Autoestados y autovalores de K

Llamamos k a los autovalores de K, y $|\,k\,\rangle$ a los autoestados correspondientes :

$$K\,|\,k\,\rangle \;=\; k\,|\,k\,\rangle$$

Multiplicando por $\langle\,x\,|$: $$\langle\,x\,|\,K\,|\,k\,\rangle \;=\; k\,\langle\,x\,|\,k\,\rangle$$

Usando $\langle\,x\,|\,K\,|\,\psi\,\rangle \;=\; \text{-}\,i\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\langle\,x\,|\,\psi\,\rangle$: $$\text{-}\,i\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\langle\,x\,|\,k\,\rangle \;=\; k\,\langle\,x\,|\,k\,\rangle$$

Integrando : $$\langle\,x\,|\,k\,\rangle \;=\; C\,e^{\,i\,k\,x}$$

Obtenemos una base continua $\{|\,k\,\rangle\}$, donde C se fija por normalización:

$$\langle\,k\,|\,k'\rangle = \delta(k-k') \quad\Longrightarrow\quad \langle\,x\,|\,k\,\rangle = \tfrac{1}{\sqrt{2\pi}}\,e^{\,i\,k\,x}$$

El operador K corresponde al observable longitud de onda, $k = \dfrac{2\pi}{\lambda}$
Sus autoestados son las ondas planas.

Valor medio de K

$$\langle\, x \,|\, K^n | \,\psi\, \rangle \;=\; (\text{-}\, i)^n \, \tfrac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n} \langle\, x \,|\, \psi \,\rangle$$

$$\begin{aligned}
\langle\, \psi \,|\, K \,|\, \psi \,\rangle \;&=\; \int \langle\, \psi \,|\, x \,\rangle \langle\, x \,|\, K \,|\, \psi \,\rangle \, \mathrm{d}x \\
&=\; \int \langle\, \psi \,|\, x \,\rangle \; (\text{-}i) \, \tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \langle\, x \,|\, \psi \,\rangle \, \mathrm{d}x \\
&=\; \int \psi^*(x) \; (\text{-}i) \, \tfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \psi(x) \, \mathrm{d}x
\end{aligned}$$

$$\boxed{\langle\, \psi \,|\, K \,|\, \psi \,\rangle = \int \psi^*(x) \; (\text{-}i) \, \frac{\mathrm{d}\psi(x)}{\mathrm{d}x} \, \mathrm{d}x}$$

El conmutador $[X, K]$

A partir de los elementos de matriz de X y K en la base $\{|x\rangle\}$:

$$\langle x_1|X|x_2\rangle = x_1\,\delta(x_1 - x_2) \qquad\qquad \langle x_1|K|x_2\rangle = -i\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_1}\delta(x_1 - x_2)$$

calculamos los elementos de mariz de XK y KX :

$$\begin{cases} \langle x_1|XK|x_2\rangle = \int \langle x_1|X|x\rangle\langle x|K|x_2\rangle\,\mathrm{d}x = -i\int x_1\,\delta(x_1 - x)\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\delta(x - x_2)\,\mathrm{d}x = -i\,x_1\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_1}\,\delta(x_1 - x_2) \\ \langle x_1|KX|x_2\rangle = \int \langle x_1|K|x\rangle\langle x|X|x_2\rangle\,\mathrm{d}x = -i\int \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_1}\delta(x_1 - x)\;\, x\,\delta(x - x_2)\,\mathrm{d}x = -i\,x_2\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_1}\,\delta(x_1 - x_2) \end{cases}$$

Antes de restar usamos
$$\begin{cases} x_1\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_1}\,\delta(x_1 - x_2) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_1}\,[x_1\,\delta(x_1 - x_2)] - \;\delta(x_1 - x_2) \\ x_2\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_1}\,\delta(x_1 - x_2) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_1}\,[x_2\,\delta(x_1 - x_2)] = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_1}\,[x_1\delta(x_1 - x_2)] \end{cases}$$

y obtenemos

$$\langle x_1|\,[X, K]\,|x_2\rangle = -i\,x_1\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_1}\,\delta(x_1 - x_2) + i\,x_2\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x_1}\,\delta(x_1 - x_2) = i\,\delta(x_1 - x_2) = i\,\langle x_1|x_2\rangle$$

$$\boxed{[X, K] = i}$$

Transformaciones infinitesimales en cuántica

Cambio del valor de expectación de un observable G ante una traslación infinitesimal

$$\left\{\begin{array}{c} |\psi\rangle \\ \langle G\rangle = \langle\psi|G|\psi\rangle \end{array}\right. \quad \xrightarrow{D_\epsilon = 1 - i\,\epsilon\,K} \quad \left\{\begin{array}{c} |\psi'\rangle = D_\epsilon\,|\psi\rangle \\ \langle G\rangle' = \langle\psi'|G|\psi'\rangle \end{array}\right.$$

