$ sobre el cuerpo \mathbb{C} . Los vectores por tanto se representan como columnas $v = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$ con coordenadas $v_i \in \mathbb{C}$.

Definición 2.2. Espacio Dual

Dado que \mathbb{S} es un espacio vectorial, su dual $\mathbb{S}^* = \{f : \mathbb{S} \rightarrow \mathbb{C} \text{ lineales}\}$ es también un espacio vectorial cuyos elementos se pueden representar como vectores fila $v^* = (v_1^* \ v_2^*)$ con $v_i^* \in \overline{\mathbb{C}}$, en los que cada v_i^* se define por el conjugado de $v \in \mathbb{S}$.

Podemos utilizar el conjugado de los vectores para definir un producto escalar.

Definición 2.3. Producto Escalar

Definiremos un producto escalar $\Phi : \mathbb{S} \times \mathbb{S} \rightarrow \mathbb{C}$ de la siguiente forma: $\Phi(v, w) = v^*w = (v_1^* \ v_2^*) \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \end{pmatrix} = v_1^*w_1 + v_2^*w_2 \in \mathbb{C}$, que está bien definido por definición del espacio dual.

Para representar los vectores de ambos espacios usaremos la notación "bra-ket" o notación de Dirac.

Definición 2.4. Notación de Dirac

Denotaremos los vectores del espacio de estados como "ket" $|v\rangle$ representando a $v \in \mathbb{S}$ y "bra" $\langle v| \in \mathbb{S}^*$, donde $\langle v| = v^*$. Por lo tanto, el producto escalar de dos vectores se expresaría como un "bracket" de la forma $\langle w|v\rangle \in \mathbb{C}$.

Notemos ahora que en el caso $v = w$, $\Phi(v, v) = \langle v|v\rangle = |v|^2 \in \mathbb{R}^+$ es un número real positivo. Si empleamos vectores normalizados, entonces $\langle v|v\rangle \leq 1$ y puede utilizarse para definir una probabilidad.

Definición 2.5. Producto Escalar como Probabilidad

Sea un vector $|v\rangle \in \mathbb{S}$ que denota la dirección de preparación del *spin* y $|w\rangle$ una de sus componentes, de forma que $|v\rangle = \alpha_w w + |z\rangle$, con $|z\rangle \in \mathbb{S}$. Entonces definimos la probabilidad de obtener $\sigma = +1$ al medir en la dirección $|w\rangle$ como $P_w = \langle \alpha_w | \alpha_w \rangle$.

Para definir la condición de ortogonalidad utilizamos el producto escalar.

Definición 2.6. Ortogonalidad

Sean vectores $|v\rangle$ y $|w\rangle \in \mathbb{S}$. Se dice que $|v\rangle \perp |w\rangle$ si $\langle v|w\rangle = 0$. Cabe notar aquí que $\langle v|w\rangle = \langle w|v\rangle^*$, por lo que la definición es adecuadamente simétrica.

Procederemos ahora a demostrar que los vectores *up* y *down* ($|u\rangle$ y $|d\rangle$) son ortogonales y forman una base ortonormal del espacio vectorial \vec{v} . Obtendremos las

expresiones de los vectores *left* y *right* ($|l\rangle$ y $|r\rangle$) y los vectores *in* y *out* ($|i\rangle$ y $|o\rangle$) en dicha base, utilizando los axiomas anteriores.

Claramente, las expresiones de $|u\rangle$ y $|d\rangle$ en la base $B = \{|u\rangle, |d\rangle\}$ son, respectivamente, $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ y $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

De esto, es sencillo ver que $\langle u|d\rangle = 0$, por lo que son ortogonales, y al ser la base de dimensión 2 debe generar \mathbb{S} . Además, como $\langle u|u\rangle = \langle d|d\rangle = 1$, es una base ortonormal.

Veamos ahora las condiciones que deben cumplir $|l\rangle$ y $|r\rangle$, para ser expresados en función de la base B en la forma $|r\rangle = \alpha_u |u\rangle + \alpha_d |d\rangle$:

i) Deben ser ortogonales: $\langle l|r\rangle = \alpha_{u_l}^* \alpha_{u_r} + \alpha_{d_l}^* \alpha_{d_r} = 0$

ii) Dado cada uno de ellos, debe ser equiprobable medir el *spin* en $|u\rangle$ como en $|d\rangle$. Es decir: $P_u = \langle \alpha_u | \alpha_u \rangle = 1/2 = \langle \alpha_d | \alpha_d \rangle = P_d$

iii) Deben ser unitarios: $\langle l|l\rangle = \langle r|r\rangle = 1$

Observemos que de (ii) y (iii) se desprende que necesariamente $|\alpha_u|^2 = |\alpha_d|^2 = 1/2$. Por tanto, tenemos las opciones $\alpha = \pm \frac{1}{\sqrt{2}}$ y $\alpha = \pm \frac{i}{\sqrt{2}}$ para cada componente, debido a que trabajamos sobre el cuerpo de los complejos.

Debido a (i), es imposible que $\alpha_{u_r}, \alpha_{d_r} \in \mathbb{R}$ y $\alpha_{u_l}, \alpha_{d_l} \in \mathbb{C} - \mathbb{R}$ simultáneamente, o viceversa, puesto que sería imposible cumplir la condición de ortogonalidad.

Por tanto, arbitrariamente y por convención, asumiremos que las coordenadas de $|l\rangle$ y $|r\rangle$ son reales, y por tanto:

$$\begin{aligned} |r\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |u\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |d\rangle \\ |l\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |u\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} |d\rangle \end{aligned}$$

Análogamente, y dado que deben cumplir las mismas condiciones, definimos:

$$\begin{aligned} |i\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |u\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} |d\rangle \\ |o\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |u\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} |d\rangle \end{aligned}$$

Con lo que tenemos completamente determinado el espacio de estados del *spin*. Sin embargo, para sistemas más complejos sería conveniente tener herramientas más generales para describir el espacio de estados de los mismos. En el siguiente apartado daremos una mejor formulación, usando operadores lineales sobre el espacio de estados \mathbb{S} .

CAPÍTULO 3

Principios fundamentales de la física cuántica

3.1. Operadores lineales

Procederemos a dar ahora una versión más general de los principios anteriores, con la que buscaremos extender el procedimiento anterior para cualquier sistema cuántico, no solo el del *spin*. Esta nueva formulación estará basada en el uso de operadores lineales sobre el espacio de estados.

Definición 3.1. Operadores lineales sobre el espacio de estados

Los operadores lineales del espacio de estados son aquellos $M : \mathbb{S} \rightarrow \mathbb{S}$ que cumplen las condiciones $\forall \lambda \in \mathbb{C}, |v\rangle, |w\rangle \in \mathbb{S}$:

- a) $M(|v\rangle + |w\rangle) = M|v\rangle + M|w\rangle$
- b) $M(\lambda|v\rangle) = \lambda M|v\rangle$

Denotamos al espacio vectorial formado por todos los tales operadores sobre los complejos como $M^{n \times n}$.

Empezaremos entonces por el siguiente axioma:

Axioma 4. Los fenómenos físicos observables se describen con operadores lineales con autovalores reales.

Veremos ahora que basta que estos operadores lineales sean hermíticos.

Definición 3.2. Conjugada Hermítica

Sea $M \in M^{n \times n}$ un operador lineal sobre los complejos. Vamos a definir su *conjugada hermítica* como el operador representado por la matriz $M^\dagger = [M^T]^*$. Claramente $M^\dagger \in M^{n \times n}$ es un operador lineal sobre el mismo conjunto.

Además, tenemos la propiedad de que dado $|z\rangle, |y\rangle \in \mathbb{C}^n$, $M|z\rangle = |y\rangle \implies \langle z|M^\dagger = \langle y|$.

En general, $M \neq M^\dagger$. El caso en el que $M = M^\dagger$ se denomina *matriz hermítica*.

Definición 3.3. Matriz Hermítica

Sea $M \in \vec{M}^{n \times n}$ un operador lineal sobre los complejos. Se conoce como *hermítico* si $M^\dagger = M$.

Lema 3.1. Los autovalores de matriz hermítica son reales

Las matrices hermíticas tienen la propiedad muy importante de que sus autovalores son reales. Por definición y usando lo que sabemos de las conjugadas hermíticas, se debe cumplir $\forall z \in \mathbb{C}^n$ autovector:

$$i) M|z\rangle = \lambda|z\rangle$$

$$ii) \langle z|M^\dagger = \langle z|M = \lambda^* \langle z|$$

Multiplicando adecuadamente en cada ecuación por $\langle z|$ y $|z\rangle$ respectivamente:

$$i) \langle z|M|z\rangle = \lambda \langle z|z\rangle$$

$$ii) \langle z|M|z\rangle = \lambda^* \langle z|z\rangle$$

Que claramente solo se cumple $\iff \lambda = \lambda^* \iff \lambda \in \mathbb{R}$.

Parece entonces razonable representar los fenómenos físicos con matrices hermíticas, puesto que queremos aprovechar que sus autovalores siempre son reales. Pero para ello, necesitamos comprobar que una base autovectores de una matriz hermítica efectivamente es una base satisfactoria del espacio vectorial. Esto se conoce como:

Teorema 3.1. Teorema Fundamental de la Mecánica Cuántica

Los autovectores de un operador lineal hermítico $M \in M^{n \times n}$ forman una base ortonormal de \mathbb{C}^n .

Demostración. Denotaremos los autovectores de $M \in \mathbb{C}^n$ como $|z_j\rangle \in \mathbb{C}^n$, donde $j \in 1, \dots, n$. Como son autovectores, para cada uno de ellos se debe cumplir $M|z_j\rangle = \lambda_j|z_j\rangle$.

Evaluando un par cualquiera de dichos autovectores, sea $\{|z_j\rangle, |z_k\rangle\}$, observamos las siguientes condiciones que se deben cumplir:

$$i) \langle z_k|M = \lambda_k \langle z_k| \text{ (usando que } M \text{ hermítica)}$$

$$ii) M|z_j\rangle = \lambda_j|z_j\rangle$$

Multiplicando cada una por el conjugado del contrario:

$$i) \langle z_k|M|z_j\rangle = \lambda_k \langle z_k|z_j\rangle$$

$$ii) \langle z_k|M|z_j\rangle = \lambda_j \langle z_k|z_j\rangle$$

Ahora, restando obtenemos:

$$iii) (\lambda_k - \lambda_j) \langle z_k|z_j\rangle = 0$$

Y claramente vemos que de (iii) se deduce que si $\lambda_k \neq \lambda_j \implies \langle z_k|z_j\rangle = 0$. Es decir, si los autovalores de cada autovector son distintos, son ortogonales dos a dos. En ese supuesto, simplemente normalizando se obtiene una base ortonormal, puesto que $\dim(\langle\{z_j\rangle\rangle) = n \implies \langle\{z_j\rangle\}_{j \in 1 \dots n} = \mathbb{C}^n$.

