

5 Miscelánea

Estudiaremos en este capítulo tres tópicos independientes. Primero estudiaremos el tratamiento cuántico de un sistema de partículas idénticas. Luego introduciremos el formalismo de la matriz de densidad y finalmente haremos una breve introducción a dos ecuaciones de onda relativistas: la ecuación de Klein-Gordon y la ecuación de Dirac.

5.1 Cuarentaytresava lección

En esta lección haremos el estudio de un sistema cuántico formado por n partículas idénticas (n electrones por ejemplo) las cuales son indistinguibles desde el punto de vista tanto clásico como cuántico. Como veremos, hay diferencia en su tratamiento desde el punto de vista clásico y desde el punto de vista cuántico.

En mecánica clásica describimos el movimiento de un sistema físico de varias partículas especificando sus órbitas individuales las cuales se obtienen de las ecuaciones de movimiento y de las condiciones de frontera iniciales, y aunque las partículas son indistinguibles unas de otras, tiene sentido decir que en un instante de tiempo determinado la partícula a se mueve en la órbita A , la partícula b se mueve en la órbita B , la partícula c se mueve en la órbita C , etc.; y cualquier permutación de las órbitas de un par de partículas (como por ejemplo que la partícula A se mueva en la órbita b y la partícula B en la órbita a , etc.) constituirá una solución diferente al problema clásico, ya que dicho movimiento corresponderá a un conjunto de condiciones de frontera iniciales diferentes.

5.1.1 Partículas idénticas

En mecánica cuántica el sistema de partículas idénticas está caracterizado por una única función de ondas (vector de estado) la cual depende de las variables dinámicas de todas las partículas. En lugar de especificar las órbitas de cada partícula individual, la información que nos da la mecánica cuántica es puramente probabilística acerca de la distribución de las partículas sobre los estados individuales; es decir para dos partículas idénticas solo nos informa sobre la probabilidad de hallar una partícula en la órbita a y la otra en la órbita b , sin especificar que partícula se mueve en que órbita, ya que el concepto de trayectoria clásica desaparece por completo. Así pues, el intercambio de dos partículas idénticas no puede afectar el problema dinámico desde el punto de vista cuántico y la información probabilística que del estado podamos tener. Necesitaremos entonces introducir un nuevo postulado en la teoría que nos permita manejar la información probabilística que maneja la mecánica cuántica para un sistema de partículas idénticas.

5.1.2 Caso de dos partículas idénticas

Para iniciar el estudio del problema, comencemos por considerar un sistema físico conformado por solo dos partículas idénticas a y b ; partículas que describimos por dos conjuntos independientes de variables q^a y q^b (los cuales incluyen tanto los grados macroscópicos de libertad como las coordenadas intrínsecas del sistema como por ejemplo el espín). Los posibles estados cuánticos individuales de cada una de esas partículas idénticas los describiremos por las letras griegas $\alpha, \beta, \dots, \omega$ (asumiremos por simplicidad que el número de estados es finito). Estas letras griegas denotan el conjunto de todos los números cuánticos de un conjunto máximo de operadores, los cuales conmutan todos entre sí. En la representación q , el conjunto de todos los estados será entonces:

$$\{\Phi_\alpha(q^a), \Phi_\beta(q^a), \dots, \Phi_\omega(q^a)\}. \quad (5.1)$$

$$\{\Phi_\alpha(q^b), \Phi_\beta(q^b), \dots, \Phi_\omega(q^b)\}. \quad (5.2)$$

En el desarrollo que sigue es necesario tener en cuenta que debido a la indistinguibilidad de las dos partículas, todos los observables físicos

Ω y sus operadores cuánticos $\hat{\Omega}$, incluyendo el Hamiltoniano \hat{H} del sistema, son simétricos con respecto al intercambio de las coordenadas de las dos partículas; es decir

$$\hat{\Omega}(q^a, q^b) = \hat{\Omega}(q^b, q^a), \quad \hat{H}(q^a, q^b) = \hat{H}(q^b, q^a). \quad (5.3)$$