La relación entre $\langle G\rangle$ y $\langle G\rangle'$ es

$$\begin{aligned} \langle G\rangle' &= \langle\psi'|G|\psi'\rangle = \langle\psi|D_\epsilon^\dagger G\,D_\epsilon|\psi\rangle = \\ &= \langle\psi|\,(1{+}i\epsilon K)\,G\,(1{-}i\epsilon K)\,|\psi\rangle = \\ &= \langle\psi|\left[G + i\epsilon KG{-}i\epsilon GK + \mathscr{O}(\epsilon^2)\right]|\psi\rangle = \\ &= \langle\psi|G|\psi\rangle - i\,\epsilon\langle\psi|\,[G,K]\,|\psi\rangle \end{aligned}$$

$$\boxed{\langle\, G\,\rangle' = \langle\, G\,\rangle + \epsilon\,\frac{\langle\,[G,K]\,\rangle}{i}}$$

Formulación canónica de la Mecánica Clásica

Se expresa en términos de los corchetes de Poisson:

$$\left\{g\,,f\right\} = \sum_i \left[\frac{\partial g}{\partial x_i}\frac{\partial f}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{\partial g}{\partial p_i}\right] \qquad \text{donde} \qquad p_i = \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{x}_i}$$

Algunos corchetes importantes son:

$$\left\{x, p_x\right\} = 1 \qquad \left\{x_i, x_j\right\} = \left\{p_i, p_j\right\} = 0 \qquad \left\{x_i, p_j\right\} = \delta_{ij}$$

Una magnitud arbitraria $g(x_i, p_i)$ cambia en dg ante transformaciones infinitesimales:

traslaciones dx	rotaciones $d\theta$	desplazamiento temporal dt
$dg = dx\left\{g, p_x\right\}$	$dg = d\theta\left\{g, l_z\right\}$	$dg = dt\left\{g, H\right\}$

Formulación canónica de la Mecánica Clásica

Aplicando $\dfrac{dg}{dt} = \{g, H\}$ a la posición y el momento:

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = \{x, H\} = +\dfrac{\partial H}{\partial p} \\[2ex] \dfrac{dp}{dt} = \{p, H\} = -\dfrac{\partial H}{\partial x} \end{cases}$$

(Ecuaciones de Hamilton)

Y para una partícula sometida a un potencial V : $\quad H = \dfrac{p^2}{2m} + V(x)$

$$\begin{cases} \dfrac{dx}{dt} = +\dfrac{\partial H}{\partial p} = \dfrac{p}{m} \\[2ex] \dfrac{dp}{dt} = -\dfrac{\partial H}{\partial x} = -\dfrac{\partial V}{\partial x} = F(x) \end{cases} \quad \Longrightarrow \quad m\,\frac{d^2x}{dt^2} = F(x)$$

(Newton)

Del operador K al operador P

En cuántica, el generador de traslaciones infinitesimales es el observable K, que corresponde al número de onda, $k = \dfrac{2\pi}{\lambda}$

En clásica, el generador de traslaciones infinitesimales es el impulso lineal p

$$\begin{cases} \langle G\rangle' = \langle G\rangle + \epsilon \, \dfrac{\langle\, [G, K]\,\rangle}{i} \\ g' = g + \epsilon \, \{\, g\,,\, p \,\} \end{cases}$$

Veremos que el conmutador cuántico se corresponde con el corchete clásico.