Quedaría por tanto ver qué ocurre en el caso en que existan pares $\{|z_j\rangle, |z_k\rangle\}$ tales que $\lambda_j = \lambda_k$. En este caso, como necesariamente los autovectores deben ser independientes entre sí, podemos encontrar una base ortonormal del espacio que generan usando el algoritmo de Gram-Schmidt, con lo que queda demostrado el teorema. \square

3.2. Estimadores de operadores lineales

Hemos visto anteriormente cómo los fenómenos físicos se representan mediante operadores lineales, y la relación que éstos tienen con la medición de fenómenos. Además, hemos mencionado cómo, en la media, las mediciones cuánticas se corresponden con los valores esperados de la física clásica. Sin embargo, no hemos dado una definición formal del valor esperado de un cierto operador L cualquiera sobre el espacio de estados. Procederemos en esta sección a aportar dicha definición y explorar alguna de sus consecuencias.

Definición 3.4. Estimador de un operador

Definimos el **estimador** de un operador lineal $L : \mathbb{S} \rightarrow \mathbb{S}$ como el valor medio esperado de su medición, es decir, su media:

$$\langle L \rangle = \sum_i \lambda_i P(\lambda_i)$$

Sin embargo, tenemos una forma definida para calcular esa media gracias a nuestros resultados previos. Procederemos a usarla para encontrar una definición del estimador usando la terminología conocida de nuestra notación de Dirac.

Lema 3.2. Fórmula para estimador

Sea L un operador lineal de un sistema cuántico que está en un determinado estado $|A\rangle$. Entonces el estimador de L se puede definir de la siguiente manera:

$$\langle L \rangle = \langle A | L | A \rangle$$

Demostración. Partimos del lado derecho de la ecuación. Expresando el vector $|A\rangle$ en una base ortonormal del espacio, obtenemos:

$$|A\rangle = \sum_i \alpha_i |\lambda_i\rangle$$

Usando esta expresión, desarrollamos el producto:

$$L |A\rangle = \sum_i \alpha_i L |\lambda_i\rangle$$

Lo cual usando que los vectores $|\lambda_i\rangle$ son autovectores de L , nos da:

$$L|A\rangle = \sum_i \alpha_i \lambda_i |A\rangle$$

Ahora multiplicando por $\langle A|$ por la derecha y usando el Principio de la Probabilidad:

$$\langle A|L|A\rangle = \sum_i \alpha_i^* \langle \lambda_i | \alpha_i | \lambda_i \rangle = \sum_i (\alpha_i^* \alpha_i) \lambda_i = \sum_i P(\lambda_i) \lambda_i = \langle L \rangle \square$$

3.3. Principios de la física cuántica

Tras enunciar y demostrar el Teorema (3.1), estamos en posición de dar una formulación de la Mecánica Cuántica asociando todo fenómeno *observable* (o *medible*) a un operador lineal que actúa sobre el espacio de estados (en el plano complejo) subyacente del sistema. Esta formulación se apoya fundamentalmente en los siguientes principios:

Principio 1. *Los observables de la física cuántica se representan con operadores lineales sobre su espacio de estados.*

Principio 2. *Los posibles resultados de medir físicamente un observable son los autovalores λ_j del operador asociado. Cuando se obtiene de forma determinista un determinado resultado en la medida ($P_{\lambda_j} = 1$), el sistema está preparado en el estado $|\lambda_j\rangle$, que es el autovector asociado a λ_j .*

3.4. Estados físicamente incompatibles

En la física clásica, a menudo ocurre que hay sucesos que son *incompatibles*, es decir, que uno no puede ocurrir simultáneamente que el otro. Al igual que un objeto no puede moverse en dos direcciones opuestas simultáneamente en mecánica clásica, el estado de del *spin* no puede pasar de estar orientado en $|u\rangle$ a estar orientado en $|d\rangle$. Para expresar este concepto cualitativo de manera más formal, usaremos la idea de que si el sistema está preparado en un determinado estado, la proyección del mismo como vector sobre el vector de un estado incompatible debe de anularse. Entonces:

Principio 3. *Los estados físicamente incompatibles son ortogonales en el espacio de estados.*

Principio 4. *Si el sistema está preparado en el estado $|A\rangle$ y se mide el observable \vec{M} , la probabilidad de obtener el resultado λ_j es $P(\lambda_j) = \langle A|\lambda_j\rangle \langle \lambda_j|A\rangle \in [0, 1]$.*

Observamos que estos principios son una generalización de los axiomas que ya habíamos deducido anteriormente. Una consecuencia notable de esta formulación es que, como los autovalores del operador deben ser reales (porque son los resultados de las medidas experimentales) y además los autovectores de distintos autovalores deben ser ortogonales, los operadores son matrices hermíticas (según el Teorema Fundamental).

3.5. Los operadores del spin

Hemos visto que los observables se deben definir con operadores hermíticos, pero no hemos visto un ejemplo de cómo este sistema funciona en la práctica. Regresaremos temporalmente a nuestro ejemplo anterior con el *spin* del electrón. De este sistema, conocemos que tiene tres pares de vectores ortonormales que forman bases de $\mathbb{S} \subset \mathbb{C}^2$. A saber: $\{|u\rangle, |d\rangle\}$, $\{|r\rangle, |l\rangle\}$ y $\{|i\rangle, |o\rangle\}$.

Cada uno de estos pares de vectores cumple el Principio 3, y tiene a cada uno de los vectores asociado a uno de los posibles resultados de la medida del spin sobre, respectivamente, los ejes Z, X e Y. Es decir, para cada par de vectores, uno es el autovector asociado a $\lambda = +1$ y el otro a $\lambda = -1$. Esto nos permite formular las siguientes ecuaciones con el objetivo de encontrar el operador, que denotaremos σ_z , σ_x o σ_y apropiadamente:

$$\begin{aligned}\sigma_z |u\rangle &= \begin{pmatrix} \sigma_{z11} & \sigma_{z12} \\ \sigma_{z21} & \sigma_{z22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = 1 * |u\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \sigma_z |d\rangle &= \begin{pmatrix} \sigma_{z11} & \sigma_{z12} \\ \sigma_{z21} & \sigma_{z22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = -1 * |d\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Luego la matriz del operador σ_z es necesariamente $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$, que efectivamente es hermítica.

De forma análoga y empleando las expresiones de $\{|r\rangle, |l\rangle\}$ y $\{|i\rangle, |o\rangle\}$ en la base $\{|u\rangle, |d\rangle\}$ de \mathbb{S} obtenemos:

- $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
- $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$
- $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$

Estas tres matrices (en base $\{|u\rangle, |d\rangle\}$) se conocen como *matrices de Pauli*. Demostremos ahora que, junto con la identidad, definen por completo el espacio de los operadores sobre el espacio de estados del *spin*.

Lema 3.3. *Sea H una matriz hermítica 2×2 , y sean σ_x , σ_y y σ_z las matrices de Pauli. Entonces H se puede escribir como combinación lineal de las matrices de Pauli y de la identidad de la siguiente manera:*

$$H = a\sigma_x + b\sigma_y + c\sigma_z + dI$$

Donde $a, b, c, d \in \mathbb{R}$

Demostración. Una matriz hermítica debe tener la forma $H = \begin{pmatrix} h_1 & h_2 \\ h_2^* & h_3 \end{pmatrix}$, donde $h_1, h_3 \in \mathbb{R}$ y $h_2 = z \in \mathbb{C}$. Podemos expresar dicho z en función de dos números reales de

la forma habitual $z = z_1 + iz_2$. Entonces realmente lo que queremos es demostrar que el siguiente sistema tiene solución:

$$\left\{ \begin{array}{l} h_1 = 0a + 0b + 1c + d \\ z_1 + iz_2 = 1a - ib + 0c + d \\ z_1 - iz_2 = 1a + ib + 0c + d \\ h_3 = 0 + 0b - 1c + d \end{array} \right\}$$

Claramente, tomando la primera y cuarta ecuaciones, obtenemos soluciones para c y d en función de h_1, h_2 por el método de reducción. Para la segunda y cuarta, basta identificar $z_2 = b$ y $z_1 = a + d$.

3.6. Operadores sobre 3-vectores

Ahora que hemos definido los operadores cuánticos que operan sobre los vectores de estados de un sistema, querríamos obtener una relación entre las direcciones \vec{n} en \mathbb{R}^3 en las que realizamos la medición física y el operador hermítico que la representa en el espacio de estados.

Con este objetivo, buscaremos definir otro operador $\sigma : \mathbb{R}^3 \rightarrow M_{\mathbb{S}}$, donde $M_{\mathbb{S}} := \{M : \mathbb{S} \rightarrow \mathbb{S} \mid M = M^\dagger\}$ (siendo \mathbb{S} el espacio de estados). De esta forma, estamos creando una aplicación que a cada 3-vector \vec{n} le asocia un único operador hermítico M_n que representa los posibles resultados para el estado del sistema, midiendo con el aparato en la dirección \vec{n} .

En el ejemplo anterior del *spin* podemos ver de una forma muy clara la forma en que se definiría este 3-operador σ en la práctica. De las *matrices de Pauli* obtenemos tres operadores hermíticos sobre el espacio de estados, los cuales proceden de medir en las tres direcciones estándar en \mathbb{R}^3 . Por tanto, sabemos necesariamente que nuestro hipotético σ debe cumplir:

$$\begin{array}{l} i) \quad \sigma(\vec{i}) = \sigma_x \\ ii) \quad \sigma(\vec{j}) = \sigma_y \\ iii) \quad \sigma(\vec{k}) = \sigma_z \end{array}$$

Podemos dar por tanto la siguiente definición de σ por interpolación:

$$\sigma(n) = n_x \sigma_x + n_y \sigma_y + n_z \sigma_z$$

Lo cual en el caso concreto del spin aporta una definición explícita del 3-operador:

$$\sigma(\vec{n}) = \begin{pmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{pmatrix}$$

En ocasiones, la aplicación del operador σ sobre una dirección \vec{n} se escribe como $\sigma\vec{n}$ en el uso diario en Física.

3.7. Principio de polarización

Mostraremos ahora un resultado fundamental: el *Principio de polarización del spin*. Este principio deja definida la relación entre una dirección en \mathbb{R}^3 cualquiera en la que se mide y el estado S que determina el resultado de medir su *spin*. Específicamente:

Principio 5. Principio de Polarización del spin

Sea un sistema cuántico de spin que se encuentra en un cierto estado $|A\rangle \in \mathbb{V}$. Entonces existe una dirección $\vec{n} \in \mathbb{R}^3$ tal que $\sigma\vec{n}$ es un operador hermítico con autovector $|A\rangle$.

Demostración. Partiremos del vector $|A\rangle = \alpha_u |u\rangle + \alpha_d |d\rangle \in \mathbb{S}$.