Utilizando ahora los estados de las partículas individuales explícitos en (5.1) y (5.2), podemos construir el conjunto de todos los estados cuánticos posibles para el conjunto de las dos partículas individuales, el cual es

$$\begin{aligned} & \{ \Phi_\alpha(q^a)\Phi_\alpha(q^b), \Phi_\alpha(q^a)\Phi_\beta(q^b), \dots, \Phi_\alpha(q^a)\Phi_\omega(q^b), \\ & \Phi_\beta(q^a)\Phi_\alpha(q^b), \Phi_\beta(q^a)\Phi_\beta(q^b), \dots, \Phi_\beta(q^a)\Phi_\omega(q^b), \\ & \dots, \\ & \Phi_\omega(q^a)\Phi_\alpha(q^b), \Phi_\omega(q^a)\Phi_\beta(q^b), \dots, \Phi_\omega(q^a)\Phi_\omega(q^b) \}, \end{aligned}$$

en donde el estado $\Phi_\rho(q^a)\Phi_\sigma(q^b)$ tiene por significado que la partícula a se encuentra en el estado ρ y la partícula b se encuentra en el estado σ , el cual es matemáticamente diferente al estado $\Phi_\sigma(q^a)\Phi_\rho(q^b)$ el que tiene por significado que la partícula a se encuentra en el estado σ y la partícula b se encuentra en el estado ρ .

Ahora, el estado físico mas general que me describe mi sistema de dos partículas está dado por una superposición de todos los estados posibles de la forma

$$\Phi(q^a, q^b) = \sum_{\sigma, \rho=\alpha}^{\omega} c_{\sigma\rho} \Phi_\sigma(q^a)\Phi_\rho(q^b), \quad (5.4)$$

estado general que no admite la interpretación que la partícula a ocupa un determinado estado y la partícula b otro. Todo lo que podemos obtener de (5.4) es la probabilidad de encontrar la partícula a en un estado digámos σ y la partícula b en otro estado digamos ρ , probabilidad que de acuerdo con los postulados de la mecánica cuántica está dada por $|c_{\sigma\rho}|^2$, la que matemáticamente es diferente a $|c_{\rho\sigma}|^2$ que es la probabilidad de hallar la partícula a en el estado ρ y la partícula b en el estado σ . De esta manera, la probabilidad de hallar la partícula a en el estado

ρ , independiente del estado en que se encuentre la partícula b está dado por $\sum_{\sigma=\alpha}^{\omega} |c_{\rho\sigma}|^2$, y la probabilidad de hallar la partícula b en el estado σ independiente del estado en que se encuentre la partícula a está dado por $\sum_{\rho=\alpha}^{\omega} |c_{\rho\sigma}|^2$.

Intercambiando ahora el rótulo de las dos partículas $q^a \leftrightarrow q^b$ obtenemos de (5.4) el vector matemáticamente diferente

$$\Psi(q^a, q^b) = \Phi(q^b, q^a) = \sum_{\sigma, \rho=\alpha}^{\omega} c_{\sigma\rho} \Phi_{\sigma}(q^b) \Phi_{\rho}(q^a). \quad (5.5)$$

Debido a que los coeficientes $c_{\rho\sigma}$ son hasta aquí completamente arbitrarios, el anterior es sin lugar a dudas un elemento diferente de nuestro espacio de Hilbert ya que por ejemplo la probabilidad de encontrar a en el estado ρ y b en el estado σ no es $|c_{\rho\sigma}|^2$ si no que es $|c_{\sigma\rho}|^2$. Debido a la indistinguibilidad de las partículas, el razonamiento anterior conduce a una contradicción.

Para remediar esta situación debemos construir nuestra teoría de tal forma que $|c_{\rho\sigma}|^2 = |c_{\sigma\rho}|^2$. Condición que puede satisfacerse al imponer una de las dos siguientes restricciones posibles:

- $\Phi(q^a, q^b)$ debe ser simétrica en las variables q^a, q^b .
- $\Phi(q^a, q^b)$ debe ser antisimétrica en las variables q^a, q^b ,

restricciones que implican respectivamente que $c_{\sigma\rho} = c_{\rho\sigma}$ y $c_{\sigma\rho} = -c_{\rho\sigma}$. Para lograr esta situación, la cual no es automáticamente válida, es necesario introducir en la teoría el siguiente postulado:

Postulado No. 5

Para un sistema de partículas idénticas, solo son cuanticamente posibles aquellos estados que son, o completamente simétricos, o completamente antisimétricos con respecto al intercambio de cualquier par de partículas del sistema.

El desarrollo matemático de este postulado requiere de la introducción del operador permutación \hat{P} , el cual para un sistema de un par de partículas a y b es tal que

$$\hat{P}K(q^a, q^b) = K(q^b, q^a),$$

donde $K(q^a, q^b)$ es cualquier magnitud física o función de onda, función de las coordenadas generalizadas de las dos partículas. Como puede demostrarse, los autovalores de este operador son ± 1 lo cual puede verse de la siguiente propiedad del operador \hat{P} :

$$\hat{P}^2 K(q^a, q^b) = \hat{P} K(q^b, q^a) = K(q^a, q^b),$$

donde si $\Phi(q^a, q^b)$ son las autofunciones del operador \hat{p} , entonces

$$\hat{P}\Phi(q^a, q^b) = \pm 1\Phi(q^a, q^b),$$

donde el autovalor $+1$ esta asociado a las funciones pares respecto al intercambio de las dos partículas y el autovalor -1 está asociado a las autofunciones impares respecto al mismo intercambio.

