Capítulo 1

Dinámica cuántica

Queremos ver la evolución temporal de los kets. Para ello utilizaremos cierta convención. Un ket dependerá del tiempo lo cual se indicará con

$$|\alpha, t_0, t\rangle ,$$

notación que refiere al estado α que partió en t_0 al tiempo t. Luego $|\alpha, t = t_0\rangle \equiv |\alpha\rangle$. Pictóricamente

$$|\alpha, t_0\rangle \underbrace{\longrightarrow}_{\text{evoluciona}} |\alpha, t_0, t\rangle$$

Emplearemos para ello un operador de evolución temporal $U_{(t,t_0)}$ al cual le pediremos que realice la evolución según

$$|\alpha, t_0, t\rangle = U\,|\alpha, t_0\rangle$$

Entonces, un elemento de matriz $\left\langle b \middle| U_{(t,t_0)} \middle| a \right\rangle$ implica la probabilidad (amplitud) de que se tenga componente de b en el tiempo t del sistema que estamos considerando. El operador de evolución tendrá las propiedades

- Unitariedad

$$\langle \alpha, t_0, t \,|\, \alpha, t_0, t\rangle = 1 \qquad \forall t$$

$$\left\langle \alpha, t_0 \middle| U^\dagger U \middle| \alpha, t_0 \right\rangle = 1 \quad \Rightarrow \quad U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbb{1}$$

  para conservación de la probabilidad. Tiene que ser unitario.

- Linealidad

$$U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1) U(t_1, t_0) \qquad t_2 > t_1 > t_0$$

- Límite a $\mathbb{1}$ (identidad)

$$U_{(t,t_0)} \to \mathbb{1} \quad \text{si} \quad t \to t_0$$

o bien

$$U_{(t_0+dt,t_0)} \to \mathbb{1} \quad \text{si} \quad dt \to 0$$

Una forma más general de escribir un U unitario es $U = \mathrm{e}^{i\eta A}$. De aquí se ve más fácil que como $\mathrm{e}^{i\eta A}\,\mathrm{e}^{-i\eta A^\dagger} = 1$ una transformación unitaria infinitesimal es $U = 1 + i\eta A$ y $-dt/\hbar = \eta$.

Se propone entonces (infinitesimalmente) un

$$U_{(t+dt,t)} = \mathbb{1} - i\,\Omega\,dt$$

con Ω hermítico. Comparando con clásica vemos que H origina la evolución temporal, entonces identificamos Ω con H, del modo $\Omega = H/\hbar$ así que

$$U_{(t+dt,t)} = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H dt.$$

El hamiltoniano H es un operador ahora.

De esta forma

$$U_{(t+dt,t_0)} = U_{(t+dt,t)} U_{(t,t_0)} = \left(\mathbb{1} - \frac{i}{\hbar} H dt\right) U_{(t,t_0)}$$

$$\frac{\partial U}{\partial t} = \lim_{dt\to 0} \frac{U_{(t+dt,t_0)} - U_{(t,t_0)}}{dt} = -\frac{i}{\hbar} H U_{(t,t_0)}$$

y entonces

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = HU$$

que es la ecuación para $U_{(t,t_0)}$. No podemos utilizar los métodos que usamos anteriormente porque en $U = N\,\mathrm{e}^{i\int dt'\,H(t)/\hbar}$ [depende del tiempo?]. Supongmos que es $H \sim \boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{r}(\theta)$, se tiene en $t = 0$ es $\boldsymbol{r}(t) = \hat{z}$ y en $t = 5$ seg. es $\boldsymbol{r}(t) = \hat{y}$. Tenemos

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_{(t,t_0)} \left|\alpha, t_0\right\rangle = H U_{(t,t_0)} \left|\alpha, t_0\right\rangle,$$

que nos conduce a la ecuación de Schrödinger para kets

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left|\alpha, t_0, t\right\rangle = H \left|\alpha, t_0, t\right\rangle$$

donde el inconveniente es que $H = H(t)$.

El concepto se ilustra en la figura siguiente

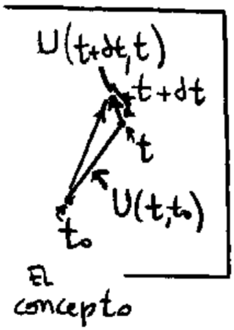

Figura 0.1

1.1 Casos sencillos de solución de $U(t,t_o)$

- Supongamos $H \neq H(t)$, entonces

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

- Sea $H = H(t)$, entonces

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

y la integral puede hacerse una vez conocida la expresión de $H(t)$.