Conocemos por el lema (3.3) que el spin está totalmente determinado por las matrices de Pauli, y por tanto la siguiente expresión determina el spin para cualquier dirección de medida:

$$\sigma(\vec{n}) = n_x \sigma_x + n_y \sigma_y + n_z \sigma_z = \begin{pmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{pmatrix}$$

Esta matriz es hermítica y por tanto define adecuadamente un observable. Daremos ahora una expresión para esta matriz en términos de las componentes del estado y demostraremos que cumple que $|A\rangle$ es autovector de la misma.

$$L = \begin{pmatrix} |\alpha_u|^2 - |\alpha_d|^2 & \alpha_u \alpha_d^* + \alpha_d^* \alpha_u \\ \alpha_d \alpha_u^* + \alpha_u^* \alpha_d & |\alpha_d|^2 - |\alpha_u|^2 \end{pmatrix}$$

Como debido al principio de probabilidad $|\alpha_u|^2 + |\alpha_d|^2 = 1$, entonces:

$$\begin{aligned} i) & \alpha_u (|\alpha_u|^2 - |\alpha_d|^2) + \alpha_d (\alpha_u \alpha_d^* + \alpha_d^* \alpha_u) = \alpha_u (|\alpha_u|^2 - |\alpha_d|^2 + 2|\alpha_d|^2) = \alpha_u \\ ii) & (\alpha_d \alpha_u^* + \alpha_u^* \alpha_d) \alpha_u + \alpha_d (|\alpha_d|^2 - |\alpha_u|^2) = \alpha_d (|\alpha_d|^2 - |\alpha_u|^2 + 2|\alpha_u|^2) = \alpha_d \end{aligned}$$

Y para ver que efectivamente el vector $L|A\rangle = |A\rangle$ basta usar (1) y (2).

Usando la expresión de la matriz $\sigma(\vec{n})$ dada más arriba, obtenemos que la dirección que determina el estado $|A\rangle$ es:

$$\vec{n} = \text{Re}(\alpha_u \alpha_d^*) \vec{i} + \text{Im}(\alpha_u \alpha_d^*) \vec{j} + (|\alpha_u|^2 - |\alpha_d|^2) \vec{k} \quad \square$$

CAPÍTULO 4

Evolución temporal de los sistemas cuánticos

4.1. Evolución temporal del estado

Hasta ahora hemos analizado solamente sistemas cuánticos estáticos, o como mucho, discretos. Somos capaces de describir el estado de un sistema en un instante determinado, de encontrar una dirección en el espacio en la que medirlo, y de predecir los posibles resultados de cada medida y sus probabilidades.

Sin embargo, apenas hemos dedicado tiempo a hablar de la evolución temporal de los sistemas cuánticos. Como al fin y al cabo, difícilmente podemos dar una teoría de la Mecánica sin tener el paso del tiempo en cuenta, procederemos en estos siguientes apartados a introducir la notación que usaremos a este aspecto y a demostrar unos cuantos resultados importantes.

Definición 4.1. Estado con respecto al tiempo

Consideremos un sistema cuántico que cumpla los principios que hemos postulado anteriormente. Podemos denotar el estado del sistema en cada instante t del tiempo como $|\Psi(t)\rangle \in \mathcal{S}$. Además, arbitrariamente y sin pérdida de generalidad, podemos considerar el instante inicial como $t = 0$.

Como queremos que nuestra teoría sea consistente, necesitamos que sea determinista. Es decir, que si conocemos el estado inicial podamos determinar el estado en cualquier instante futuro. Podemos suponer pues que el sistema viene definido por:

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

donde $U(t)$ es una función del tiempo que llamaremos *operador de desarrollo temporal*. Aunque es perfectamente posible trabajar con operadores no lineales para el desarrollo temporal, de aquí en adelante asumiremos que los operadores $U(t)$ son lineales para no sobrecomplicar innecesariamente el trabajo.

Veamos otra propiedad interesante de este operador.

4.1.1. La evolución en el tiempo es unitaria

Principio 6. *Sea un sistema cuántico dependiente del tiempo con operador de desarrollo temporal $U(t) : \mathbb{S} \rightarrow \mathbb{S}$. Si se conservan las distinciones en el sistema, es decir,*

$$\langle A|B \rangle = 0 \iff \langle A(t)|B(t) \rangle = 0, \forall t > 0$$

*entonces necesariamente se debe cumplir que $U(t)$ es una matriz **unitaria**, es decir:*

$$U^\dagger(t)U(t) = I$$

Demostración. *Partamos de un sistema con dos estados ortogonales, $|\Psi(0)\rangle$ y $|\Phi(0)\rangle \in \mathbb{V}$. Por la conservación de las distinciones, sabemos que esa ortogonalidad se mantendrá en el tiempo. Es decir:*

$$\langle \Psi(0)|\Phi(0) \rangle = 0 \implies \langle \Psi(0)|U^\dagger(t)U(t)|\Phi(0) \rangle = 0, \forall t > 0$$

Ahora, como sabemos que el espacio de estados es un espacio vectorial sobre \mathbb{C} de dimensión 2, podemos encontrar una base ortonormal $\mathbb{B} = \{i, j\}$. Esta ortonormalidad se puede expresar de forma simplificada de la manera

$$\langle i|j \rangle = \delta_{ij}$$

*donde δ_{ij} es el **delta de Kronecker** habitual. Como esto se cumple para toda base \mathbb{B} arbitraria del espacio, podemos elegir $\mathbb{B} = \{i, j\} = \{\Psi(0), \Phi(0)\}$ en particular. Sustituyendo en la ecuación anterior, y aplicando de nuevo la conservación de distinciones, obtenemos:*

$$\langle i|U^\dagger(t)U(t)|j \rangle = \delta_{ij}$$

Como \mathbb{B} es base, todo elemento $|\Psi(t)\rangle$ de \mathbb{S} se puede expresar como $|\Psi(t)\rangle = \lambda_i|i\rangle + \lambda_j|j\rangle$. De esta manera, el producto de dos elementos cualesquiera cumple:

$$\begin{aligned} \langle \Psi(t)|\Phi(t) \rangle &= \langle \Psi(0)|U^\dagger(t)U(t)|\Phi(0) \rangle = \lambda_i^* \langle i|U^\dagger(t)U(t)|\Phi(0) \rangle + \lambda_j^* \langle j|U^\dagger(t)U(t)|\Phi(0) \rangle = \\ &= \lambda_i^* \langle i|U^\dagger(t)U(t)\beta_i|i\rangle + \lambda_i^* \langle i|U^\dagger(t)U(t)\beta_j|j\rangle + \lambda_j^* \langle j|U^\dagger(t)U(t)\beta_i|i\rangle + \lambda_j^* \langle j|U^\dagger(t)U(t)\beta_j|j\rangle = \\ &= \lambda_i^* \langle i|U^\dagger(t)U(t)\beta_i|i\rangle + \lambda_j^* \langle j|U^\dagger(t)U(t)\beta_j|j\rangle = \lambda_i^*\beta_i + \lambda_j^*\beta_j, \forall t > 0 \iff U^\dagger(t)U(t) = I \quad \square \end{aligned}$$

4.2. El Hamiltoniano cuántico

Ahora que hemos dado el operador que define el desarrollo temporal del sistema, y que hemos visto algunas de sus propiedades, estamos preparados para buscar la relación entre este operador y el Hamiltoniano clásico. Es decir, buscamos expresar el operador de desarrollo temporal en función de una cantidad que se conserva, manteniendo la unitariedad.

Casualmente, obtenemos una expresión como la buscada a partir de responder a otra pregunta muy razonable: ¿Cómo evoluciona el operador $U(t)$ con respecto al paso del tiempo?. Para responder a esta pregunta, es necesario estudiar el comportamiento de la derivada temporal de $U(t)$ (Cohen-Tannoudji et al. 1973 p. 181 36-42)[6]. A la manera física, podemos estudiar esa derivada observando el efecto que tiene en la función aplicarle un intervalo de tiempo infinitesimal $\epsilon > 0$. Del principio de unitariedad, obtenemos:

$$U^\dagger(t)U(t) = I$$

Si ahora asumimos que la variación debe ser suave (algo que es habitual en procesos relacionados con el universo físico) y la identificamos con un operador H , entonces dado que $U(0) = I$, necesariamente $U(\epsilon) \rightarrow I$ cuando $\epsilon \rightarrow 0$, y expandiendo en serie de potencias:

$$U(\epsilon) = I + z\epsilon H + O(\epsilon^2)$$

Observamos que lo que indica esta expresión es que nos estamos aproximando progresivamente a I por los números complejos $z\epsilon \in \mathbb{C}$. Suponiendo ahora que nos aproximamos tomando $z = i$:

$$U^\dagger(\epsilon)U(\epsilon) = (I + i\epsilon H^\dagger)(I - i\epsilon H) = I + i\epsilon(H - H^\dagger) + O(\epsilon^2)$$

Como el operador de desarrollo temporal es unitario, la expresión superior debe ser igual a la identidad. Entonces el término de primer orden se debe anular. Entonces tendríamos que:

$$I = U^\dagger(\epsilon)U(\epsilon) \iff H = H^\dagger$$

En el apéndice A daremos un argumento heurístico para justificar que restringirnos a $z = i$ es razonable si buscamos que el Hamiltoniano resulte ser hermítico.

Ahora que sabemos que H es un operador lineal sobre los estados que cumple que es hermítico, podemos afirmar dados nuestros Principios que es un **observable** cuántico, y por tanto tiene una base de autovectores cuyos autovalores determinan sus posibles valores. Vamos a denominar este operador el **Hamiltoniano cuántico** del sistema, y a sus autovectores los estados de energía del sistema. Esta denominación surge de una asociación con el Hamiltoniano clásico que veremos próximamente.

Pero antes de eso, usaremos esta expresión de la matriz de desarrollo temporal en función del Hamiltoniano para derivar una de las expresiones más famosas de la física cuántica: la ecuación de Schrödinger.

4.3. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

A partir de la expresión que tenemos para el Hamiltoniano cuántico, podemos obtener una expresión para el desarrollo del estado con respecto a un incremento infinitesimal del tiempo (un delta de tiempo, en el lenguaje de la física).

$$|\Psi(\epsilon)\rangle = |\Psi(0)\rangle - i\epsilon H |\Psi(0)\rangle, \quad \epsilon > 0$$

Podemos reescribir esto para que tenga forma de derivada:

$$\frac{|\Psi(\epsilon)\rangle - |\Psi(0)\rangle}{\epsilon} = -iH |\Psi(0)\rangle$$

$$\frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = -iH |\Psi\rangle$$

Esta expresión es casi la de Schrödinger dependiente del tiempo. Falta solamente un factor de conversión constante:

Teorema 4.1. *Schrödinger dependiente del tiempo*

Sea un sistema cuántico con Hamiltoniano H . Entonces la evolución del sistema con respecto al tiempo viene determinada por la ecuación diferencial:

$$\frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} H |\Psi\rangle$$

Donde \hbar es una constante de conversión para que la ecuación tenga consistencia dimensional. Ha sido determinada experimentalmente como $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, donde h es la constante de Planck.