Teorema

La paridad que pueda tener una función de onda no cambia con el tiempo.

Para demostrar este teorema, tenemos que mostrar que el operador \hat{P} conmuta con el Hamiltoniano, es decir que $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$ ya que obviamente, \hat{P} no depende explícitamente del tiempo, lo anterior debido a que

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{P} \rangle_\psi = \langle \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{P}] + \frac{\partial}{\partial t} \hat{P} \rangle_\psi.$$

Que $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$ puede verse del hecho que, debido a la indistinguibilidad de las dos partículas, el Hamiltoniano es una función simétrica bajo el intercambio de las coordenadas de las dos partículas; es decir, tenemos que

$$\begin{aligned} \hat{P}\hat{H}\Phi &= \hat{P}H(q^a, q^b)\Phi(q^a, q^b) = H(q^b, q^a)\Phi(q^b, q^a) \\ &= H(q^a, q^b)\Phi(q^b, q^a) = H(q^a, q^b)\hat{P}\Phi(q^a, q^b) = \hat{H}\hat{P}\Phi. \end{aligned}$$

Lo anterior tiene como consecuencia que una función de onda par (impar) en un instante de tiempo, permanecerá par (impar) en todo instante de tiempo, condición indispensable para que el postulado anterior tenga sentido físico.

Determinante se Slater

Para el caso de dos partículas idénticas que se encuentran una en el estado α y la otra en el estado β , la función de onda antisimétrica la podemos escribir como el siguiente determinante (conocido en la literatura como determinante se Slater):

$$\psi_{\alpha\beta}(q_a, q_b) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_\alpha(q_a) & \psi_\beta(q_a) \\ \psi_\alpha(q_b) & \psi_\beta(q_b) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(q_a)\psi_\beta(q_b) - \psi_\alpha(q_b)\psi_\beta(q_a)] \quad (5.6)$$

donde el factor $1/\sqrt{2}$ es un factor de normalización.

Desafortunadamente, para la función de onda totalmente simétrica de dos partículas idénticas

$$\psi_{\alpha\beta}(q_a, q_b) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_\alpha(q_a)\psi_\beta(q_b) + \psi_\alpha(q_b)\psi_\beta(q_a)], \quad (5.7)$$

no existe una forma matemática cerrada similar al determinante de Slater. Una manera simbólica de escribir esta función de onda podría ser

$$\psi_{\alpha\beta}(q_a, q_b) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\mathcal{P}=\alpha\beta} \psi_\alpha(q_a)\psi_\beta(q_b), \quad (5.8)$$

donde $\sum_{\mathcal{P}=\alpha\beta}$ se refiere a sumar sobre todas las permutaciones posibles de los subíndices α y β . De igual manera podríamos escribir el determinante de Slater de manera simbólica como

$$\psi_{\alpha\beta}(q_a, q_b) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\mathcal{P}=\alpha\beta} (-1)^{\mathcal{P}} \psi_\alpha(q_a)\psi_\beta(q_b), \quad (5.9)$$

donde $(-1)^{\mathcal{P}} = 1$ para una permutación par de los subíndices α y β e igual a -1 para una permutación impar de los mismos subíndices.

5.1.3 Tres partículas idénticas

Las formulas anteriores se pueden escribir para el caso de tres partículas idénticas que se encuentran una en el estado α , otra en el estado β

y la tercera en el estado γ . La función de onda totalmente antisimétrica quedaría entonces como:

$$\begin{aligned}
 \psi_{\alpha\beta\gamma}^a(q_a, q_b, q_c) &= \frac{1}{\sqrt{3!}} \begin{vmatrix} \psi_\alpha(q_a) & \psi_\beta(q_a) & \psi_\gamma(q_a) \\ \psi_\alpha(q_b) & \psi_\beta(q_b) & \psi_\gamma(q_b) \\ \psi_\alpha(q_c) & \psi_\beta(q_c) & \psi_\gamma(q_c) \end{vmatrix} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{3!}} [\psi_\alpha(q_a)\psi_\beta(q_b)\psi_\gamma(q_c) + \psi_\alpha(q_b)\psi_\beta(q_c)\psi_\gamma(q_a) \\
 &\quad + \psi_\alpha(q_c)\psi_\beta(q_a)\psi_\gamma(q_b) - \psi_\alpha(q_c)\psi_\beta(q_b)\psi_\gamma(q_a) \\
 &\quad - \psi_\alpha(q_a)\psi_\beta(q_c)\psi_\gamma(q_b) - \psi_\alpha(q_b)\psi_\beta(q_a)\psi_\gamma(q_c)] \\
 &= \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_{\mathcal{P}=\alpha\beta\gamma} (-1)^{\mathcal{P}} \psi_\alpha(q_a)\psi_\beta(q_b)\psi_\gamma(q_c),
 \end{aligned}$$

donde $(-1)^{\mathcal{P}} = 1$ para una permutación par de los subíndices α , β y γ , e igual a -1 para una permutación impar de los mismos tres subíndices.

