14/8/15

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 $A \Longleftrightarrow$

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

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

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:

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

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

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

Cuarto postulado (espectro discreto degenerado)

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

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

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

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

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)

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

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

Si no, pedimos:

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

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:

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

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.

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:

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

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

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

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

Ejemplo

$$[X, P_x]\, \psi(\vec{r}) = \left[x, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\right] \psi(\vec{r})$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(x \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} x\right) \psi(\vec{r})$$

$$= \frac{\hbar}{i}\left(x \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{\partial x}{\partial x} \cdot \psi - x \frac{\partial \psi}{\partial x}\right)$$

$$= -\frac{\hbar}{i} \psi = i\hbar\, \psi(\vec{r}) \Rightarrow [X, P_x] = i\hbar\, \mathbb{1}$$

Más formalmente, escribimos:

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

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

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

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

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:

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

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.