4.4. Cantidades conservadas y energía

Una de las características más buscadas en todo sistema de leyes físicas clásicas es la existencia de valores que se conservan para todos los estados posibles del sistema. Estas **cantidades conservables**, como bien pueden ser el momento lineal o la energía, permiten por sí mismas determinar el estado del sistema con el paso del tiempo, como demostró la creación de la mecánica Hamiltoniana.

Es por tanto muy lógico buscar un análogo cuántico, alguna fórmula que usando los teoremas que hemos derivado de nuestros axiomas y principios nos permita determinar cuáles son las cantidades que se conservan en la mecánica cuántica.

Que una cantidad se conserve quiere decir que se mantenga constante en el tiempo. Por tanto, partimos de derivar el valor esperado de un observable L con respecto al tiempo, usando la regla de la cadena.

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | L | \Psi(t) \rangle = \langle \dot{\Psi}(t) | L | \Psi(t) \rangle + \langle \Psi(t) | L | \dot{\Psi}(t) \rangle$$

Ahora en esta ecuación podemos sustituir utilizando la ecuación de Schrodinger dependiente del tiempo:

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | L | \Psi(t) \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi(t) | HL | \Psi(t) \rangle - \frac{i}{\hbar} \langle \Psi(t) | LH | \Psi(t) \rangle$$

Finalmente, definiendo el operador **conmutador** entre operadores de la forma

$$[L, H] = LH - HL$$

y la notación para el valor esperado de un operador, podemos expresar concisamente la ecuación anterior en la forma:

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

La cual es una expresión que relaciona la variación temporal del valor esperado de L con el valor esperado de $[H, L]$. Cabe notar que si L, H son hermíticas entonces $i[H, L]$ es hermítica.

Observamos también que esta forma de la **ecuación de Schrödinger** solamente es posible si el Hamiltoniano H es independiente del tiempo, pues requiere que el término $\frac{\delta H}{\delta t}$ se anule. En este trabajo nos limitaremos a esta formulación por razones de tiempo y espacio, pero en la literatura hay ejemplos que tienen esto en cuenta (Cohen-Tannoudji et al. 1973 p. 241 D-27)[6].

Dado este resultado, podemos definir claramente la condición para que una cantidad se conserve en un sistema cuántico.

Lema 4.1. Cantidades Conservadas

*Un operador lineal Q representa una **cantidad conservada** si y solo si cumple la condición:*

$$[Q, H] = 0$$

Como consecuencia directa, observamos que el Hamiltoniano cuántico H siempre es conservable (pues $[H, H] = 0$). Por tanto se cumple que el Hamiltoniano es una medida de la energía del sistema, análogamente a lo que ocurre en sistemas clásicos.

4.5. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

Ahora que hemos asociado el Hamiltoniano con la energía del sistema, podemos darle una vuelta de tuerca a nuestra ya conocida ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Para ello, recordaremos que el Hamiltoniano H es un operador lineal cuyos posibles valores medibles son los autovalores de sus autovectores. Por definición, para un autovector E_j :

$$H |E_j\rangle = E_j |E_j\rangle$$

Esta es la conocida como ecuación de Schrödinger independiente. A pesar de su simplicidad, es una relación que nos permite, si conociéramos todos los autovalores y autovectores del Hamiltoniano, expresar el estado del sistema de una forma muy útil:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j \alpha_j(t) |E_j\rangle$$

La cual podemos introducir en la ecuación dependiente del tiempo:

$$\sum_j \dot{\alpha}_j(t) |E_j\rangle = -\frac{i}{\hbar} H \sum_j \alpha_j(t) |E_j\rangle = -\frac{i}{\hbar} \sum_j \alpha_j(t) E_j |E_j\rangle$$

Lo cual pasando todo al lado izquierdo:

$$\sum_j \left[\dot{\alpha}_j(t) + \frac{i}{\hbar} E_j \alpha_j(t) \right] |E_j\rangle = 0$$

Esto es una combinación lineal de vectores linealmente independientes, por lo que se debe anular solamente si todos los coeficientes se anulan. Es decir, que para cada valor de j tenemos una ecuación diferencial de primer orden:

$$\frac{d}{dt} \alpha_j(t) = -\frac{i}{\hbar} E_j \alpha_j(t)$$

Que claramente tiene como solución la exponencial de ratio $-\frac{i}{\hbar} E_j$:

$$\alpha_j(t) = \alpha_j(0) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t}$$

Observamos que esta ecuación no se aplica solamente al *spin*, sino que es generalizable a todo sistema cuántico en el que el Hamiltoniano H no dependa explícitamente de t .

Asumiendo que podemos conocer el estado inicial del sistema (usando tal vez algún aparato de medida que asumiremos una caja negra) podemos eliminar de esta ecuación la dependencia del coeficiente $\alpha_j(0) = \langle E_j | \Psi(0) \rangle$.

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_j |E_j\rangle \langle E_j|\Psi(0)\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_j t}$$

Esta ecuación determina por completo el estado del sistema con respecto al tiempo en términos de la base de autovectores del Hamiltoniano y del estado inicial. Vale la pena mantener en mente para el futuro que se trata de un sumatorio sobre los vectores de dicha base.

CAPÍTULO 5

Sistemas compuestos e incertidumbre

5.1. Sistemas con varios observables

Hasta ahora hemos centrado nuestro estudio en sistemas que dependen de una cierta cantidad observable, que representamos con un operador lineal de estados L . Supongamos ahora un sistema cuántico que depende de dos cantidades observables, cada una definida por un operador (L y M , respectivamente). Si fuera un sistema clásico, no cabría duda de que podríamos medir cada una por separado y determinar el estado del sistema usando el resultado de cada medición.

Pero como ya hemos visto anteriormente, las reglas de la física cuántica no tienen por qué garantizar que estas medidas no se afecten mutuamente. Si ese fuera el caso, podríamos tener un sistema en el cual no podemos determinar con exactitud el estado de un observable sin modificar el estado del otro.

Seguramente todo lector haya visto u oído el razonamiento previo bajo el nombre de **Principio de Incertidumbre de Heisenberg**. Sin embargo, el Principio de Heisenberg se refiere específicamente a la posición y velocidad de una partícula. Nosotros podemos dar una noción generalizada de lo que es un *principio de incertidumbre* para cualquier tipo de sistema cuántico. Empezaremos por definir matemáticamente el concepto de dos observables que "no se afectan mutuamente".

Definición 5.1. Autovectores simultáneos

Sea un sistema cuántico con dos cantidades observables, cada una representada por un operador lineal sobre el espacio de estados (L y M , respectivamente). Cada uno de estos operadores por su cuenta determina un espacio de estados con una cierta base ortonormal $B_l = \{A_0, \dots, A_n\}$ o $B_m = \{B_0, \dots, B_n\}$, respectivamente. Denotamos los estados actuales de L y M como $|A_i\rangle \in \langle B_l\rangle$ y $|B_j\rangle \in \langle B_m\rangle$.

Entonces, si los observables no se afectan mutuamente, el estado del sistema viene determinado por un vector de estado $|A, B\rangle$ que es un **autovector simultáneo** de L y M . Es decir:

- $L|A_i, B_j\rangle = A_i|A_i, B_j\rangle$

$$\blacksquare M |A_i, B_j\rangle = B_j |A_i, B_j\rangle$$

La pregunta que debemos hacernos ahora debe claramente ser qué condición deben cumplir los operadores para que esto sea cierto. La respuesta de nuevo tiene que ver con la conmutación de los operadores (Cohen-Tannoudji et al. 1973 pp. 139-141 D-52)[6]:

Lema 5.1. Autovalores simultáneos \iff Operadores conmutan

Sea un sistema cuántico con dos operadores L y M con la notación de la definición anterior. Entonces:

$$\forall |A, B\rangle \in \mathbb{V} \text{ autovectores, } \begin{cases} L |A, B\rangle = A |A, B\rangle \\ M |A, B\rangle = B |A, B\rangle \end{cases} \iff [L, M] = 0$$

Demostración. Demostraremos las dos implicaciones por separado:

(\implies)

La primera implicación es sencilla de demostrar. Basta analizar qué ocurre al multiplicar un vector estado por el producto LM (que también es un operador lineal de estados).

$$LM |A, B\rangle = LB |A, B\rangle = AB |A, B\rangle = BA |A, B\rangle = ML |A, B\rangle$$

Como los autovectores forman base del espacio de estados, tenemos:

$$LM |A, B\rangle - ML |A, B\rangle = 0, \forall |A, B\rangle \in \mathbb{V} \implies [L, M] = 0$$

(\impliedby)

Partimos de la base de que $[L, M] = 0$. Usando la definición del operador y que L, M son hermíticas:

$$(LM)^\dagger = M^\dagger L^\dagger = ML$$

Por tanto, las matrices LM y ML son hermíticas. Entonces necesariamente sus autovalores son reales y tienen una base de autovectores. Quedaría ver que podemos obtener una tal base eligiendo exclusivamente kets que son autovectores tanto de L como de M . Tomamos un autovector $|A\rangle$ arbitrario de L . Como A es hermítica, y multiplicando en ambos lados por M :

$$L |A\rangle = A |A\rangle \implies M(L |A\rangle) = AM |A\rangle$$

Usando que L y M conmutan:

$$L(M |A\rangle) = A(M |A\rangle)$$

Entonces claramente $M|A\rangle$ es también un autovector de L , con el mismo autovalor A de hecho. Si el autovalor es único, entonces claramente el estado $|A\rangle$ es también autovector de M , con autovalor proporcional a A .

Quedaría ver el caso en que $|A\rangle$ sea un autovector degenerado de L . En este caso, no podemos garantizar que $B|A\rangle$ sea autovector de M . Solo que pertenece a un subespacio \mathbb{S}_A que es invariante por L . Sin embargo, como M es hermítica, tiene una base de autovectores. Entonces debe de haber una sub-base de autovectores de B que sea base de \mathbb{S}_A . Basta tomar entonces esos autovectores como parte de la base de LM , puesto que son a la par autovectores de M y invariantes por L con autovalor A . Con esto, queda totalmente determinada la base deseada. \square

5.2. Función de onda

En el apartado anterior hemos introducido una notación para los estados de un sistema cuántico con varios observables. Usaremos ahora esa idea para definir otro de los conceptos más conocidos de la física cuántica: la función de onda.

Definición 5.2. Función de onda

Sea un sistema cuántico. La base ortonormal de su espacio de estados está compuesta de vectores estado $|a, b, c, \dots\rangle$ que dependen de los autovalores de cada observable A, B, C, \dots , respectivamente. Podemos entonces escribir un estado general del sistema de la forma:

$$|\Psi\rangle = \sum_{a, b, c, \dots} \psi(a, b, c, \dots) |a, b, c, \dots\rangle$$

Cada uno de los coeficientes se corresponde con la probabilidad de que una medida prepare el estado en el autovector que lo acompaña. Podemos escribir $\psi(a, b, c, \dots) = \langle a, b, c, \dots | \Psi \rangle$ para enfatizar esa relación y para observar que podemos obtener estos coeficientes a partir del estado actual y de una base de autovalores conocida.