Para el caso de una función de onda totalmente simétrica de tres partículas tendríamos:

$$\begin{aligned}
 \psi_{\alpha\beta\gamma}^s(q_a, q_b, q_c) &= \frac{1}{\sqrt{3!}} [\psi_\alpha(q_a)\psi_\beta(q_b)\psi_\gamma(q_c) + \psi_\alpha(q_b)\psi_\beta(q_c)\psi_\gamma(q_a) \\
 &\quad + \psi_\alpha(q_c)\psi_\beta(q_a)\psi_\gamma(q_b) + \psi_\alpha(q_c)\psi_\beta(q_b)\psi_\gamma(q_a) \\
 &\quad + \psi_\alpha(q_a)\psi_\beta(q_c)\psi_\gamma(q_b) + \psi_\alpha(q_b)\psi_\beta(q_a)\psi_\gamma(q_c)] \\
 &= \frac{1}{\sqrt{3!}} \sum_{\mathcal{P}=\alpha\beta\gamma} \psi_\alpha(q_a)\psi_\beta(q_b)\psi_\gamma(q_c),
 \end{aligned}$$

donde $\sum_{\mathcal{P}=\alpha\beta\gamma}$ se refiere a sumar sobre todas las permutaciones posibles de los subíndices α , β y γ

5.1.4 n partículas idénticas

Todo lo anteriores lo podemos generalizar para el caso de n partículas idénticas que se encuentran una en el estado α , otra en el estado β , etc. y la enésima en el estado ω . La función de onda totalmente antisimétrica la podemos escribir entonces para este caso como el siguiente

determinante de Slater:

$$\begin{aligned} \psi_{\alpha\beta\dots\omega}^a(q_a, q_b, \dots, q_z) &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \psi_\alpha(q_a) & \psi_\beta(q_a) & \dots & \psi_\omega(q_a) \\ \psi_\alpha(q_b) & \psi_\beta(q_b) & \dots & \psi_\omega(q_b) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_\alpha(q_z) & \psi_\beta(q_z) & \dots & \psi_\omega(q_z) \end{vmatrix} \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\mathcal{P}=\alpha\beta\dots\omega} (-1)^{\mathcal{P}} \psi_\alpha(q_a) \psi_\beta(q_b) \dots \psi_\omega(q_z), \end{aligned}$$

donde $(-1)^{\mathcal{P}} = 1$ para una permutación par de los subíndices $\alpha, \beta, \dots, \omega$, e igual a -1 para una permutación impar de los n subíndices.

Para el caso de una función de onda totalmente simétrica de n partículas tendríamos:

$$\psi_{\alpha\beta\dots\omega}^s(q_a, q_b, \dots, q_z) = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum_{\mathcal{P}=\alpha\beta\dots\omega} \psi_\alpha(q_a) \psi_\beta(q_b) \dots \psi_\omega(q_z),$$

donde $\sum_{\mathcal{P}=\alpha\beta\dots\omega}$ se refiere a sumar sobre todas las permutaciones posibles de los subíndices $\alpha, \beta \dots \omega$.

Teorema de espín y estadísticas

Aunque no es el objeto de este curso hacer una demostración del llamado teorema de espín y estadísticas, es importantísimo mencionar que en teoría cuántica de campos se puede mostrar que la función de onda total de un sistema de partículas idénticas de espín entero (Bosones) debe ser totalmente simétrica bajo el intercambio de un par de partículas (y debe satisfacer la llamada estadística de Bose-Einstein) y la función de onda de un sistema de partículas idénticas de espín semientero (Fermiones) debe ser completamente antisimétrica bajo el intercambio de un par de partículas (y deben satisfacer la llamada estadística de Fermi-Dirac).