- Sea $H = H(t)$ con $[H(t_1), H(t_2)] \neq 0$ entonces

$$U(t,t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t} dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \int_{t_0}^{t_2} dt_3 ... \times \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1)H(t_2)...H(t_n)$$

y esta es la serie de Dyson (del físico Freeman Dyson().) Esta es la solución formal general para el caso 3.

El problema que suscita es debido a que si H a diferentes tiempos no conmuta no podemos poner la exponencial en serie de potencias. En realidad exp($\Box$) tiene sentido sólo si la serie

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \Box^n$$

tiene sentido; es decir, si no surgen ambigüedades al tomar la potencia n-ésima del operador $\square$.

El operador $\square$ no se deja poner sombreros, quiere andar con la cabeza descubierta

Para el caso 1 (pensamos una especie de serie de Taylor, que es un modo general de encarar este tipo de problemas de cosas no bien definidas) es simplemente

$$\mathrm{e}{-i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)} = 1-i\frac{H}{\hbar}(t-t_0)+\frac{(-i)^2}{2}\left(\frac{H\Delta t}{\hbar}\right)^2+...+\frac{(-i)^n}{n!}\left(\frac{H\Delta t}{\hbar}\right)^n,$$

y por otra parte

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0) = H - i\frac{H^2}{\hbar^2}\Delta t + ...$$

y término a término coinciden; entonces probamos que la solución vale.

Para el caso 2, donde los hamiltonianos a diferentes tiempos conmutan entre sí, es decir $[H(t_1), H(t_2)] = 0$ la solución es

$$U(t,t_0) = \mathrm{e}^{i/\hbar \int_{t_0}^{t} H(t')\,dt'}$$

Esto no es una boludez. Al desarrollar Taylor la exponencial surge un problema

Si no conmutan los operadores no sé cómo armar el cuadrado.

$$A^2 = A(t)A(t'') \text{ o bien } A^2 = A(t'')A(t)$$

$$\left(\int H(t')dt'\right)\left(\int H(t'')dt''\right) \neq \left(\int H(t'')dt'' \int H(t')dt'\right)$$

puesto que al operar es

$$\int dt'dt''H(t')H(t'') \neq \int dt'dt''H(t'')H(t')$$

pues $[H(t'), H(t'')] \neq 0$. En el caso 2 $(\int_{t_0}^{t} H(t')dt')^n$ no tiene problemas puesto que está provista la conmutatividad.

1.1.1 Soluciones útiles

La solucion que sirve es

$$|\alpha, t_0, t\rangle = U(t,t_0)\,|\alpha\rangle$$

La idea es escribir el $|\alpha\rangle$ del sistema y hallar un operador que conmute con el hamiltoniano y en cuya base escribo $|\alpha\rangle$,

$$|\alpha\rangle = \sum C_{a'}\,|a'\rangle \qquad\qquad H\,|\alpha\rangle = \sum E_{a'}C_{a'}\,|a'\rangle$$

y trabajaremos con una solución útil ahora.

Primeramente conseguimos un $\hat{A}$ tal que $[A, H] = 0$ y entonces (estoy considerando $H \neq H(t)$)

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle \alpha' \mid \alpha\rangle\,,$$

luego

$$U(t,t_0)\,|\alpha\rangle = \sum_{a'} \mathrm{e}^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)}\; |a'\rangle \langle \alpha' \mid \alpha\rangle$$

con $\hat{H}$ y $\hat{A}$ conmutan se tiene

$$\hat{H}\,|a'\rangle = E_{a'}\,|a'\rangle \qquad \hat{A}\,|a'\rangle = a'\,|a'\rangle$$

