Clase 6 - Viernes 03/09/2021

La clase pasada vimos:

- Observables
- Observables que conmutan
- Conjunto completo de observables que conmutan (CCOC)

En esta clase veremos:

- Postulados de la mecánica cuántica
- Reglas de cuantización

REPASO

Operadores hermíticos y observables

(1) Teorema: Los autovalores de un operador hermítico son reales

(2) Teo: $\begin{cases} A|\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle \\ A|\varphi\rangle = \mu |\varphi\rangle \end{cases}$ si $\lambda \neq \mu \Rightarrow |\psi\rangle \perp |\varphi\rangle$

(3) Definición: un **observable** es un operador hermítico cuyos autovectores forman base (completitud)

Observables que conmutan

REPASO

Teorema I

Si $[A, B] = 0$, $A|\psi\rangle = a|\psi\rangle$ $\Rightarrow$ $A\left(B|\psi\rangle\right) = aB|\psi\rangle$

Teorema II

Si $[A, B] = 0$, $A|\psi_1\rangle = a_1|\psi_1\rangle$, $A|\psi_2\rangle = a_2|\psi_2\rangle$, $a_1 \neq a_2$ $\Rightarrow$ $\langle\psi_1|B|\psi_2\rangle = 0$

Teorema III:

Si $[A, B] = 0$ $\Rightarrow$ se puede construir una base ortonormal con autovectores comunes de A y B.

Sean A, B observables

Conjunto completo de observables que conmutan (C.C.O.C.)

REPASO

Conjunto completo de observables que conmutan (C.C.O.C)

Un conjunto de observables A, B, C, ... forma un CCOC si

(i) A, B, C, ... conmutan de a pares

(ii) si especificar los autovalores de todos los operadores determina un único autovector común.

(Alternativa:
A, B, C, ... es un CCOC si existe una única base de autovectores comunes)

Los 6 postulados de la Mecánica Cuántica

Chapter III The postulates of quantum mechanics

A. INTRODUCTION

B. STATEMENT OF THE POSTULATES

1. Description of the state of a system
2. Description of physical quantities
3. The measurement of physical quantities
   a. Possible results
   b. Principle of spectral decomposition
   c. Reduction of the wave packet
4. Time evolution of systems
5. Quantization rules
   a. Statement
   b. Important examples

Postulados de la mecánica cuántica

Debemos especificar:

1) Estado del sistema

2) Cantidades físicas y su medición.

3) Evolución temporal del estado.

Primer postulado

A tiempo t_0, el estado del sistema es descripto por un ket o vector de estado:

$$|\psi(t_0)\rangle$$

del espacio de estados $\mathcal{E}$ (espacio de Hilbert).

Los kets se pueden combinar linealmente: principio de superposición. (Ej. funciones de onda $\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi \rangle$ de cuadrado integrable)

Segundo postulado

Una cantidad física medible $\mathcal{A}$ es descripta por un operador A que actúa en $\mathcal{E}$. A es un observable.

Ej. $\vec{R}$, $\vec{P} = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$, H (energía).

Def. Observable $A \Leftrightarrow$

i) A es hermítico (=autoadjunto): $A^{+} = A$

ii) Los autoestados de A forman una base (Esto es necesario aclararlo si $\mathcal{E}$ tiene dimensión infinita.)

Notar que:

1) Los autovalores de un operador hermítico son reales. Uff!

2) Autovectores de un operador " correspondientes a autovalores distintos, son ortogonales.

Tercer Postulado

Los posibles resultados de la medición de una cantidad física $\mathcal{A}$ están dados por los autovalores del observable A.

Ej: $A = H$, $\Rightarrow$ autovalores: posibles energías

Resultados de mediciones: Probabilidad de medición

Sea estado $|\psi\rangle$, observable A

Autovalores de A : $\{a_n, |u_n\rangle\}$
y autovectores

Suponemos $\{a_n\}$ son no-degenerados

Relación de clausura: $\mathbb{1} = \sum_n |u_n\rangle\langle u_n|$

$$\Rightarrow |\psi\rangle = \mathbb{1}|\psi\rangle = \left(\sum_n |u_n\rangle\langle u_n|\right)|\psi\rangle$$

$$= \sum_n |u_n\rangle \underbrace{\langle u_n|\psi\rangle}_{\equiv c_n} = \sum_n c_n |u_n\rangle$$

Cuarto postulado (espectro discreto no-degenerado)

Cuando se mide A, la probabilidad de obtener a_n es:

$$P(a_n) = |c_n|^2 = |\langle u_n | \psi \rangle|^2 .$$

Caso de espectro degenerado:

$$a_n \begin{cases} |u^1\rangle \\ |u^2\rangle \\ \vdots \end{cases} \Bigg\} \; g_n \text{ estados}$$