Un estudio detallado de las estadísticas clásicas y cuánticas es el tema de un curso de física estadística. A manera de introducción veamos cual es la situación estadística de dos partículas idénticas que pueden ocupar solo dos estados posibles α y β , con q_a, q_b los grados de libertad

para las dos partículas las cuales no tienen ninguna interacción entre ellas:

- Clásicamente hay cuatro estados posibles, todos igualmente probables: $\Phi_\alpha(q_a)\Phi_\beta(q_a)$; $\Phi_\alpha(q_a)\Phi_\beta(q_b)$; $\Phi_\alpha(q_b)\Phi_\beta(q_a)$; $\Phi_\alpha(q_b)\Phi_\beta(q_b)$. La probabilidad de cada estado es $1/4$.
- Si las partículas son Fermiones cuánticos, hay un solo estado posible dado por $[\Phi_\alpha(q_a)\Phi_\beta(q_b) - \Phi_\alpha(q_b)\Phi_\beta(q_a)]/\sqrt{2}$. La probabilidad que el sistema esté en este estado es uno.
- Si las partículas son Bosones cuánticos, hay tres estados posibles, igualmente probables: $\Phi_\alpha(q_a)\Phi_\beta(q_a)$; $[\Phi_\alpha(q_a)\Phi_\beta(q_b) + \Phi_\alpha(q_b)\Phi_\beta(q_a)]/\sqrt{2}$; $\Phi_\alpha(q_b)\Phi_\beta(q_b)$. La probabilidad que se dé cada estado es $1/3$.

5.2 Cuarentaycuatroava Lección

En esta lección introduciremos el concepto de la matriz de densidad y sus aplicaciones en la mecánica cuántica. Este concepto, considerado por muchos como una nueva formulación de la teoría al mismo nivel que la formulación de Heisenberg o la formulación de la función de onda de Schrödinger, es de particular relevancia cuando se está trabajando con estados cuánticos que no son puros, sino que son una mezcla estadística de varios estados con probabilidades (factores de peso estadísticos) bien establecidas. La matriz densidad tiene su máxima aplicación en problemas cuánticos relacionados con la física estadística.

5.2.1 Introducción

Sea $\Phi^{(i)}$, $i = 1, 2, \dots, j$ un conjunto de estados normalizados puros que me representan un sistema físico dado, donde cada estado normalizado $\Phi^{(i)}$ tiene un factor de peso estadístico $\omega^{(i)}$. De conformidad con el formalismo de la mecánica cuántica, cada estado $\Phi^{(i)}$ lo podemos expandir en un conjunto completo de vectores $|\phi_n\rangle$, autovectores de un conjunto máximo de operadores del sistema físico en consideración. Es

decir

$$|\Phi^{(i)}\rangle = \sum_n c_n^{(i)} |\phi_n\rangle, \quad (5.10)$$

con $|c_n^{(i)}|^2$ la probabilidad con la cual el autoestado $|\phi_n\rangle$ ocurre en el estado puro $\Phi^{(i)}$. Además se debe cumplir que

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \delta_{nm}, \quad \sum_n |c_n^{(i)}|^2 = 1, \quad i = 1, 2, \dots, j.$$

En mecánica cuántica el problema básico es calcular el valor esperado de un operador (observable) arbitrario $\hat{\Omega}$, asociado con la magnitud física Ω , el cual para el estado puro normalizado $\Phi^{(i)}$ está dado por

$$\langle \hat{\Omega} \rangle_{\Phi^{(i)}} = \sum_{n,m} c_n^{(i)*} c_m^{(i)} \langle \phi_n | \hat{\Omega} | \phi_m \rangle = \sum_{n,m} c_n^{(i)*} c_m^{(i)} \Omega_{nm}. \quad (5.11)$$

El gran promedio del observable $\hat{\Omega}$ estará entonces dado por

$$\langle \hat{\Omega} \rangle = \sum_{i=1}^j \omega^{(i)} \langle \hat{\Omega} \rangle_{\Phi^{(i)}} = \sum_{n,m} \left(\Omega_{nm} \sum_{i=1}^j \omega^{(i)} c_n^{(i)*} c_m^{(i)} \right). \quad (5.12)$$

Este valor promedio de la superposición incoherente de los estados mixtos puede escribirse de una manera mucho más conveniente si se introduce el concepto de la llamada matriz densidad ρ , la cual se define como:

$$\rho_{mn} \equiv \sum_{i=1}^j \omega^{(i)} c_n^{(i)*} c_m^{(i)}, \quad (5.13)$$

con lo cual podemos escribir el gran valor promedio expresado en la ecuación (5.12) como

$$\langle \hat{\Omega} \rangle = \sum_{n,m} \rho_{mn} \Omega_{nm} = \sum_m (\rho \Omega)_{mm} = Tr.(\rho \Omega), \quad (5.14)$$

donde $Tr.$ significa la traza (la suma de los elementos de la diagonal) de la matrix en consideración.