Definimos la función de onda como el conjunto de todos los coeficientes $\psi(a, b, c, \dots)$

La relación con la probabilidad es, explícitamente:

$$P(A = a, B = b, C = c, \dots) = \psi(a, b, c, \dots) \psi^*(a, b, c, \dots)$$

Cabe notar que la definición de la función de onda depende de la definición de la base de autovectores. Una selección distinta de autovectores dara las probabilidades de una selección distinta de operadores.

5.3. Principios de la incertidumbre

Hemos visto anteriormente que en el caso de que los operadores conmuten, el estado de un sistema cuántico con varios operadores queda perfectamente bien definido. Sin embargo, como esto no tiene por qué ocurrir en general. Vamos a ver un contraejemplo:

Recordemos que el **spin** de un electrón estaba caracterizado por tres operadores: σ_x , σ_y y σ_z , que conocíamos como **matrices de Pauli**. Podemos calcular simplemente los conmutadores de los operadores de Pauli, y ver que no conmutan:

$$[\sigma_x, \sigma_y] = \sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2i & 0 \\ 0 & -2i \end{pmatrix} = 2i\sigma_z \neq 0$$

Esto se puede repetir de forma análoga para las otras dos posibles combinaciones obteniendo resultados similares. Las matrices de Pauli en un *spin* son, por tanto, ejemplos de operadores que no conmutan, por lo que es imposible obtener un sistema de autovectores simultáneos que determine sus estados sin incertidumbre.

De hecho, recordamos que las matrices de Pauli, junto con la identidad, son base del espacio de matrices sobre el espacio de estados del *spin* (Lema 3.3).

Pero la palabra clave aquí es *incertidumbre*. No tenemos por qué asumir que por no tener estados simultáneos hemos fracasado en nuestro propósito de modelar la física cuántica. Si logramos obtener una cota para la incertidumbre generada, podemos seguir obteniendo resultados útiles físicamente.

Definición 5.3. Incertidumbre

Recordemos que en un sistema cuántico con un operador A , el valor esperado de A se define como:

$$\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle = \sum_a a P(a)$$

Lo que realmente es simplemente la media de la distribución de probabilidad P sobre su soporte, que son los autovectores estado de A . Queremos que la incertidumbre sea una medida de la desviación sobre el valor esperado. Una buena forma de representar eso es identificar la incertidumbre ΔA con la desviación típica. En términos de la varianza:

$$(\Delta A)^2 = \sum_a (a - \langle A \rangle)^2 P(a) = \langle \Psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \Psi \rangle$$

Donde aprovechamos que $A^2 |B_i\rangle = B_i^2 |B_i\rangle$, $\forall B_i$ autovector de A .

Observación: En el futuro usaremos la notación $\bar{A} = A - \langle A \rangle$ para simplificar la expresión del momento centrado.

Enunciaremos ahora el principio de incertidumbre y lo demostraremos.

Teorema 5.1. Principio de Incertidumbre General

Sea un sistema cuántico con dos observables con operadores A y B respectivamente, y sea $|\Psi\rangle$ un estado cualquiera. Entonces las incertidumbres cumplen la expresión:

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \Psi | [A, B] | \Psi \rangle|$$

Definición 5.4. Definimos los siguientes estados:

$$\begin{aligned} \mathbb{X} &= A |\Psi\rangle \\ \mathbb{Y} &= iB |\Psi\rangle \end{aligned}$$

Esta es una selección arbitraria con vistas al futuro: ahora gracias a ese factor i , hay un signo negativo en la desigualdad de Cauchy-Schwarz:

$$2|X||Y| \geq |\langle X|Y\rangle + \langle Y|X\rangle| \implies 2\sqrt{\langle A\rangle^2 \langle B\rangle^2} = 2\Delta A \Delta B \geq |\langle \Psi | AB | \Psi \rangle - \langle \Psi | BA | \Psi \rangle|$$

Supongamos que A, B tienen valor estimado nulo. Entonces podemos simplificar la ecuación anterior usando el conmutador:

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \Psi | [A, B] | \Psi \rangle|$$

En particular, esta inecuación se debe cumplir para \bar{A} y \bar{B} , $\forall A, B$:

$$\Delta \bar{A} \Delta \bar{B} \geq \frac{1}{2} |\langle \Psi | [\bar{A}, \bar{B}] | \Psi \rangle|$$

Tratemos de operar esta expresión hasta obtener el resultado para A y B . Primero, operemos el conmutador:

$$\begin{aligned} [\bar{A}, \bar{B}] &= \overline{AB} - \overline{BA} = (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) - (B - \langle B \rangle)(A - \langle A \rangle) = \\ &= AB - BA - 0 = [A, B] \end{aligned}$$

Segundo, recordamos que como $(\Delta A)^2 = E(A^2) - E(A)^2$ y $E(A - \langle A \rangle) = 0$:

$$\Delta(\bar{A})^2 = E((A - \langle A \rangle)^2) - 0 = E(A^2) + \langle A \rangle^2 - 2\langle A \rangle E(A) = E(A^2) - \langle A \rangle^2 = (\Delta A)^2$$

Sustituyendo, hemos terminado:

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle \Psi | [A, B] | \Psi \rangle|$$

□

CAPÍTULO 6

Entrelazamiento cuántico

6.1. Combinando sistemas cuánticos

En el apartado anterior hemos visto cómo definir un sistema cuántico con varios observables y por ende varios operadores. Hemos visto que la condición de que los operadores conmuten es necesaria y suficiente para asegurar que existe una base de estados que son autovectores simultáneos del sistema.

En física clásica, esto bastaría para describir por completo todos los sistemas compuestos, formados por dos sistemas separados. Sin embargo, como veremos próximamente, en física cuántica hay una diferencia entre un sistema con varios observables, denotemos S_{AB} , y un sistema generado al componer dos sistemas, S_A y S_B . Para verlo, empecemos definiendo el espacio que se generaría al componer los sistemas.

Definición 6.1. Espacio de estados producto

Supongamos dos sistemas cuánticos A y B, cada uno con espacio de estados S_A y S_B respectivamente. Definimos el **espacio producto** de estados como:

$$S_{AB} = S_A \otimes S_B$$

Notamos que el espacio producto queda determinado totalmente por los autovectores de A y B. De hecho, cada elemento de S_{AB} está determinado por un par de estados (a, b) . Por tanto, normalmente usaremos la notación $|ab\rangle = |a\rangle \otimes |b\rangle$ para referirnos a los estados de un espacio producto. Estos estados cuyo producto tensorial da los estados se denotan **estados simples**.

Si este sistema producto es un sistema cuántico, debe de cumplir todos los principios y leyes que hemos definido en los apartados anteriores. En concreto, debe de tener operadores que actúen sobre sus estados para transformarlos. Veremos ahora que estos operadores se pueden definir como el producto de operadores de los subistemas.

Definición 6.2. Operadores de sistema producto

Sea un sistema cuántico $S_{AB} = S_A \otimes S_B$. Entonces podemos definir los operadores L del sistema como productos de los operadores $\sigma \in M_A$ y $\tau \in M_B$ de los sistemas individuales:

$$L = (\sigma \otimes \tau)$$

Por tanto, para operar sobre el estado compuesto $|ab\rangle$ hay que realizar la operación:

$$L|ab\rangle = (\sigma \otimes \tau)(|a\rangle \otimes |b\rangle) = (\sigma \otimes |a\rangle)(\tau \otimes |b\rangle) = v \otimes w = |vw\rangle$$

donde como $v \in S_A$ y $w \in S_B$, $|vw\rangle$ es otro estado producto de estados simples, por lo que está bien definido. Sin embargo, por claridad y simplicidad, nos limitaremos en general a la notación $L|ab\rangle$.

Recordemos que los operadores direccionales del *spin* no conmutaban, por lo que no podían ser medidos simultáneamente sin incertidumbre. Nos surge entonces la cuestión de si podemos decir algo sobre la conmutabilidad de los operadores en un sistema producto.

Lema 6.1. Conmutación de operadores producto

Sea un sistema producto $S_{AB} = S_A \otimes S_B$ con la definición y notación dadas anteriormente. Entonces $\forall \sigma \in M_A, \tau \in M_B$ se cumple $[(\sigma \otimes I), (I \otimes \tau)] = 0$.

Demostración. Sea un vector cualquiera $|ab\rangle \in S_{AB}$. Podemos calcular entonces el conmutador para ese vector:

$$\begin{aligned} (\sigma \otimes I)(I \otimes \tau)|ab\rangle - (I \otimes \tau)(\sigma \otimes I)|ab\rangle &= (\sigma \otimes I)(|a\rangle \otimes \tau|b\rangle) - (I \otimes \tau)(\sigma|a\rangle \otimes |b\rangle) = \\ &= (\sigma \otimes \tau)(|ab\rangle - |ab\rangle) = 0 \end{aligned}$$

Por tanto, podemos medir simultáneamente el valor de observables en ambas componentes del sistema sin ningún tipo de incertidumbre, independientemente de lo que ocurra internamente en cada subsistema.

En general, usaremos la notación simplificada $\sigma|ab\rangle$ para $(\sigma \otimes I)(|a\rangle \otimes |b\rangle)$ cuando usemos operadores del subsistema A sobre el sistema producto. Análogamente para el subsistema B.

Esta definición de los sistemas producto, aunque simple, sienta las bases para poder estudiar uno de los fenómenos más famosos de la física cuántica: el **entrelazamiento**. Podremos definir el entrelazamiento cuántico usando la correlación corrientemente empleada en estadística.

Definición 6.3. Correlación

Sean dos sistemas cuánticos A y B con operadores σ_A y σ_B respectivamente. Entonces definimos la correlación entre A y B como:

$$Corr(A, B) := \langle \sigma_A \sigma_B \rangle - \langle \sigma_A \rangle \langle \sigma_B \rangle$$

Siendo cuando $Corr(A, B) = 0$ cuando decimos que las variables están incorreladas.

Para ver claramente la diferencia entre un espacio producto y un espacio múltiple, veremos que existen estados generados por la suma de estados simples que no son simples. Es decir, que el espacio producto no es cerrado con la suma.