Pero no podemos identificar P con K pues tienen distintas unidades :

$$[\,P\,] = \mathrm{kg\,m\,s^{-1}} \qquad [\,K\,] = \mathrm{m^{-1}} \qquad [\,P\,] = [\,\mathrm{Accion}\,]\,[\,K\,]$$

Necesitamos saber a que p (en $\mathrm{kg\,m\,s^{-1}}$) le corresponde un $k = 2\pi/\lambda$ (en $\mathrm{m^{-1}}$)

Respuesta: $\hbar$ $\qquad P = \hbar\, K \qquad [\,\hbar\,] = \mathrm{kg\,m^2\,s^{-1}} = [\,\mathrm{Accion}\,]$

Remplazamos K por $\dfrac{P}{\hbar}$

Del operador K al operador P

$$D_\epsilon = 1 - i\,\epsilon\,K \qquad \longrightarrow \qquad D_\epsilon = 1 - \frac{i}{\hbar}\,\epsilon\,P$$

$$D_\xi = e^{-i\xi K} \qquad \longrightarrow \qquad D_\xi = e^{-\frac{i}{\hbar}\xi P}$$

$$[X, K] = i \qquad \longrightarrow \qquad [X, P] = i\hbar$$

$$\langle x \,|\, k \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{ikx} \qquad \longrightarrow \qquad \langle x \,|\, p \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{\frac{i}{\hbar}px}$$

$$\langle x \,|\, K \,|\, \psi \rangle = -i\,\frac{\partial \psi}{\partial x} \qquad \longrightarrow \qquad \langle x \,|\, P \,|\, \psi \rangle = -i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial x}$$

$$\langle \psi \,|\, K \,|\, \psi \rangle = \int \psi^* \left[-i\,\frac{\partial \psi}{\partial x} \right] \mathrm{d}x \qquad \longrightarrow \qquad \langle \psi \,|\, P \,|\, \psi \rangle = \int \psi^* \left[-i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial x} \right] \mathrm{d}x$$

Unidades Naturales (U.N.) vs. MKS

		U.N.		MKS	
$D\,(\mathrm{d}x) = 1 - i\,\mathrm{d}x\,P$	$[P]$	m^{-1}		$\mathrm{kg\,m\,s}^{-1}$	$D\,(\mathrm{d}x) = 1 - \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{d}x\,P$
$D\,(\mathrm{d}\theta) = 1 - i\,\mathrm{d}\theta\,L$	$[L]$	1	$\xrightarrow[\mathrm{kg\,m^2\,s^{-1}}]{\hbar}$	$\mathrm{kg\,m^2\,s}^{-1}$	$D\,(\mathrm{d}\theta) = 1 - \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{d}\theta\,L$
$D\,(\mathrm{d}t) = 1 - i\,\mathrm{d}t\,H$	$[H]$	s^{-1}		$\mathrm{kg\,m^2\,s}^{-2}$	$D\,(\mathrm{d}t) = 1 - \frac{i}{\hbar}\,\mathrm{d}t\,H$

$$\hbar = 6.62 \times 10^{-34}\ \mathrm{kg\,m^2\,s^{-1}}$$

Conmutadores y corchetes de Poisson

Sean q y p dos operadores que satisfacen $[q,p] = i\hbar$.

Entonces para cualquier función analítica $F(z)$ vale :

$$[\,q, F(p)\,] = i\hbar\,\frac{\partial F}{\partial p} \qquad [\,p, F(q)\,] = -i\hbar\,\frac{\partial F}{\partial q}$$

En forma similar, para cualquier $F(u,v)$ y $G(u.v)$ analíticas :

$$\big[F(q,p), G(q,p)\big] = i\hbar\left(\frac{\partial F}{\partial q}\frac{\partial G}{\partial p} - \frac{\partial G}{\partial q}\frac{\partial F}{\partial p}\right) + \mathscr{O}(\hbar^2)$$

Tomando valor de expectación sobre un $|\psi\rangle$ se tiene la *relación matemática* :

$$\boxed{\lim_{\hbar\to 0}\ \tfrac{1}{i\hbar}\langle\,[\,F\,,\,G\,]\,\rangle\ =\ \langle\,\{\,F\,,\,G\,\}\,\rangle}$$

Cuantización Canónica

En clásica, las tres relaciones

$$dg = dx\,\{g, p_x\} \qquad dg = d\theta\,\{g, l_z\} \qquad dg = dt\,\{g, H\}$$

se pueden resumir en

$$dg = \epsilon\,\{g, t\}$$

➪ t es una magnitud física que genera cierta transformación canónica infinitesimal.

➪ dg nos dice como cambia la magnitud g ante la transformación t.

En cuántica:

➪ la magnitud g está representada por un operador hermítico G, a determinar.

➪ la transformación infinitesimal por un operador unitario $U(\epsilon) = 1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon\, T$ (T hermítico).