Comparando ahora la expresión (5.13) con (5.10) podemos escribir los elementos en la diagonal de ρ como

$$\rho_{nn} = \sum_i \omega^{(i)} |c_n^{(i)}|^2, \quad (5.15)$$

que tienen como significado físico la probabilidad con la cual los estados de la base $|\phi_n\rangle$ ocurren en el ensamble estadístico completo formado por la totalidad de los estados puros $\Phi^{(i)}$.

Utilizando notación de Dirac podemos escribir de una manera conveniente las siguientes ecuaciones

$$c_n^{(i)} = \langle n|i\rangle,$$

lo cual implica que la matriz densidad en (5.13) la podemos escribir como

$$\rho_{mn} = \sum_i \langle m|i\rangle \omega^{(i)} \langle i|n\rangle, \quad (5.16)$$

lo que nos permite escribir la matriz de densidad como un operador de la siguiente forma:

$$\hat{\rho} = \sum_i |i\rangle \omega^{(i)} \langle i|. \quad (5.17)$$

Esta representación del operador $\hat{\rho}$ en la forma de suma sobre operadores de proyección resulta a menudo muy conveniente. En particular, podemos observar de inmediato que los autovectores de ρ son precisamente los posibles estados puros que pueda tener el sistema y los autovalores corresponden a los pesos estadístico de cada uno de esos estados. Nótese que si el sistema se encuentra en un estado puro $|\kappa\rangle$; entonces $\omega^{(i)} = \delta_{i\kappa}$ de tal manera que la matriz de densidad para el estado puro adquiere la forma

$$\hat{\rho}^P = |\kappa\rangle \langle \kappa|. \quad (5.18)$$

Entonces para un estado puro el operador de densidad $\hat{\rho}^P$ se convierte en un operador de proyección, el cual satisface obviamente la relación

$(\hat{\rho}^P)^2 = \hat{\rho}^P$. Ahora, para un estado puro, los valores esperados del observable $\hat{\Omega}$ se pueden escribir, de conformidad con (5.14), como

$$\langle \hat{\Omega} \rangle = \sum_m (\rho \Omega)_{mm} = \sum_m \langle m | \kappa \rangle \langle \kappa | \hat{\Omega} | m \rangle = \sum_m c_m^{(\kappa)} \langle \kappa | \hat{\Omega} | m \rangle = \langle \kappa | \hat{\Omega} | \kappa \rangle, \quad (5.19)$$

como debiera serlo (donde la expansión $|\kappa\rangle = \sum_m c_m^{(\kappa)} |m\rangle$ ha sido utilizada). De esta manera el formalismo de calcular valores esperados de observables utilizando la matriz de densidad es válido tanto para estados puros como para estados mixtos. Para estados puros la matriz densidad ρ^P se reduce simplemente a un operador de proyección.

De este punto en adelante es más conveniente pensar que la ecuación (5.14) es la definición de la matriz densidad de un sistema. Tenemos pues la siguiente definición:

5.2.2 La matriz densidad

El operador $\hat{\rho}$ el cual me caracteriza mi sistema físico (puro o mixto) se define como

$$\langle \hat{\Omega} \rangle_\rho \equiv Tr.(\hat{\rho} \hat{\Omega}),$$

para todo observable Ω del sistema físico.

De esta manera para calcular la matriz densidad de un sistema físico, la cual está caracterizada por n parámetros, debemos tomar n observables independientes del sistema físico $\hat{\Omega}_r$, $r = 1, 2, \dots, n$ y resolver el conjunto de n ecuaciones $Tr.(\hat{\rho} \hat{\Omega}_r) = \langle \hat{\Omega}_r \rangle$. Una vez que $\hat{\rho}$ ha sido determinado de esta manera, el valor esperado de cualquier otro observable $\hat{\Omega}$ puede calcularse utilizando la ecuación (5.14). De esta manera $\hat{\rho}$ puede mirarse como un objeto que me permite calcular cualquier valor esperado particular $\langle \hat{\Omega} \rangle$, partiendo del conocimiento inicial de un conjunto especial de valores $\langle \hat{\Omega}_r \rangle$. De esta manera el formalismo de la matriz densidad se convierte en una manera alternativa de manejar un sistema físico y podemos mirarlo bien como una formulación alterna de la teoría, en el sentido que un sistema físico queda exhaustivamente caracterizado cuando se conoce su matriz densidad $\hat{\rho}$.