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i |u_n^i\rangle$$

Cuarto postulado (espectro discreto degenerado)

$$P(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} \left| \langle u_n^i | \psi \rangle \right|^2$$

$$\mathbb{1} = \sum_n \underbrace{\sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i|}$$

Proyector sobre "autosubespacio" de a_n, $\mathcal{E}_n$

$$\mathbb{P}_n = \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i|$$ Proyector en autosubespacio $\mathcal{E}_n$

$$|\psi_n\rangle = \mathbb{P}_n |\psi\rangle$$ proyección de $|\psi\rangle$ en $\mathcal{E}_n$

$$\begin{aligned}
\langle \psi_n | \psi_n \rangle &= \langle \psi | \mathbb{P}_n | \psi \rangle \\
&= \sum_{i=1}^{g_n} \langle \psi | u_n^i \rangle \langle u_n^i | \psi \rangle \\
&= \sum_{i=\phi}^{g_n} \left| \langle u_n^i | \psi \rangle \right|^2 = \mathcal{P}(a_n)
\end{aligned}$$

Caso de espectro contínuo

$$A\,|v_\alpha\rangle = \alpha\,|v_\alpha\rangle$$

Se puede expandir estados $|\psi\rangle$

$$|\psi\rangle = \int d\alpha \;\; c(\alpha)\,|v_\alpha\rangle$$

Cuarto postulado (espectro contínuo no-degenerado)

$$dP(\alpha) = \underbrace{|\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2}_{= |c(\alpha)|^2 = \rho(\alpha)} d\alpha$$

Rol de la normalización

Supusimos $\langle \psi | \psi \rangle = 1$.

Si no, pedimos:

$$\mathcal{P}(a_n) = \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} \left| \langle u_n | \psi \rangle \right|^2 \quad , \text{ etc.}$$

Quinto postulado

Reducción o colapso del estado en una medición

Supongamos $|\psi\rangle = \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i \, |u_n^i\rangle$

justo antes de la medición de A

$$|\psi\rangle \xrightarrow[\text{se obtiene } a_n]{\text{medición}} \text{ queda } \sum_{i=1}^{g_n} c_n^i \, |u_n^i\rangle = \mathbb{P}_n \, |\psi\rangle$$

$$= |\psi_n\rangle$$

Normalizando el estado final:

$$|\psi\rangle \longrightarrow \frac{|\psi_n\rangle}{\sqrt{\langle\psi_n|\psi_n\rangle}} = \frac{\mathbb{P}_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\mathbb{P}_n|\psi\rangle}}$$

Quinto Postulado

El estado del sistema después de una medición de A cuyo resultado es a_n, es un autoestado de A con ese autovalor.

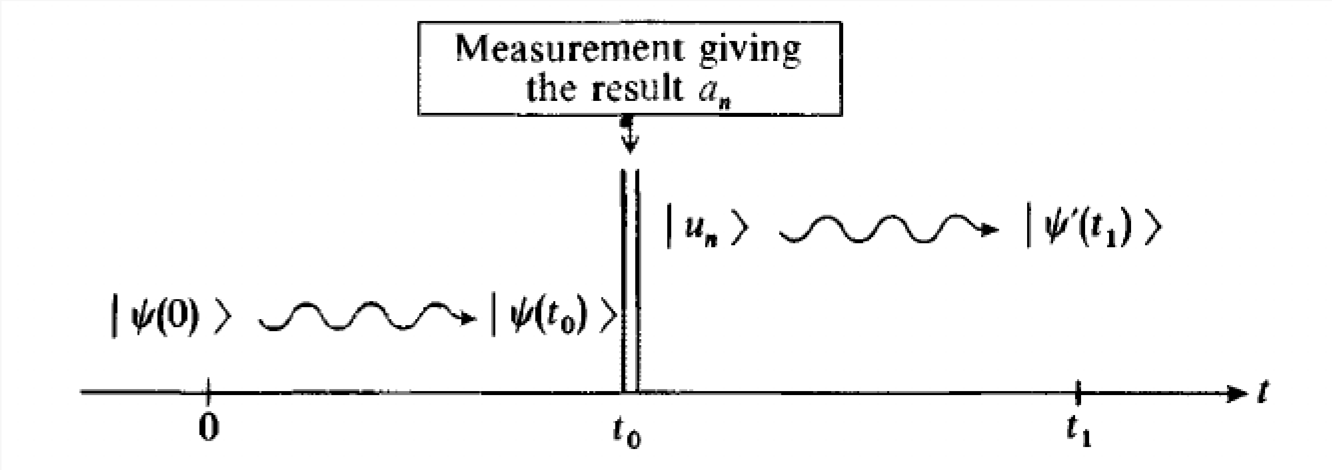
Si se vuelve a medir A inmediatamente, se obtiene seguro a_n.

