Tema 5: Resumen

Formalismo matemático de la Mecánica cuántica. Proporciona un marco en el que estudiar situaciones más generales que las que hemos considerado hasta ahora. Viene dado por seis postulados. Todo lo estudiado hasta este momento puede entenderse como un realización particular de este formalismo.

Postulado I. A todo sitema físico se le hace corresponder un espacio de Hilbert $\mathcal{H}$ separable complejo. Todo estado del sistema viene descrito por un elemento $|\Psi(t)\rangle$ de norma uno de $\mathcal{H}$.

Nótese que el elemento $\alpha|\Psi(t)\rangle$, con α una fase arbitraria, describe el miso estado que $|\Psi(t)\rangle$. Para nosotros $\mathcal{H}$ ha venido siendo el espacio de funciones de cuadrado integrable y $|\Psi(t)\rangle$ la función de ondas $\psi(\mathbf{x}, t)$ normalizada. La arbitrariedad en α se corresponde con que la constante de normalización está determinada salvo fase.

Postulado II. Todo observable físico está representado por un operador lineal autoadjunto que actua sobre $\mathcal{H}$.

Es la generalización a todo observable de lo que sabemos para la posición, el momento y la energía. Si $\mathcal{H}$ es el espacio de funciones de cuadrado integrable, la posición viene representada por el operador $X = x$, el momento por $P = -\mathrm{i}\hbar\partial_x$ y la energía por el hamiltoniano

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\,.$$

Los tres actuan como operadores diferenciales sobre $\psi(x, t)$.

Postulado V. La evolución temporal de un estado viene dada por la ecuación de Schrödinger

$$H(t)\Psi(t)\rangle = \mathrm{i}\hbar\,\frac{d}{dt}\,|\Psi(t)\rangle\,,$$

donde H es el hamiltoniano del sistema.

Para funciones de onda $\psi(x, t)$, ésta toma la forma

$$\Big[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)\Big]\psi(x,t) = \mathrm{i}\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}\,\psi(x,t)\,.$$

Nótese que el postulado da cabida a casos más generales, como por ejemplo hamiltonianos que dependen del tiempo.

Postulado VI. Si $x_1, \cdots, x_N$ son las coordenadas cartesianas que describen la posiciones de un sistema en Mecánica clásica y $p_1, \cdots, p_N$ sus momentos canónicos correspondientes, los operadores $X_1, \cdots, X_N$ y $P_1, \cdots, P_N$ que describen estos observables en Mecánica cuántica satisfacen

$$[X_J, X_k] = 0\,, \quad [P_j, P_k] = 0\,, \quad [X_j, P_k] = \mathrm{i}\hbar\delta_{jk}\,.$$

A este postulado a veces se le refiere como cuantización canónica.

Insisto. Estos postulados ponen en un contexto más general ideas ya estudiadas. Nosotros trabajaremos en este curso en el espacio de funciones de cuadrado integrable, y no usaremos otros espacios de Hilbert para los estados de un sistema. Sin embargo, es importante notar que los postulados permiten escenarios alternativos. Por ejemplo, la formulación matricial de la Mecánica cuántica de Heisenberg de 1925, en la que un estado viene descrito por un vector columna de infintas componentes y los observables por matrices cuadradas autoadjuntas de dimensión infinita. El spin es otro ejemplo, solo que ahora los vectores y las matrices son de dimensión finita.

Pasemos a enunciar los postulados III y IV, que tienen que ver con la medida. Para fijar mejor las ideas, trabajamos, como ha quedado dicho, con el espacio de funciones de ondas de cuadrado integrable. Llamemos $\{E_n, \phi_n(x)\}$ a las soluciones de la ecuación de Scrödinger independiente del tiempo $H\phi(x) = E\phi(x)$ y supongamos que forman base, es decir que

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \int dx\, \phi_n(x)\, \phi_m(x) = \delta_{nm}\,.$$

Queremos resolver la ecuación de Schrödinger

$$H\psi(x,t) = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t}\, \psi(x,t)$$

con dato inicial $\psi(x,0) = f(x)$, donde $f(x)$ es conocida. Para que la interpretación probabilística tenga sentido, $f(x)$ debe tener norma 1, es decir $\|f\|^2 = \langle\, f \,|\, f\,\rangle = 1$. La solución para $\psi(x,t)$ se obtiene por separación de variables y resulta ser

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n\, e^{-\mathrm{i}Et/\hbar}\, \phi_n(x)\,.$$

Los coeficientes c_n son constantes y se determinan a partir de la condición inicial,

$$\psi(x,0) = \sum_n c_n\, \phi_n(x) = f(x) \quad \Rightarrow \quad c_n = [\,\text{coeficiente Fourier de } f(x)\,] = \langle \phi_n | f \rangle\,.$$

La norma de $\psi(x,t)$ en un t cualquiEra sigue siendo 1, pues

$$\|\psi(t)\|^2 = \langle\, \psi(t) \,|\, \psi(t)\,\rangle = \sum_n |c_n|^2 = \langle\, f \,|\, f\,\rangle = 1\,.$$

Lo anterior sugiere interpretar el coeficiente c_n como que $|c_n|^2$ es el peso con el que participa el estado ligado $e^{-\mathrm{i}Et/\hbar}\phi_n(x)$ en la función de ondas $\psi(x,t)$, o equivalentemente, $|c_n|^2$ es la probabilidad de que el sistema se encuentre en el estado $e^{-\mathrm{i}Et/\hbar}\phi_n(x)$.

Calculemos ahora el valor esperado de la energía. Para él obtenemos

$$\langle H \rangle_\psi = \langle\, \psi(t) \,| H \,|\, \psi(t)\,\rangle = \sum_n E_n\, |c_n|^2\,.$$

Es decir, los únicos valores posibles para la energía son los autovalores E_n del hamiltoniano, y al medir ésta se obtiene el valor E_n con probabilidad $|c_n|^2$. Esta interpretación se recoge en el siguiente postulado:

Postulado III. Al medir un observable descrito por un operador lineal autoadjunto A en un estado de un sistema descrito por $|\Psi\rangle$ sólo pueden obtenerse autovalores de A. La probabilidad de obtener el autovalor a es $|\langle\varphi_a|\Psi\rangle|^2$, donde $|\varphi_a\rangle$ es el autoestado correspondiente al autovalor a, es decir $A|\varphi_a\rangle = a|\varphi_a\rangle$.

Postulado IV. El sistema se queda tras la medida en el estado descrito por $|\varphi_a\rangle$.

Establece que al medir un observable se interacciona con el sistema de forma que éste cambia de estado y pasa a uno nuevo, aquel que corresponde al autovalor obtenido. Considérese (con precaución) la siguiente analogía. Imagínese que se lanza un dado. Antes de lanzarlo, la probabilidad de obtener una cara es 1/6; pero, una vez lanzado, el dado se queda mostrando la cara cuyo resultado se ha obtenido.