Propiedades de $\hat{\rho}$

A continuación mostraremos las principales propiedades que debe tener la matriz densidad $\hat{\rho}$ que caracteriza un sistema físico:

1. $\hat{\rho}$ es un operador Hermítico

Lo cual se sigue de su definición (5.14), ya que para cada observable Ω (operador lineal acotado y hermítico), $\langle \hat{\Omega} \rangle$ es necesariamente un valor real. Por lo tanto

$$\hat{\rho}^\dagger = \hat{\rho}.$$

2. $Tr.\hat{\rho} = 1$.

Lo cual puede verse de la definición del operador $\hat{\rho}$ en (refgpm) utilizada con $\hat{\Omega} = \hat{I}$, con \hat{I} el operador identidad el cual tiene por valor esperado siempre 1.

3. $\hat{\rho}$ es un operador positivo, definido.

Para demostrar esta propiedad comencemos por considerar un operador $\hat{\Omega}$ que tiene solamente dos autovalores: 0 y 1. En la base en que $\hat{\Omega}$ es diagonal entonces $\Omega_{nm} = \delta_{nk}\delta_{mk}$, k un valor fijo arbitrario. Entonces

$$\langle \Omega \rangle = Tr.(\hat{\rho}\hat{\Omega}) = \sum_n (\rho\Omega)_{nn} = \sum_n \sum_m \rho_{nm}\Omega_{mn} = \sum_n \sum_m \rho_{nm}\delta_{mk}\delta_{km} = \rho_{kk}.$$

Pero el valor esperado de un operador de autovalores no negativos es siempre no negativo, lo cual implica que $\langle \hat{\Omega} \rangle \geq 0$, de donde podemos concluir que $\hat{\rho}$ es un operador positivo ya que

$$\rho_{kk} \geq 0, \quad (5.20)$$

resultado que es válido en cualquier base del sistema físico en consideración. Combinando este resultado con el hecho que $Tr.\hat{\rho} = 1$ tenemos que todos los elementos diagonales de $\hat{\rho}$ yacen entre cero y uno; es decir

$$0 \leq \rho_{kk} \leq 1. \quad (5.21)$$

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1.$$

Considere un sistema de coordenadas en las que $\hat{\rho}$ es diagonal. Utilizando entonces las dos propiedades anteriores tenemos que

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) = \sum_n \rho_{nn}^2 \leq \left(\sum_n \rho_{nn}\right)^2 = (\text{Tr}\rho)^2 = 1; \quad (5.22)$$

por la ciclicidad de la traza, esta no cambia bajo una transformación de similitud (un cambio de base), entonces en general podemos escribir

$$\text{Tr}(\hat{\rho}^2) \leq 1. \quad (5.23)$$

Utilizando ahora la hermiticidad de $\hat{\rho}$, es decir $\rho_{mn} = \rho_{nm}^*$, esta última relación la podemos escribir como

$$\sum_{mn} |\rho_{nm}|^2 \leq 1; \quad (5.24)$$

condición esta última que pone limitaciones serias en cada uno de los elementos de la matriz ρ .

5.2.3 Evolución temporal de $\hat{\rho}$

. Para $\hat{\Omega}$, un observable que no dependa explícitamente del tiempo,

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{\Omega}\rangle = \left\langle\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\Omega}]\right\rangle = \frac{d}{dt}\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{\Omega}) = \text{Tr}\left(\frac{d\rho}{dt}\hat{\Omega}\right).$$

De otro lado tenemos que

$$\begin{aligned} \left\langle\frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{\Omega}]\right\rangle &= \frac{i}{\hbar}\text{Tr}(\hat{\rho}[\hat{H}, \hat{\Omega}]) = \frac{i}{\hbar}\text{Tr}(\hat{\rho}\hat{H}\hat{\Omega} - \hat{\rho}\hat{\Omega}\hat{H}) \\ &= \text{Tr}(\hat{\rho}\hat{H}\hat{\Omega} - \hat{H}\hat{\rho}\hat{\Omega}) = \text{Tr}\left(\frac{i}{\hbar}[\hat{\rho}, \hat{H}]\hat{\Omega}\right), \end{aligned}$$

donde se ha hecho uso de la ciclicidad de la traza.

Comparando las dos expresiones anteriores tenemos que

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{\rho}, \hat{H},] \quad (5.25)$$

ecuación esta última que me determina la evolución temporal de la matriz densidad $\hat{\rho}$.

5.3 Cuarentaycincoava lección

La ecuación de Schrödinger de la mecánica cuántica no es covariante; es decir, no es invariante bajo una transformación de coordenadas de Lorentz (un cálculo detallado muestra que la ecuación si es invariante bajo las transformaciones de Galileo de la mecánica clásica). Para remediar esta situación se propusieron, en la segunda mitad de la década de 1920, dos ecuaciones las cuales si eran invariantes bajo las transformaciones de Lorentz. Estas ecuaciones son la base de la hoy conocida como mecánica cuántica relativista.