Entonces operamos con el H para

$$U(t,t_0) = \sum_{a'} \mathrm{e}^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)}\,|a'\rangle \langle a'|$$

y así (quiero saber cómo trabaja en el tiempo $|\alpha\rangle$), le aplico el operador evolución

$$U(t,t_0)\,|\alpha\rangle = \sum_{a'} \mathrm{e}^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)}\,|a'\rangle \langle a' \mid \alpha\rangle$$

$$|\alpha, t_0, t\rangle = \sum_{a'} \langle a' \mid \alpha\rangle\,\mathrm{e}^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)}\,|a'\rangle = \sum_{a''}\sum_{a'} c_{a'}\mathrm{e}^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)}\,|a''\rangle \langle a'' \mid a'\rangle$$

o bien

$$|\alpha, t_0, t\rangle = \sum_{a'} c_{a'}\;\mathrm{e}^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)}\;|a'\rangle\,,$$

de manera que comparando con

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} \langle a' \mid \alpha\rangle\,|a'\rangle$$

El coeficiente es el mismo pero le hemos sumado una fase $\exp(-iE_{a'}(t-t_0)/\hbar)$ que no es global.

1.1.2 Evolución de valores de expectación

Recordemos primeramente que los autoestados no evolucionan. Luego

$$|\alpha\rangle = |a'\rangle \qquad \rightarrow \qquad |\alpha, t\rangle = |a', t\rangle = \;\mathrm{e}^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)}\,|a'\rangle$$

La fase es global y no tiene sentido físico (no cambia el valor de expectación, por ejemplo) Es considerar una autoestado [?]. La podemos descartar (setear igual a uno)

$$\langle a', t \,|\, B \,|\, a', t\rangle = \langle a'|\, \mathrm{e}^{i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)} B\, \mathrm{e}^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)} |a'\rangle = \langle a'|B|a'\rangle$$

El valor de expectación de un operador respecto a un autoestado no varía. Se simplifican las fases y en el valor de expectación no me entero de ellas. Para un estado que no es necesariamente autoestado

$$\langle \alpha, t|B|\alpha, t\rangle = \langle a''|\sum_{a''} \langle a''|\alpha\rangle^* \; \mathrm{e}^{i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)} B \sum_{a'} \langle a'|\alpha\rangle \; \mathrm{e}^{-i\frac{E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)} |a'\rangle$$

$$\langle \alpha, t|B|\alpha, t\rangle = \sum_{a',a''} C^*_{a''} C_{a'} \; \mathrm{e}^{i\frac{E_{a''}-E_{a'}}{\hbar}(t-t_0)} \; \langle a''|B|a'\rangle$$

donde $(E_{a''} - E_{a'})/\hbar$ es la llamada frecuencia de Bohr y vemos que la fase global depende de los índices de las sumatorias; entonces habrá términos de interferencia.

$$C^*_{a''} = \langle \alpha, t_0|a''\rangle \qquad C_{a'} = \langle a'|\alpha, t_0\rangle$$

El valor de expectación de un operador respecto a un estado general tiene una fase no global que produce términos de interferencia.

Sólo en el caso en que B conmute con H (B diagonal) se dará que la fase no interviene, porque pierdo una sumatoria merced a una delta de Kronecker que aparece.

1.1.3 Relaciones de conmutación

Algunas propieadades de los conmutadores

$$[A + B, C] = [A, C] + [B, C]$$

$$[A, B] = -[B, A]$$

$$[A, B \cdot C] = B[A, C] + [A, B]C$$

Identidad de Jacobi

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0.$$

Acá no es baca + caballo puesto que no conmutan.

$$i\hbar[A, B]_{\text{classic}} = [A, B]$$

donde $[,]_{\text{classic}}$ es el corchete de Poisson. Las relaciones de conmutación fundamentales son

$$[x_i, x_j] = 0 \qquad [p_i, p_j] = 0 \qquad [x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$$

a las que podemos sumar

$$[x, f(p)] = i\hbar\frac{\partial f}{\partial p} \qquad [p, G(x)] = i\hbar\frac{\partial G}{\partial x}$$

El primero se hace de la manera usual; tomando una serie de potencias para f. Consideremos por ejemplo

$$[x, p^2] = p[x, p] + [x, p]p = 2i\hbar p.$$

$$[S_i, S_j] = i\hbar\varepsilon_{ijk}S_k$$

1.1.4 La ecuación de Schrödinger

Habíamos llegado a

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\alpha, t_0, t\right\rangle = H\left|\alpha, t_0, t\right\rangle,$$

donde supusimos que el hamiltoniano no depende del tiempo, y es el clásico. Caso típico

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

Puedo meter un bra $\langle x'|$ que no depende del tiempo y entonces

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left\langle x'|\alpha, t_0, t\right\rangle = \left\langle x'|H|\alpha, t_0, t\right\rangle$$

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_\alpha(x', t) = \langle x'|\frac{p^2}{2m} + V(x)|\alpha, t_0, t\rangle$$

Acá usamos que sabemos cómo operan p y p^2.

de manera que resulta la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi_\alpha(x', t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\Psi_\alpha(x', t) + V(x)\Psi_\alpha(x', t).$$

Ahora la función de onda depende del tiempo.