Sea un espacio de estados producto $S_{AB} = S_A \otimes S_B$. Entonces dada una base de autovectores de la forma $|ab\rangle$, todo vector $|\Psi\rangle \in S_{AB}$ se puede expresar como combinación lineal de los mismos, de la forma:

$$|\Psi\rangle = \sum_{a,b} \psi(ab) |ab\rangle$$

Donde el estado $|ab\rangle$ se puede expresar como el producto tensorial de los estados $|a\rangle \in S_A$ y $|b\rangle \in S_B$. En el caso concreto de que tanto A como B representen *spins*, tenemos:

$$|ab\rangle = (\alpha_u |u\rangle + \alpha_d |d\rangle) \otimes (\beta_u |u\rangle + \beta_d |d\rangle) = \alpha_u \beta_u |uu\rangle + \alpha_u \beta_d |ud\rangle + \alpha_d \beta_u |du\rangle + \alpha_d \beta_d |dd\rangle$$

Donde $\{|uu\rangle, |ud\rangle, |du\rangle, |dd\rangle\}$ son base del espacio producto. Sin embargo, no todas estas constantes son necesarias. Usando condiciones de normalización, podemos reducir el número de las mismas. En concreto, por los principios de la física cuántica de cada sistema por separado:

$$\alpha_u \alpha_u^* + \alpha_d \alpha_d^* = 1$$

$$\beta_u \beta_u^* + \beta_d \beta_d^* = 1$$

Teniendo en cuenta además que el factor de fase, como hemos comprobado, no influye, averiguamos que tan solo necesitamos 4 parámetros para definir el sistema.

Ahora asumamos el caso en el que tenemos un estado múltiple con la misma dimensión de espacio de estados, pero no lo definimos como producto de dos sistemas sino por sí mismo, como hicimos en el anterior apartado. La diferencia clave es que ahora solo tenemos una condición de normalización:

$$\psi_{uu} \psi_{uu}^* + \psi_{ud} \psi_{ud}^* + \psi_{du} \psi_{du}^* + \psi_{dd} \psi_{dd}^* = 1$$

Por tanto, este sistema tiene un total de 6 parámetros reales, siguiendo el razonamiento anterior. Esta diferencia parece muy sutil a primera vista, pero nos permite definir un fenómeno extraordinario: podemos encontrar estados que no existen como producto de estados simples. Por ejemplo, uno de los más famosos: el estado *singlet* y sus hermanos los estados *triplet* T_1 , T_2 y T_3 .

Definición 6.4. Estado singlet

$$|sing\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle - |du\rangle)$$

$$|T_1\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle + |du\rangle)$$

$$|T_2\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}(|uu\rangle + |dd\rangle)$$

$$|T_3\rangle := \frac{1}{\sqrt{2}}(|uu\rangle - |dd\rangle)$$

Lema 6.2. Singlet no es producto de estados simples.

Supongamos que existen dos estados simples, $|a\rangle \in A$ y $|b\rangle \in B$, tales que $|sing\rangle = |a\rangle \otimes |b\rangle$. Entonces se debe de cumplir:

$$\alpha_u \beta_u |uu\rangle + \alpha_u \beta_d |ud\rangle + \alpha_d \beta_u |du\rangle + \alpha_d \beta_d |dd\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle - |du\rangle)$$

Como $\alpha_u \beta_u = 0$, tenemos que o bien $\alpha_u = 0$ o bien $\beta_u = 0$. Supongamos que $\alpha_u = 0$. Entonces $\alpha_u \beta_d = 0 \neq \frac{1}{\sqrt{2}}$. Como es análogo para $\beta_u = 0$, alcanzamos un absurdo. Entonces $|sing\rangle$ no es un estado producto.

La demostración para los estados *triplet* es análoga. Por tanto, hemos encontrado una importante distinción, aparentemente incongruente, entre dos aproximaciones clásicamente idénticas. Sin embargo, la clave de este fenómeno de entrelazamiento es que, por extraño que sea, es real y ha sido demostrado empíricamente (Enlaces a experimentos).

Veamos algunas de las propiedades más interesantes del estado singlet. En concreto, el valor esperado de los operadores de A para el estado $|sing\rangle$. Para ello, lo veremos en los operadores de la base $\{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z, I\}$.

$$\begin{aligned} \sigma_z &= \langle sing | \sigma_z | sing \rangle = \langle sing | (\sigma_z \otimes I) \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|u\rangle \otimes |d\rangle - (|d\rangle \otimes |u\rangle)) \right) = \langle sing | \frac{1}{\sqrt{2}}(|ud\rangle + |du\rangle) = \\ &= \frac{1}{2}(\langle ud | ud \rangle + \langle ud | du \rangle - \langle du | ud \rangle - \langle du | du \rangle) = \frac{1}{2}(1 + 0 - 1) = 0 \end{aligned}$$

Curiosamente, si repetimos para los otros dos operadores σ_x y σ_z (obviamos la identidad), vemos que el resultado es también que el valor esperado es nulo. Es decir, es equiprobable obtener el valor $\sigma = +1$ que $\sigma = -1$ en los tres operadores que determinan el *spin* de A.

Este hecho implica físicamente que dado el estado del sistema conjunto S_{AB} que lo determina por completo según nuestra teoría, es equiprobable obtener cualquier

resultado midiendo solo en el sistema A. Es decir, *no tenemos ninguna información sobre las componentes del sistema*. Por tanto, el estado singlet pertenece a una clase especial de estados: los **estados máximamente entrelazados**.

Principio 7. Principios de Entrelazamiento

- 1) *Un estado máximamente entrelazado es una descripción completa del estado combinado. Nada más se puede saber del mismo*
- 2) *En un estado máximamente entrelazado, no se tiene información de los subsistemas individuales.*

Cabe notar, sin embargo, que esto no significa que los estados entrelazados no aporten información. Realmente, lo que implica es que solamente nos aportan información sobre observables relacionados a operadores que no pertenecen estrictamente a cada sistema. Por ejemplo, estudiemos el efecto del operador producto $\sigma_z \tau_z$ sobre el estado singlet.

$$\sigma_z \tau_z |sing\rangle = \sigma_z \left(\frac{1}{\sqrt{2}} (-|ud\rangle - |du\rangle) \right) = \frac{1}{\sqrt{2}} (-|ud\rangle + |du\rangle) = -|sing\rangle$$

Es decir, $|sing\rangle$ es un autovector de $\sigma_z \tau_z$ con autovalor $sing = -1$, lo que tiene el significado físico añadido de que *las mediciones en A y B deben ser opuestas*. Veamos el ejemplo más importante: definimos un operador que mide todas las componentes simultáneamente en los dos subsistemas A y B:

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau} = \sigma_x \tau_x + \sigma_y \tau_y + \sigma_z \tau_z$$

Este observable claramente no puede ser medido con la combinación de tres medidas independientes en cada sistema, puesto que conocemos que los operadores de A y B no conmutan internamente. Sin embargo, necesariamente debe ser medible en el sistema compuesto, ya que cada par de operadores conmuta y por tanto la suma conmuta. Probemos a encontrar los autovalores de este operador.

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau} |sing\rangle = \sigma_x \tau_x |sing\rangle + \sigma_z \tau_z |sing\rangle + \sigma_y \tau_y |sing\rangle = -3 |sing\rangle$$

Por lo que $|sing\rangle$ es autovector con autovalor $sing = -3$. Hagamos ahora lo mismo con los estados *triplet*.

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{\tau} |T_1\rangle = \sigma_x \tau_x |T_1\rangle + \sigma_z \tau_z |T_1\rangle + \sigma_y \tau_y |T_1\rangle = |T_1\rangle - |T_1\rangle + |T_1\rangle = -1 |T_1\rangle$$

Con lo que vemos que $|T_1\rangle$ es autovector con autovalor $T_1 = -1$. De hecho, si repetimos el proceso análogo con los otros dos estados *triplet*, observamos que cada uno hace positiva una de las tres componentes de la suma, por lo que los tres son autovectores del autovalor degenerado $T = -1$. Esta asociación deja clara la razón de ser de los nombres *singlet* y *triplet*.

CAPÍTULO 7

El principio de incertidumbre de Heisenberg

Hasta ahora hemos definido nuestros principios para sistemas muy sencillos que tienen un número limitado de observables y, por tanto, un número finito de dimensiones en su espacio de estados. Sin embargo, el objetivo último de la física es describir los sistemas del mundo real, y dado ese objetivo sería casi irresponsable no extender estos conceptos al sistema mecánico por excelencia: el movimiento de una partícula con una cierta masa.

No nos detendremos en este trabajo a evaluar los motivos por los que los Principios de la Mecánica Cúantica dados son extensibles a este problema, dado que se salen del ámbito del mismo. Nos limitaremos en definir las herramientas matemáticas que son empleadas para hacer la asociación con los conceptos anteriores y en la derivación de las consecuencias lógicas de los Principios al ser aplicados a este nuevo problema.

7.1. Sistemas continuos

Nuestra primera observación debería ser que la dimensión del espacio de estados es **infinita**. Suponiendo que las partículas trazan curvas continuas y diferenciables en el espacio (lo que es una suposición común en física), para identificar su movimiento requeriríamos tan solo una base de Frenet-Sevret. Es decir, una base de posiciones y velocidades en cada una de las direcciones del espacio tridimensional. Como la masa de una partícula es de vital influencia en la física, se suele dar una versión de la misma base en la que se sustituyen las velocidades por los momentos lineales. La posición se denota \mathbf{X} y el momento \mathbf{P} .

Tanto la posición como el momento tienen infinitos valores posibles, por lo que nuestros conceptos anteriores definidos sobre bases finitas no se aplican directamente. Daremos ahora una caracterización del espacio de estados usando un espacio vectorial de funciones. Recordemos que podíamos expresar un estado de un operador L en función de su función de onda y los autovectores de L .

$$|\Psi\rangle = \sum_{\lambda} \psi(\lambda) |\lambda\rangle$$

La función de onda ψ aporta las coordenadas del estado en la base de autovectores de L . Por tanto, basta para identificar unívocamente el estado. Observamos que ψ es una función compleja que manda cada autovalor a la proyección de Ψ sobre el autovector asociado:

$$\begin{aligned} \psi : \mathbb{R} &\longrightarrow \mathbb{C} \\ \lambda &\longrightarrow \langle \lambda | \Psi \rangle \end{aligned}$$

La variable λ es siempre real, ya que es el autovalor de un cierto observable.

Lema 7.1. Espacio de funciones

El conjunto $\mathbb{L} = \{\psi : \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}\}$ es un espacio vectorial con la suma de funciones sobre el cuerpo \mathbb{C} .

Demostración. *Basta ver que \mathbb{L} es un grupo conmutativo con la suma y que es cerrado con el producto por complejos.*

La consecuencia lógica directa de esto es que podemos asociar las funciones de onda ψ a vectores $|\Psi\rangle$ de \mathbb{L} . En concreto, para cada $x \in \mathbb{R}$ tenemos:

$$\psi(x) = |\Psi\rangle ; \psi^*(x) = \langle \Psi |$$

con ψ y $\psi^* \in \mathbb{L}$.

Usemos esta relación para redefinir los conceptos que hemos empleado anteriormente.