➪ la variación $\mathrm{d}\langle G\rangle$ está determinada por el cambio en el estado: $|\psi'\rangle = (1 - \frac{i}{\hbar}\epsilon T)|\psi\rangle$

$$\left.\begin{aligned}
\mathrm{d}\langle G\rangle &= \langle\psi'|G|\psi'\rangle - \langle\psi|G|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|\,(1 + \tfrac{i}{\hbar}\epsilon T)\,G\,(1 - \tfrac{i}{\hbar}\epsilon T)\,|\psi\rangle - \langle\psi|G|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|\,(G + \tfrac{i}{\hbar}\epsilon\,TG - \tfrac{i}{\hbar}\epsilon\,GT)\,|\psi\rangle - \langle\psi|G|\psi\rangle \\
&= \tfrac{i}{\hbar}\,\epsilon\,\langle\psi|\,[T, G]\,|\psi\rangle
\end{aligned}\right\} \qquad \mathrm{d}\langle G\rangle = \epsilon\,\frac{1}{i\hbar}\langle\,[G, T]\,\rangle$$

Cuantización Canónica

Comparemos las ecuaciones de evolución clásica y cuántica :

$$\mathrm{d}g = \epsilon \left\{ g, t \right\} \qquad\qquad \mathrm{d}\langle\, G\,\rangle = \epsilon\, \tfrac{1}{i\hbar} \langle\, [\, G, T\,]\,\rangle$$

Tenemos además :

$$\lim_{\hbar\to 0}\ \tfrac{1}{i\hbar} \langle\, [\, G, T\,]\,\rangle \;=\; \langle\, \{\, G, T\,\}\,\rangle$$

$$\lim_{\hbar\to 0}\ \langle\, GT\,\rangle \;=\; \langle\, G\,\rangle \langle\, T\,\rangle$$

Entonces en el límite cásico ($\hbar \to 0$) las ecuaciones para $\mathrm{d}g$ y $\mathrm{d}\langle\, G\,\rangle$ son similares,

$$\mathrm{d}g = \epsilon \left\{ g, t \right\} \qquad\qquad \mathrm{d}\langle G\rangle = \epsilon \left\{ \langle G\rangle, \langle T\rangle \right\}$$

si la regla de cuantización de magnitudes físicas (“cuantización canónica”) es:

1. A cada magnitud física $g(x_i, p_j)$ le corresponde el operador $G = g(X_i, P_j)$
2. Los operadores X_i y P_j satisfacen $[X_i, P_j] = i\hbar\, \delta_{ij}$

Operador traslación en 3-dimensiones

Particule que se mueve en el espacio

$\{|\vec{r}\rangle\}$ $\quad \hat{X}|\vec{r}\rangle = x|\vec{r}\rangle \quad \hat{Y}|\vec{r}\rangle = y|\vec{r}\rangle \quad \hat{Z}|\vec{r}\rangle = z|\vec{r}\rangle$

$\{|x,y,z\rangle\}$

Un desplazomiento está identificado por 3 porams.

$D(\vec{\xi}) = D(\xi_x, \xi_y, \xi_z)$, por que definimos tres operadores

$$\begin{cases} D(\epsilon_x, 0, 0) \equiv 1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon_x P_x \\ D(0, \epsilon_y, 0) \equiv 1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon_y P_y \\ D(0, 0, \epsilon_z) \equiv 1 - \frac{i}{\hbar} \epsilon_z P_z \end{cases}$$

$$D(\epsilon_x, 0, 0)\, D(0, \epsilon_y, 0) = D(0, \epsilon_y, 0)\, D(\epsilon_x, 0, 0)$$

$$\Rightarrow P_x P_y = P_y P_x \qquad \Rightarrow [P_x, P_y] = 0$$

Operador traslación en 3-dimensiones

Sea $|\psi'\rangle = D(\epsilon_x, 0, 0)\,|\psi\rangle$.

Entonces $\langle\psi'|Y|\psi'\rangle = \langle\psi|Y|\psi\rangle$ $\quad\quad \langle y\rangle' = \langle y\rangle$

$$\langle Y\rangle' = \langle\psi'|\hat{Y}|\psi'\rangle = \langle\psi|\left(1 + i\frac{\epsilon_x}{\hbar}P_x\right) Y \left(1 - i\frac{\epsilon_x}{\hbar}P_x\right)|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi|Y|\psi\rangle + \epsilon_x \frac{\langle[X, P_y]\rangle}{i\hbar}$$

$$\langle y\rangle' = \langle Y\rangle \Rightarrow [X, P_y] = 0$$

$$\rightarrow\ [R_i, P_j] = i\hbar\,\delta_{ij}$$