Si suponemos que $|\psi\rangle$ es autoestado de H entonces

$$|\psi(t)\rangle = \,\mathrm{e}^{-iHt/\hbar}\,|\psi(t_0)\rangle = \,\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\,|\psi(t_0)\rangle\,,$$

y entonces el lhs de la ecuación de Schrödinger pasa a ser $E\Psi_\alpha(x',t)$. Si no fuera autoestado, sino combinación lineal de autoestados, entonces podemos escribir

$$|\alpha,t\rangle = \mathrm{e}^{-iHt/\hbar}\,|\alpha,t_0\rangle = \sum_m \mathrm{e}^{-iHt/\hbar}\,|m\rangle\,\langle m\,|\,\alpha,t_0\rangle\,.$$

Anoté que en la página de la materia están los postulados en un pdf. Notemos que $\boldsymbol{p} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla}$.

EJEMPLO 1.1 Ejercicio guía 2

Parte a)

$$H = -\frac{e}{mc}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{S} = -\frac{eB}{mc}S_z = -\omega S_z$$

donde suponemos que el campo es en $\hat{z}$. Entonces

$$[H,S_z] = 0 \qquad [S_i,S_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}S_k$$

como es nulo el conmutador, tienden una base común de autokets. Será $\{|+\rangle\,,|-\rangle\}$ y se pueden escribir

$$S_z\,|\pm\rangle = \pm\frac{\hbar}{2}\,|\pm\rangle \qquad\qquad H\,|\pm\rangle = -mp\frac{\omega\hbar}{2}\,|\pm\rangle\,.$$

Parte b)

En $t=0$ es

$$|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle)$$

de modo que

$$|\alpha,t\rangle = \mathrm{e}^{-iHt/\hbar}\,|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\,\mathrm{e}^{i\omega t/2}\,|+\rangle + \mathrm{e}^{-i\omega t/2}\,|-\rangle\right]$$

Una fase global sale de todo el ket y muere en el valor absoluto.

Parte c)

Quiero medir en un instante posterior

$$P\left(\frac{\hbar}{2}\right)_{\hat{x}} = |\,\langle S_x;+\,|\,\alpha;t\rangle\,|^2 = |\frac{1}{2}(\,\mathrm{e}^{i\omega t/2} + \mathrm{e}^{-i\omega t/2})|^2 = \cos^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)$$

y consecuentemente

$$P\left(-\frac{\hbar}{2}\right)_{\hat{y}} = \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)$$

de manera que como hay solamente dos estados posibles la probabilidad suma 1.

Parte d)

Se tiene

$$\langle S_x\rangle = \langle\alpha(t)\,|\,S\,|\,\alpha(t)\rangle$$

con la expresión para $|\alpha(t)\rangle$. Se puede hacer directamente o utilizando la probabilidad, que ya fue calculada previamente. La idea es que como

$$\langle A\rangle = \sum_a a|\,\langle a\,|\,\alpha\rangle\,|^2,$$

entonces

$$\frac{\hbar}{2}\left(\cos^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) + \sin^2\left(\frac{\omega t}{2}\right)\right)$$

y luego $\langle S_x\rangle = \hbar/2\cos(\omega t)$. Para S_y se puede operar con las matrices de Pauli, pués $S_y = \hbar/2\sigma_y$ con

$$\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$$

En general hay que descomponer en autoestados, como $|+\rangle = (10)^t$ y el $|-\rangle = (01)^t$ de manera que $\langle S_x \rangle = \hbar/2 \sin(\omega t)$. Por otra parte, como tengo un medio de probabilidad up y down, será $\boldsymbol{S_z} = 0$.