Definición 7.1. Producto escalar de funciones

Consideremos los vectores $|\Psi\rangle$ y $|\Phi\rangle$ en el espacio de estados \mathbb{L} definido más arriba. Entonces definimos su producto escalar como:

$$\langle \Phi | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) \psi(x) dx$$

Que es el análogo continuo del sumatorio que hemos usado hasta ahora.

Definición 7.2. Densidad de probabilidad

Sea un observable con función de onda ψ sobre una variable continua x . La probabilidad de que se encuentre en el estado x al medir es $P(x) = \psi^*(x)\psi(x)$ según los principios formulados anteriormente. Podemos tomar esto como una densidad de probabilidad definida para todos los valores posibles de x . Entonces la probabilidad de que la posición x esté en el intervalo (a,b) sería:

$$P(x \in (a, b)) = \int_a^b P(x)dx = \int_a^b \psi^*(x)\psi(x)dx$$

Podemos reescribir entonces la condición de normalización del sistema como:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = 1$$

Hasta ahora, podíamos usar el delta de Kronecker para seleccionar solamente un estado en operaciones. Por ejemplo, $\langle \lambda_i | \lambda_j \rangle = \delta_{ij} = 1$ solo si $i = j$. Nos gustaría poder hacer algo similar para el caso continuo, para lo que vamos a emplear la función delta de Dirac.

Definición 7.3. Delta de Dirac

Podemos definir el **delta de Dirac** como una medida δ_x de un cierto conjunto X tal que dado $A = \{x_0\} \subset \mathbb{X}$:

$$\delta_{x_0}(x) = 1_A(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x = x_0 \\ 0 & \text{si } x \neq x_0 \end{cases}$$

Por tanto, dada una función f continua y con soporte compacto sobre el conjunto de la medida, la integral de Lebesgue cumple:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta_{x_0}(dx) = f(x_0)$$

Esta propiedad se suele escribir en física (con un cierto abuso de notación) considerando a la delta de Dirac como un función, de la siguiente manera:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta(x - x_0)dx = f(x_0)$$

Claramente esto nos permite realizar la "selección" de un solo estado de los infinitos posibles, como buscamos.

Lema 7.2. Integración por partes

Sean F y $G \in \mathbb{L}$ funciones integrables que cumplen

$$(1) \int_{-\infty}^{\infty} |F|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |G|^2 dx = 1$$

Entonces:

$$(2) \int_{-\infty}^{\infty} F \frac{dG}{dx} dx = - \int_{-\infty}^{\infty} G \frac{dF}{dx} dx$$

Demostración. Comenzamos por la expresión habitual de la integración por partes:

$$\int_a^b F \frac{dG}{dx} dx = FG \Big|_a^b - \int_a^b G \frac{dF}{dx} dx$$

Observamos que ambas funciones deben de tender a 0 en los extremos para que se cumpla la hipótesis (1). Supongamos que no fuera cierto. Entonces como $|F|$ es estrictamente positiva, $\exists N \int_N^\infty |F|^2 dx = \infty$ y la función no sería integrable. Luego

$$\forall \epsilon > 0 \exists N \text{ t.q. } \int_N^\infty |F|^2 dx \leq \epsilon$$

Entonces existe un sucesión de valores crecientes (x_n) tal que $F(x_n) = \frac{1}{n}$. Entonces:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} F(x_n) = 0$$

Notamos que también se cumple por el lado izquierdo con una sucesión y_n decreciente apropiada. El argumento es análogo para la función G . Reescribimos:

$$(3) \int_{y_n}^{x_n} F \frac{dG}{dx} dx = FG \Big|_{y_n}^{x_n} - \int_{y_n}^{x_n} G \frac{dF}{dx} dx$$

Pasando al límite el término FG :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} FG \Big|_{y_n}^{x_n} = \lim_{n \rightarrow \infty} (FG(x_n) - FG(y_n)) = \lim_{n \rightarrow \infty} (F(x_n)G(y_n) - F(x_n)G(y_n)) = 0$$

Por tanto pasando al límite (3) obtenemos (2). \square

7.2. Operadores sobre el espacio de funciones

Hasta ahora, hemos redefinido los conceptos relativos a los estados con éxito. Sin embargo, los estados no son el concepto fundamental que subyace la mecánica cuántica. Como hemos visto en apartados anteriores, son los operadores lineales los que determinan el comportamiento de los sistemas. Faltaría entonces analizar cuáles serían nuestros operadores lineales en el espacio de funciones \mathbb{L} .

Según nuestra definición, serían todos aquellos operadores $M : \mathbb{L} \rightarrow \mathbb{L}$ que preservan la suma y el producto. Dos ejemplos serían los operadores \mathbf{X} y \mathbf{D} definidos de la siguiente manera:

$$\mathbf{X}\psi(x) = x\psi(x)$$

$$\mathbf{D}\psi(x) = \frac{d\psi(x)}{dx}$$

Es trivial demostrar que ambos son operadores lineales sobre el espacio de funciones. Lo que hemos de comprobar ahora es si estos operadores son hermíticos. Recordemos que si un operador M es hermítico, entonces $\langle \Psi | M | \Phi \rangle = \langle \Phi | M | \Psi \rangle$, ya que entonces $M = M^\dagger$. Comprobemos para los operadores que hemos definido:

$$\begin{aligned} \langle \Phi | \mathbf{X} | \Psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) x \psi(x) dx \implies \langle \Phi | \mathbf{X} | \Psi \rangle^* = \int_{-\infty}^{\infty} x (\phi^*(x) \psi(x))^* dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} x \phi(x) \psi^*(x) dx = \langle \Psi | \mathbf{X} | \Phi \rangle \quad \square \end{aligned}$$

Por lo que \mathbf{X} es hermítico y se corresponde con un observable. En cambio, para \mathbf{P} :

$$\langle \Phi | \mathbf{D} | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) \frac{d\psi(x)}{dx} dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x) \frac{d\phi^*(x)}{dx} dx = - \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{d\phi(x)}{dx} dx = - \langle \Psi | \mathbf{D} | \Phi \rangle$$

Por lo que no es hermítico, pero está muy cerca. Es un operador que se dice *antihermítico*. Sin embargo, basta definir un segundo operador de la forma $\mathbf{P} = -i\hbar\mathbf{D}$. Esta elección es relativamente arbitraria, ya que en principio no hace falta el factor \hbar , y se podría haber multiplicado simplemente por i en lugar de $-i\hbar$. Sin embargo, elegimos esa definición concreta ya que tiene sentido físico y la usaremos posteriormente.

Claramente, por definición el operador \mathbf{P} es hermítico.

7.3. El estado de una partícula

Como hemos dicho anteriormente, para definir totalmente el movimiento de una partícula con masa cuyo movimiento sigue una trayectoria continua y diferenciable, basta con conocer dos variables: la posición con respecto al tiempo $\vec{x}(t)$ y el momento con respecto al tiempo $\vec{p}(t)$. Veamos cómo se relacionan estos dos observables con los operadores \mathbf{X} y \mathbf{P} .

Definición 7.4. Posición

Partimos de la suposición de que el operador que determina la posición es \mathbf{X} . Esto se basa en la observación de que los autovalores del mismo son distintos valores de la posición:

$$\mathbf{X} | \Psi \rangle = x_0 | \Psi \rangle, \text{ donde } x_0 \in \mathbb{R}$$

Si expresamos esto en términos de la función de onda, obtenemos:

$$x\psi(x) = x_0\psi(x) \implies (x - x_0)\psi(x)$$

Lo cual significa que la función de onda se anula necesariamente en todos los puntos excepto en $x = x_0$. Podemos expresar esto en términos del delta de Dirac:

$$\psi(x) = \delta(x - x_0)$$

Este resultado justifica que, dado un estado que representa la posición x_0 , la función de onda colapsa por completo al estado con autovalor x_0 , como sería de esperar. Formalmente, la componente sobre x_0 de cualquier estado sería:

$$\langle x_0 | \Psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x_0) dx = \psi(x_0)$$

Como no hemos puesto ninguna condición sobre el estado $|x_0\rangle$, el resultado es general y tenemos que $\forall x \in \mathbb{R}, |\Psi\rangle \in \mathbb{L}$:

$$\langle x | \Psi \rangle = \psi(x)$$

Por lo que en general la función de onda es la proyección del estado sobre los autovalores de la posición.

Definición 7.5. Momento

Como el lector avisado puede haber deducido, el momento como observable estará relacionado con el operador $\mathbf{P} = -i\hbar\mathbf{D}$ que hemos definido antes. Esta relación tiene sentido adicional porque el momento es, *grosso modo*, la derivada de la posición. Podemos expresar la definición del operador en términos de la función de onda:

$$\mathbf{P}\psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx}$$

Repitamos el proceso que hicimos con la posición, y tratemos de derivar información útil a partir de suponer un estado que sea autovector del operador:

$$\mathbf{P}ket\Psi = p|\Psi\rangle$$

Lo cual, reescribiendo en términos de la identificación con la función de onda, se convierte en:

$$-i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} = p\psi(x) \implies \frac{d\psi(x)}{dx} = \frac{ip}{\hbar}\psi(x)$$

Lo cual es una ecuación diferencial de primer orden, en la cual la solución general es:

$$\psi_p(x) = Ae^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

Donde hemos añadido un subíndice p para recordar que $\psi_p(x)$ es el autovector del espacio de funciones con autovalor p . Se toma el valor $A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$ para que la función de onda esté normalizada, por lo que podemos escribir:

$$\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{ipx}{\hbar}}$$

Una vez definidas formalmente las funciones de onda y por tanto los estados de los observables posición y momento, podemos explorar algunas de las interesantes relaciones que surgen naturalmente entre ambos. Por ejemplo, las proyecciones de uno sobre otro son simétricas sobre i :

$$\begin{aligned}\langle x|p\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(s-x) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{ips}{\hbar}} ds = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{ipx}{\hbar}} \\ \langle p|x\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{ips}{\hbar}}\right)^* \delta(s-x) ds = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{-ipx}{\hbar}}\end{aligned}$$

Es decir, son conjugadas complejas:

$$\langle x|p\rangle^* = \langle p|x\rangle$$

7.4. Transformada de Fourier

Notemos que con la definición anterior, tenemos las funciones de onda de momento y posición con respecto a la variable x de la posición. Esto significa que conocemos la probabilidad de hallar la partícula en una posición dada:

$$P(x) = \psi^*(x)\psi(x)$$

Sin embargo, no podemos hacer lo mismo con el momento, ya que necesitaríamos una expresión de la función de onda del momento en función de la variable p :

$$P(p) = |\langle \mathbf{P}|\Psi\rangle|^2 = |\bar{\psi}(p)|^2$$

Necesitamos por tanto una forma de transformar las funciones de onda entre estar en función de la posición y del momento. Como veremos ahora, resulta que efectivamente esa transformación existe: $\psi(x)$ y $\bar{\psi}$ son transformadas de Fourier.