We stress the fact, however, that
it is not an arbitrary ket of the subspace $\mathscr{E}_n$, but the part of $|\psi\rangle$ which belongs to $\mathscr{E}_n$

Normalizando el estado final:

$$|\psi\rangle \longrightarrow \frac{|\psi_n\rangle}{\sqrt{\langle\psi_n|\psi_n\rangle}} = \frac{\mathbb{P}_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|\mathbb{P}_n|\psi\rangle}}$$

Quinto Postulado



Sexto postulado: Evolución temporal $|\psi(t)\rangle$

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

donde $H(t)$ es el operador asociado a la energía total.

Reglas de cuantización

Para cantidades físicas que existen en mecánica clásica:

$$\vec{r} \longrightarrow \vec{R}$$

$$\vec{p} \longrightarrow \vec{P}$$

operadores

Satisfacen las relaciones de conmutación:

$$[R_i, R_j] = 0 \qquad [P_i, P_j] = 0 \qquad [R_i, P_j] = i\hbar\,\delta_{ij}$$

En la representación $\{|\vec{r}\rangle\}$ $\left(\psi(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\psi\rangle\right)$:

$$X|\psi\rangle \longrightarrow \langle\vec{r}|X|\psi\rangle = x\,\psi(\vec{r})$$

$$P_x|\psi\rangle \longrightarrow \langle\vec{r}|P_x|\psi\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(\vec{r})$$

$$\langle \vec{r} \,|\, [X, P_x] \,|\, \psi \rangle = \langle \vec{r} \,|\, X P_x - P_x X \,|\, \psi \rangle$$

$$= x \langle \vec{r} \,|\, P_x \,|\, \psi \rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \langle \vec{r} \,|\, X \,|\, \psi \rangle$$

$$= \frac{\hbar}{i}\, x \frac{\partial}{\partial x} \langle \vec{r} | \psi \rangle - \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}\, x \langle \vec{r} | \psi \rangle$$

$$= i\hbar \langle \vec{r} | \psi \rangle = i\hbar\, \psi(\vec{r})$$

X y P_x son hermíticos (!)

Ver II.E.2.b

Se demuestra que $\langle \varphi | P_x | \psi \rangle = \langle \psi | P_x | \varphi \rangle^*$

y $\langle \varphi | x | \psi \rangle = \langle \psi | x | \varphi \rangle^*$

Volviendo a las reglas de cuantización:

Si en una cantidad clásica aparece por ejemplo

$\vec{r} \cdot \vec{p}$ uno podría poner $\vec{p} \cdot \vec{r}$, cuál uso?

Regla de simetrización: $\frac{1}{2}\left(\vec{R} \cdot \vec{P} + \vec{P} \cdot \vec{R}\right)$

Ejemplos

$$\mathcal{H}(\vec{r},\vec{p}) = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) \longrightarrow H = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{R})$$

$$= \frac{P_x^2 + P_y^2 + P_z^2}{2m} + V(\vec{R})$$

En presencia de campo EM:

$$\mathcal{H}(\vec{r},\vec{p}) = \frac{1}{2m}\left[\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r},t)\right]^2 + qU(\vec{r},t)$$

donde $\vec{p} = m\vec{v} + q\vec{A}(\vec{r},t)$

Construímos el operador $\vec{A}(\vec{R},t)$, pero al ponerlo en $H(\vec{R},\vec{P})$ hay q tener cuidado porque $\left[\vec{A}(\vec{R},t), \vec{P}\right] \neq 0$ en gral.

En gauge de Coulomb sí.

En presencia de campo EM:

$$\mathcal{H}(\vec{r},\vec{p}) = \frac{1}{2m}\left[\vec{p} - q\vec{A}(\vec{r},t)\right]^2 + q\,U(\vec{r},t)$$

donde $\vec{p} = m\vec{v} + q\vec{A}(\vec{r},t)$

Construimos el operador $\vec{A}(\vec{R},t)$, pero al ponerlo en $H(\vec{R},\vec{P})$ hay q tener cuidado porque $\left[\vec{A}(\vec{R},t),\vec{P}\right] \neq 0$ en gral.

En gauge de Coulomb sí.

$$\Rightarrow \quad H(\mathbf{R},\mathbf{P}) = \frac{P^2}{2m} - \frac{q}{2m}[\mathbf{P}\cdot\mathbf{A}(\mathbf{R},t) + \mathbf{A}(\mathbf{R},t)\cdot\mathbf{P}] + \frac{q^2A^2}{2m} + q\,U(\mathbf{R},t))$$

Resumen de la Clase 6

En esta clase vimos:

- Postulados de la mecánica cuántica
- Reglas de cuantización