Parte e)

Sea $n(t)$ tal que $\boldsymbol{S} \cdot \hat{n} \, |\alpha, t\rangle = |\alpha, t\rangle$. Del ejercicio 8 tomamos

$$\boldsymbol{S} \cdot \hat{n} \, |\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{n}, +\rangle = \frac{\hbar}{2} \, |\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{n}, +\rangle$$

y

$$|\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{n}, +\rangle = \cos\left(\frac{\beta}{2}\right) |+\rangle + \sin\left(\frac{\beta}{2}\right) \mathrm{e}^{i\alpha} \, |-\rangle$$

de modo que

$$|\alpha, t\rangle = \frac{\mathrm{e}^{i\omega t/2}}{\sqrt{2}} \left[|+\rangle + \, \mathrm{e}^{-i\omega t} \, |-\rangle \right] \approx \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle + \, \mathrm{e}^{-i\omega t} \, |-\rangle \right)$$

donde me olvido de la exponencial afuera porque es una fase global y no aporta a la probabilidad. Comparamos el resultado final con lo del ejercicio 8 y por inspección obtenemos que $\beta = \pi/2$ y $\alpha = -\omega t$.

1.1.5 Representación de Heisenberg

Los kets y los operadores no tienen sentido físico, pero sí los valores de expectación

$$\langle A \rangle \equiv \langle \alpha \, | \, A \, | \, a \rangle \, ,$$

puesto que son lo que se mide. Entonces cualquier física podrá modificar los primeros pero debe conservar los valores de expectación. Así tenemos dos representaciones posibles:

Schrödinger	Heisenberg
$\|\alpha\rangle \to U \, \|\alpha\rangle$	$\|\alpha\rangle \to \|\alpha\rangle$
$A \to A$	$A \to U^\dagger A U$
$\|a'\rangle \to \|a'\rangle$	$\|a'\rangle \to U^\dagger \, \|a'\rangle$

Así vemos que en Schrödinger los kets evolucionan y los operadores permanecen fijos; al igual que los autoestados. En cambio en Heisenberg los kets no evolucionan pero sí lo hacen los operadores y los autoestados.

Deben notarse que:

1. Los productos internos no cambian con el tiempo

$$\langle \beta | \alpha \rangle = \langle \beta | U^\dagger U | \alpha \rangle$$

2. Los valores de expectacion son los mismos en ambos esquemas

$$\langle\alpha,t|A|\alpha,t\rangle = \langle\alpha,t|U^\dagger AU|\alpha,t\rangle = \begin{cases}\langle A\rangle^{(H)}\\ \langle A\rangle^{(S)}\end{cases}$$

de lo cual se deduce que

$$\langle A\rangle^{(S} = \langle A\rangle^{(H} \qquad A(t)^H = U(t)^\dagger A^S U(t)$$

El operador $\hat{A}$ en Schrödinger no depende explícitamente del tiempo. La idea es que le "pegamos" a los operadores la evolución temporal de los kets.

$$(\langle\alpha,t_0|\,U^\dagger)A^{(S)}(U\,|\alpha,t_0\rangle) = \langle\alpha,t_0|U^\dagger A^{(S)}US|\alpha,t_0\rangle$$

pero a $t=t_0$ las representaciones coinciden,

$$|\alpha,t_0,t_0\rangle^{(S)} = |\alpha\rangle^{(H)}$$

y se separan a medida que el tiempo transcurre. Se tiene

$$U(t,t_0) = U(t) = \mathrm{e}^{iHt/\hbar},$$

donde este H no depende del tiempo.

EJEMPLO 1.2 Ejemplito

Con el operador de traslación sería algo como

$$|\alpha\rangle^{(S)} \to \left[1-\frac{i\boldsymbol{p}d\boldsymbol{x}}{\hbar}\right]|x\rangle^{(S)}$$

$$\boldsymbol{X}^{(S)} \to \boldsymbol{X}^{(S)}$$

Representación de $\widehat{\text{apple}}$ (manzana?)

$$|\alpha\rangle^{(A)} \to |\alpha\rangle^{(A)}$$

$$\boldsymbol{X}^{(A)} \to U^\dagger \boldsymbol{X}^{(A)} U = \left[1+\frac{i\boldsymbol{p}d\boldsymbol{x}}{\hbar}\right] X \left[1-\frac{i\boldsymbol{p}d\boldsymbol{x}}{\hbar}\right] = \boldsymbol{X}+d\boldsymbol{X}$$

y para ambas representaciones es

$$\langle\boldsymbol{X}\rangle \to \langle\boldsymbol{X}\rangle + \langle d\boldsymbol{X}\rangle$$