Teorema 7.1. Transformada de Fourier

Sea el sistema cuántico definido por una partícula con masa en movimiento, donde ψ es la función de onda de la posición y $\bar{\psi}$ es la función de onda del momento, de la forma definida más arriba. Entonces:

$$\begin{aligned}\bar{\psi}(p) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{\frac{-ipx}{\hbar}} \psi(x) \\ \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dp e^{\frac{ipx}{\hbar}} \bar{\psi}(p)\end{aligned}$$

Demostración. Primero haremos una pequeña triquiñuela útil redefiniendo el operador identidad (Cohen-Tannoudji et al. 1973 p. 137 D-35)[6]:

$$\forall x \in \mathbb{R}, |\Psi\rangle \in \mathbb{L} \quad \int (dx |x\rangle \langle x|) |\Psi\rangle = \int dx |x\rangle \langle x|\Psi\rangle = \sum_{\langle x|\Psi\rangle \neq 0} x |x\rangle = |\Psi\rangle$$

Entonces:

$$\mathbf{I} = \int dx |x\rangle \langle x|$$

Esta definición se puede repetir de forma análoga en base al momento. Reescribimos ahora la definición de la función de onda del momento en un estado cualquiera Ψ , y empleamos los resultados anteriores para $\langle p|x\rangle$ y la definición de función de onda:

$$\bar{\psi}(p) = \langle p|\mathbf{I}|\Psi\rangle = \int dx \langle p|x\rangle \langle x|\Psi\rangle = \int dx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \psi(x)$$

De forma análoga obtenemos la ecuación para $\psi(x)$.

Ahora que tenemos la relación entre los operadores de momento y posición, podemos tratar de encontrar la expresión más famosa de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo.

Teorema 7.2. Ecuación de Schrödinger

La ecuación de Schrödinger para la posición de una partícula no relativista es:

$$i\hbar \frac{\delta \Psi(x)}{\delta t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\delta^2 \Psi(x)}{\delta x^2} + V(x)\Psi(x)$$

Demostración. Partimos de la ecuación general de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$\frac{\delta |\Psi\rangle}{\delta t} = -\frac{i}{\hbar} H |\Psi\rangle$$

Identificando el ket $|\Psi\rangle$ con la función de onda $\Psi(x)$ de la forma que hemos visto anteriormente y despejando:

$$i\hbar \frac{\delta |\Psi(x)\rangle}{\delta t} = H |\Psi(x)\rangle$$

Ahora tomando el Hamiltoniano como la definición habitual de la energía, es decir:

$$H = \frac{1}{2}mv^2 + V(x) = \frac{1}{2m}p^2 + V(x)$$

Donde el primer término representa la energía cinética y el segundo es una función que determina la potencial (para generalizar las distintas fuerzas que pueden estar actuando). Usando la relación entre la posición y el momento:

$$H = \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\delta}{\delta x} \right)^2 + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\delta^2}{\delta x^2} + V(x)$$

Con lo que sustituyendo en la ecuación general hemos terminado. \square

Una vez llegados a este punto, estamos preparados para dar una de las respuestas más famosas e importantes de la historia de la ciencia. Y la pregunta es: ¿Podemos medir simultáneamente la posición y el momento de una partícula?. O, en términos más específicos: ¿Los operadores de posición y momento conmutan?.

Teorema 7.3. *Los operadores posición y momento no conmutan*

Sea un sistema cuántico formado por una partícula no relativista. Sea \mathbf{X} el operador que determina su posición y \mathbf{P} el que determina el momento. Entonces:

$$[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar \neq 0$$

Demostración. Empecemos por recordar las definiciones de la actuación de los operadores \mathbf{X} y \mathbf{P} :

$$\mathbf{X}\psi(x) = x\psi(x) ; \mathbf{P}\psi(x) = -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx}$$

Para un vector cualquiera $\psi(x) \in \mathbb{L}$, tenemos entonces que el operador \mathbf{XP} actúa de la forma:

$$\mathbf{XP}\psi(x) = \mathbf{X}(\mathbf{P}\psi(x)) = -i\hbar \mathbf{X} \frac{d\psi(x)}{dx} = -i\hbar \frac{xd\psi(x)}{dx}$$

De forma análoga:

$$\mathbf{PX}\psi(x) = \mathbf{P}(\mathbf{X}\psi(x)) = \mathbf{P}(x\psi(x)) = -i\hbar \left(\psi(x) + \frac{xd\psi(x)}{dx} \right)$$

Por tanto, podemos calcular el conmutador:

$$(\mathbf{XP} - \mathbf{PX})\psi(x) = i\hbar\psi(x) \implies [\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar$$

Las consecuencias de este resultado son fascinantes. Implican que para todo sistema cuántico de una partícula, conociendo la posición no podemos determinar con exactitud el momento, y viceversa. Es decir, siempre existe una incertidumbre sobre el valor de la otra variable. Esta incertidumbre viene dada por el siguiente resultado fundamental de la Física moderna.

Teorema 7.4. Principio de Incertidumbre de Heisenberg

Sea un sistema cuántico formado por una partícula con masa en movimiento. Entonces no se pueden conocer simultáneamente los valores exactos de la posición \mathbf{X} y momento \mathbf{P} de la misma. La cota para la incertidumbre generada viene dada por:

$$\Delta\mathbf{X}\Delta\mathbf{P} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Demostración. Usamos el Principio de la Incertidumbre General tomando como operadores \mathbf{X} y \mathbf{P} . Entonces, sustituyendo el valor del conmutador (Teorema 5.1):

$$\Delta\mathbf{X}\Delta\mathbf{P} \geq \frac{1}{2} |\langle \Psi | [\mathbf{X}, \mathbf{P}] | \Psi \rangle| = \frac{1}{2} |\langle \Psi | i\hbar | \Psi \rangle| = \frac{\hbar}{2} \quad \square$$

CAPÍTULO 8

Conclusiones

Durante el transcurso de este trabajo, hemos explorado los principios matemáticos subyacentes en una de las teorías de la Física más idealizadas en el imaginario popular como abstractas, arcanas e inaccesibles. Si bien es cierto que los resultados de la Mecánica Cuántica son extraños y contraintuitivos para personas ajenas a la materia y acostumbradas a pensar del mundo físico de una cierta manera, tras estudiar las causas matemáticas subyacentes de estos fenómenos uno saca las conclusiones diametralmente contrarias.

Los resultados de la Mecánica Cuántica vienen directamente determinados por la estructura matemática que la subyace. Los teoremas extraordinarios, los experimentos con resultados inesperados y las extrañas relaciones entre conceptos no surgen mágicamente de los datos de un Dios caprichoso, sino que salen a la superficie de manera natural una vez las matemáticas interpretan y organizan la información que conocemos experimentalmente sobre los procesos del mundo que nos rodea.

Como estudiante y persona naturalmente curiosa, me siento enormemente agradecido por haber podido realizar este trabajo que, como a Alicia tantos años atrás, me ha transportado mágicamente a un mundo lejano donde todo es familiar pero ligeramente desconcertante, y cuya belleza y originalidad finalmente he aprendido a comprender.

Me gustaría agradecer especialmente a mi tutor: su apoyo y su dedicación durante todo el curso del trabajo, incluso cuando las circunstancias no eran propicias y las cosas no salían como esperábamos. Si bien han sido los Goldsteins, Susskinds y Cohens quienes me han revelado los secretos de la física, ha sido Daniel Faraco quien me ha ayudado a comprenderlos y organizarlos, por lo que le estaré siempre agradecido.

Bibliografía

- [1] SUSSKIND, LEONARD & FRIEDMAN, ART: The Theoretical Minimum: What You Need to Know to Start Doing Physics (2013) ISBN: 978-0-465-02811-5
- [2] SUSSKIND, LEONARD & FRIEDMAN, ART: Quantum Mechanics. The Theoretical Minimum (2014) ISBN: 978-0-465-03667-7
- [3] GOLDSTEIN, POOL & SAFKO: Classical Mechanics - 3rd ed. (2000) ISBN: 978-0-201-65702-9
- [4] SUSSKIND, LEONARD: Course on Classical Mechanics. Classical Mechanics. Stanford University (2011), URL: <https://theoreticalminimum.com/courses/classical-mechanics/2011/fall>
- [5] SUSSKIND, LEONARD: Course on Quantum Mechanics. Quantum Mechanics. Stanford University (2012), URL: <https://theoreticalminimum.com/courses/quantum-mechanics/2012/winter>
- [6] COHEN-TANNOUJJI, C & DIU, B & LALOE, F: Quantum Mechanics Vol 1. (1973) ISBN: 978-0-47-16433-3

APÉNDICE A

Observaciones sobre el Hamiltoniano

En la sección 4 demostramos que asumiendo $z = i$ en la ecuación (4.1) podíamos afirmar que H debía ser hermítica. Sin embargo, nunca justificamos satisfactoriamente cómo llegábamos a esa selección. Daremos ahora un argumento heurístico para ello, partiendo de que H es hermítica y no nula. Entonces como $U(t)$ es unitario, y de nuevo expandiendo a primer orden:

$$I = U(t)U^\dagger(t) = (I + a\epsilon H + bi)(I + a\epsilon H^\dagger - bi\epsilon H^\dagger) = I + a\epsilon(H + H^\dagger) + bi\epsilon(H - H^\dagger)$$

Como H es hermítica, el tercer término se anula. Para que se anule el segundo, entonces, necesariamente la parte real de z debe anularse. Es decir, z debe ser imaginario. Ahora, como H es hermítica, sus autovalores deben ser reales. Es decir, si partimos de un estado $|\Psi(0)\rangle = E_j$ que sea autovector de H , entonces:

$$H|\Psi(0)\rangle = E_j|E_j\rangle$$

Donde E_j es real. Por la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (sustituyendo adecuadamente para nuestro $z = bi$):

$$|\Psi(t)\rangle = e^{\frac{1}{b\hbar}iE_j t} |E_j\rangle$$

Para que se cumpla el Principio de Probabilidad, se debe cumplir que $||\Psi(t)\rangle| = 1$. Vemos que esto es cierto para todo valor de $b \neq 0$. De hecho, el factor b simplemente modifica la fase de los autovectores del sistema. Como esto no afecta al comportamiento general del mismo, realmente se puede elegir todo valor $b \neq 0$. En concreto tomar $Im(z)$ con $|b| = 1$ permite que la ecuación anterior solamente dependa de constantes y los autovalores de los autovectores de H . Entonces, por convención, se toma $z = i$.

Notamos que es perfectamente posible tomar un valor no imaginario de z , pero entonces no se puede garantizar que el Hamiltoniano tenga la condición de hermiticidad. Por ejemplo, si se toma $z = 1$, la condición sería que $H = -H^\dagger$, y entonces

el Hamiltoniano sería *anti-hermítico* (Cohen-Tannoudji et al. 1973 p. 181 (39))[6]. Como la propiedad de hermiticidad es importante para nuestra teoría, es preferible seleccionar las definiciones que más simplifiquen nuestros cálculos.