EJEMPLO 1.3 Ejercicio 21

Punto a)

$$[x,f(p_x)]_{\text{Poisson}} = \frac{\partial x}{\partial x}\frac{\partial F(p_x)}{\partial p_x} - \frac{\partial x}{\partial p_x}\frac{\partial F(p_x)}{\partial x} = \frac{\partial f(p_x)}{\partial p_x}.$$

Punto b) donde x, p_x son operadores. Entonces hay que evaluar

$$[x,\ \mathrm{e}^{ip_x a/\hbar}],$$

y como conocemos el conmutador de x, p_x se utiliza una serie de potencias, es decir

$$[x, f(p_x)] = \sum_n \frac{1}{n!}\frac{\partial^n f}{\partial {p_x}^n}[x, p_x^n],$$

y

$$[x, p_x^n] = [x, p_x^n p_x^{n-1}] = p_x[x, p_x^{n-1}] + [x, p_x]p_x^{n-1} = p_x[x, p_x^{n-1}] + i\hbar p_x^{n-1},$$

y aplicando inducción matemática se ve que llegamos a

$$[x, p_x^n] = i\hbar n p_x^{n-1},$$

de modo que

$$[x, f(p_x)] = \sum_n \frac{1}{n!}\frac{\partial^n f}{\partial {p_x}^n} i\hbar n p_x^{n-1} = \sum_n [\ldots] = i\hbar \frac{\partial f(p_x)}{\partial p_x}$$

puesto que es el desarrollo en serie de la derivada. Finalmente,

$$[x,\ \mathrm{e}^{ip_x a/\hbar}] = -a\, \mathrm{e}^{ip_x a/\hbar}.$$

Punto c) se tiene que $\mathrm{e}^{ip_x a/\hbar}\,|x'\rangle$es autoestado de $\hat{x}$, donde $\hat{x}\,|x'\rangle = x'\,|x\rangle$. Luego, usando el resultado anterior

$$[x,\ \mathrm{e}^{ip_x a/\hbar}]\,|x'\rangle = -a\, \mathrm{e}^{ip_x a/\hbar}\,|x'\rangle\,,$$

de lo cual se deduce, expandiendo, que

$$\hat{x}\, \mathrm{e}^{ip_x a/\hbar}\,|x'\rangle = (x' - a)\, \mathrm{e}^{ip_x a/\hbar}\,|x'\rangle\,,$$

o bien

$$\hat{x}\,|x'\rangle = (x' - a)\,|x'\rangle\,,$$

de manera que el operador $\mathrm{e}^{ip_x a/\hbar}$ es el operador de traslación pués

$$\mathrm{e}^{ip_x a/\hbar}\,|x'\rangle = |x' - a\rangle\,.$$

La ecuación de Heisenberg

Queremos llegar a una ecuación para trabajar en la representación de Heisenberg.

$$A^H = U^\dagger A^S U \qquad \frac{\partial A^H}{\partial t} = \frac{\partial U^\dagger}{\partial t} A^S U + U^\dagger A^S \frac{\partial U}{\partial t} + U^\dagger A^S \frac{\partial U}{\partial t}$$

$$i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} \Rightarrow \frac{\partial U}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} H U\ ;\ \frac{\partial U^\dagger}{\partial t} = \frac{1}{-i\hbar} U^\dagger H$$

$$(HU)^\dagger = U^\dagger H^\dagger = U^\dagger H$$

$$\frac{\partial A^H}{\partial t} = \frac{-1}{i\hbar} U^\dagger H A^S U + \underbrace{U^\dagger \frac{\partial A^S}{\partial t} U}_{=0} + U^\dagger A^S \frac{1}{i\hbar} H U$$

pues A^S no depende explícitamente del tiempo (si)

$$\frac{\partial A^H}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}\left(U^\dagger HUU^\dagger A^S U - U^\dagger A^S UU^\dagger HU\right) = \frac{1}{i\hbar}(-HA + AH)$$

y llegamos a la ecuación de Heisenberg

$$\frac{\partial A^{(H)}}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[A^{(H)}, H^{(H)}]$$

si $A^{(H)}$ conmuta con el $H^{(H)}$, entonces $A^{(H)}$ es una cantidad conservada (una constante de movimiento). En ese caso el operador no depende del tiempo y entonces $A^{(H)} = A^{(S)}$.

Evolución de autoestados

$$A^S \left|a'\right\rangle^S = a' \left|a'\right\rangle^S,$$

aplico un $U^\dagger$ a ambos lados y entonces

$$U^\dagger A^S U U^\dagger \left|a'\right\rangle^S = a' U^\dagger \left|a'\right\rangle^S$$

los a' no dependen de la representación porque tienen significado físico. Entonces los $|a'\rangle$ evolucionan

$$A^H (U^\dagger \left|a'\right\rangle^S) = a' (U^\dagger \left|a'\right\rangle^S)$$

$$\left|a', t\right\rangle^H = U^\dagger \left|a'\right\rangle^S \qquad \frac{\partial}{\partial t}\left(\left|a', t\right\rangle^H\right) = \frac{\partial}{\partial t}\left(U^\dagger \left|a'\right\rangle^S\right)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left|a', t\right\rangle^H = -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger \left|a'\right\rangle^S = -\frac{1}{i\hbar} H U^\dagger \left|a'\right\rangle^S$$

puesto que recordemos, nota importante,

$$H^H = U^\dagger H^S U = U^\dagger U H^S = \mathbb{1} H^S = H^S$$

entonces H es el mismo en ambas puesto que $\hat{U} = \hat{U}(\hat{H})$ y $[U, H] = 0$.

De esta forma los autoestados evolucionan al revés

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\left|a', t\right\rangle^H = -H \left|a', t\right\rangle^H$$

Podemos ver de otro modo la equivalencia, usando el proyector para el operador de Schrödinger,

$$A^S = \sum_{a'} a' \left|a'\right\rangle^S \left\langle a'\right|^S$$

y entonces A^H será

$$A^H = U^\dagger \sum_{a'} A^S |a'\rangle \langle a'| U = \sum_{a'} a' U^\dagger |a'\rangle \langle a'| U$$

pero

$$A^H = \sum_{a'} A^H |a', t\rangle \langle a', t| \equiv \sum_{a'}$$

y luego se tiene que

$$A^H = \sum_{a'} a' |a', t\rangle \langle a', t| \equiv \sum_{a'} a' (U^\dagger |a'\rangle)(\langle a'| U),$$

donde por inspección resulta

$$|a', t\rangle = U^\dagger |a'\rangle^S .$$

	Schrödinger	Heisenberg
$\|\alpha\rangle$	evolucionan	no evolucionan
A	no evolucionan	evolucionan
$\|a'\rangle$	no evolucionan	evolucionan

Coeficientes

Los coeficientes en Schrödinger y en Heisenberg son

$$C^S_{a'}(t) =^S \langle a'|\alpha, t_0, t\rangle^S =^S \langle a'| (U |\alpha, t_0\rangle)$$

$$C^H_{a'}(t) =^H \langle a', t|\alpha, t_0\rangle^H = (^S\langle a'| U) |\alpha, t_0\rangle .$$

Entonces en Schrödinger es

$$|\alpha, t_0, t\rangle = \sum_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha, t_0, t\rangle = \sum_{a'} \overbrace{\langle a'|\alpha, t_0, t\rangle}^{C_{a'}(t)} |a'\rangle$$

mientras que en Heisenberg es

$$|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} |a', t\rangle \langle a', t|\alpha, t_0\rangle = \sum_{a'} \overbrace{\langle a', t|\alpha, t_0\rangle}^{C_{a'}(t)} |a', t\rangle$$

Los coeficientes en las expresiones son iguales como corresponde a todo magnitud que tiene sentido físico, pues $|c_a(t)|^2$ es la probabilidad. El coeficiente es el mismo en ambas representaciones.

Tampoco a' puede depender de la representación porque tiene sentido físico.

1.1.6 Teorema de Ehrenfest

Para una partícula libre, es $H = p^2/(2m)$ y

$$\frac{dP_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[P_i, H] = 0,$$

el momento lineal se conserva. Se tiene

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[x_i, H] = \frac{1}{i\hbar}[x_i, \frac{p_i^2}{2m}] = \frac{p}{m}$$

de manera que $p(t) = p(0)$ es constante de movimiento,

$$x^{(H)} = x(0) + \frac{p(0)}{m}t$$

y se tiene (el operador x aumenta con el tiempo en la representación de Heisenberg)

$$[x(t), x(0)] = -\frac{i\hbar}{m}t$$

que es decir que es un operador que no conmuta a t diferentes. La dispersión aumenta cuadráticamente en el tiempo

$$\left\langle (\Delta X_i)^2 \right\rangle_t \left\langle (\Delta X_i)^2 \right\rangle_{t=0} \geq \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2}$$

Esto vale para cualquier estado que utilice para calcular los valores medios.

Para una partícula sometida a potencial

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

$$\frac{dP}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[p, H] = \frac{1}{i\hbar}[p, V(x)] = \frac{1}{i\hbar}\left(-i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}\right),$$

de modo que

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial x} \qquad \longrightarrow \qquad m\frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{\partial V}{\partial x}$$

tenemos una ecuación newtoniana. Entonces,

$$p = m\frac{dx}{dt} \qquad \frac{dp}{dt} = m\frac{d^2x}{dt^2}$$

donde estamos usando

$$\frac{\partial A^H}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}[A^H, H]$$

Es necesario remarcar que relaciones como $[x,p] = i\hbar$ son para operadores en la picture de Schrödinger, donde los operadores no cambian en el tiempo. Estamos en efecto haciendo $[x(0), p(0)] = i\hbar$

$$\left\langle \alpha, t_0 \left| m\frac{d^2x}{dt^2} \right| \alpha, t_0 \right\rangle = -\left\langle \alpha, t_0 \left| \frac{\partial V}{\partial x} \right| \alpha, t_0 \right\rangle$$

$$m\frac{\partial^2}{\partial t^2} \left\langle \alpha, t_0 \,|\, x^H \,|\, \alpha, t_0 \right\rangle = -\left\langle \alpha, t_0 \left| \frac{\partial V}{\partial x} \right| \alpha, t_0 \right\rangle$$

y entonces el teorema de Ehrenfest es

$$m\frac{\partial^2}{\partial t^2} \left\langle x^{(s)} \right\rangle = -\left\langle \frac{\partial V^{(s)}}{\partial x} \right\rangle$$

los valores de expectación son iguales en ambas representaciones. Claramente no podía depender de la representación porque los valores medios son cosas físicas. Se ve también que el $\hbar$ desaparece debido a que el centro del paquete se mueve aproximadamente en forma clásica y se toma el valor medio.

EJEMPLO 1.4 Ejercicio 24

Parte a). Integramos

$$\int dx' \left\langle p' \,|\, x' \right\rangle \left\langle x' \,|\, \hat{x} \,|\, \alpha \right\rangle = \int dx' \left\langle p' \,|\, x' \right\rangle \left\langle x' \,|\, \alpha \right\rangle x' = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dx' \, \mathrm{e}^{-ip'x'/\hbar} \left\langle x' \,|\, \alpha \right\rangle x'$$

y expresando en términos de la derivada

$$\int dx' \frac{\partial}{\partial p'} \frac{\mathrm{e}^{-ip'x'/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{\hbar}{-i} \left\langle x' \,|\, \alpha \right\rangle$$

o bien

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial p'} \left[\int dx' \left\langle p' \,|\, x' \right\rangle \left\langle x' \,|\, \alpha \right\rangle \right]$$

Como

$$\left\langle \beta \,|\, x \,|\, \alpha \right\rangle = \int dp' \left\langle \beta \,|\, p' \right\rangle i\hbar\frac{\partial}{\partial p'} \left\langle p' \,|\, \alpha \right\rangle = \int dp' \psi_\beta(p')^* i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\psi_\alpha(p')$$

se deduce que

$$x \equiv i\hbar\frac{\partial}{\partial p}.$$

Parte b). El significado físico de $\mathrm{e}^{i\hat{x}C/\hbar}$ donde C es alguna constante. Por la expansión en serie se tiene

$$\mathrm{e}^{i\hat{x}C/\hbar} \left| x' \right\rangle = \mathrm{e}^{ixC/\hbar} \left| x' \right\rangle$$

de manera que la itnegración

$$\int dx' \, \mathrm{e}^{i\hat{x}C/\hbar} \left| x' \right\rangle \left\langle x' \mid p' \right\rangle = \int dx' \left| x' \right\rangle \frac{\mathrm{e}^{i\hat{x}(C+p')/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}} =$$

o bien

$$\int dx' \left| x' \right\rangle \left\langle x' \mid C + p' \right\rangle = \left| C + p' \right\rangle .$$