5.3.1 Introducción

La ecuación de Schrödinger la podemos obtener al hacer en el Hamiltoniano clásico de un sistema físico las siguientes substituciones

$$\hat{H} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{P} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla}, \quad \hat{r} \rightarrow \vec{r}; \quad (5.26)$$

de esta manera la ecuación

$$\hat{H} = \frac{P^2}{2m} + V(\vec{r})$$

la podemos escribir como la siguiente relación entre operadores

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + V(\vec{r}),$$

la cual, al ser aplicada sobre la función de onda del sistema físico ψ , produce automáticamente la ecuación de Schrödinger.

Para el caso de una partícula libre para la cual $V(\vec{r}) = 0$, la ecuación de Schrödinger toma la forma

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = \hat{H} \psi, \quad (5.27)$$

la cual trata el tiempo como una primera derivada y el espacio como una segunda derivada y evidentemente no puede ser invariante vajo las

transformaciones de Lorentz, las cuales tratan el espacio y el tiempo de manera equivalente.

La expresión relativista de la energía para una partícula libre de masa m y tri-momentum lineal \vec{P} es

$$E = c\sqrt{P^2 + m^2c^2}, \quad (5.28)$$

la cual con las sustituciones introducidas en (5.26) nos produce un Hamiltoniano de la forma

$$\hat{H} = c\sqrt{-\hbar^2\nabla^2 + m^2c^2}, \quad (5.29)$$

el cual tiene el inconveniente de no estar definido de manera única (una expansión en series de Maclaurin de la raíz cuadrada me produciría un número infinito de términos y por lo tanto sería equivalente a una ecuación y a una teoría no local).

5.3.2 Ecuación de Klein Gordn

Una de las formas de tratar de evitar el inconveniente anterior es utilizar, en lugar de la expresión en la ecuación (5.28), su valor al cuadrado; es decir

$$\hat{H}^2 \rightarrow P^2c^2 + m^2c^4 = E^2, \quad (5.30)$$

la cual, luego de los reemplazos inherentes en (5.26) nos produce la ecuación diferencial

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \nabla^2 \phi + m^2 c^4 \phi, \quad (5.31)$$

la cual podemos escribir de la forma

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \nabla^2 \phi + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \phi = 0, \quad (5.32)$$

y conocida en la literatura como la ecuación de Klein-Gordon.

Formulación covariante

Para una formulación covariante de la teoría, es conveniente trabajar con los dos cuadvectores siguientes, designados como cuadvectores contravariantes (denotados con el índice superior)

$$x^\mu = (x^0, x^1, x^2, x^3) = (ct, \vec{r}), \quad p^\mu = (p^0, p^1, p^2, p^3) = \left(\frac{E}{c}, \vec{P}\right). \quad (5.33)$$

Igualmente se introduce el tensor métrico

$$g^{\mu\nu} = g_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (5.34)$$

el cual nos permite bajar (y subir) índices e introducir de esta manera los cuadvectores covariantes

$$x_\mu = \sum_\nu g_{\mu\nu} x^\nu = (x_0, x_1, x_2, x_3) = (ct, -\vec{r}) \quad (5.35)$$

$$p_\mu = \sum_\nu g_{\mu\nu} p^\nu = (p_0, p_1, p_2, p_3) = \left(\frac{E}{c}, -\vec{P}\right). \quad (5.36)$$

Lo que nos permite escribir el siguiente invariante relativista

$$\sum_{\mu=1}^4 p^\mu p_\mu = p^0 p_0 - p^1 p_1 - p^2 p_2 - p^3 p_3 = \frac{E^2}{c^2} - \vec{P} \cdot \vec{P} = m^2 c^2, \quad (5.37)$$

el cual es equivalente a la expresión (5.30) de la energía relativista de una partícula libre.

Introduciendo ahora el cuadvector derivada espacial covariante como

$$\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \left(\frac{\partial}{\partial x^0}, \frac{\partial}{\partial x^1}, \frac{\partial}{\partial x^2}, \frac{\partial}{\partial x^3}\right) = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, \vec{\nabla}\right), \quad (5.38)$$

que con el uso del tensor métrico me permite hallar el cuadvector contravariante

$$\partial^\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x_\mu} = \left(\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}, -\vec{\nabla}\right), \quad (5.39)$$

con lo que podemos asociarle al cuádrimomentum p^μ el operador cuántico $p^\mu = i\hbar\partial^\mu$, es decir

$$p^0 = \frac{E}{c} = i\hbar\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}, \quad \vec{P} = -i\hbar\vec{\nabla},$$

de donde tenemos que

$$\sum_{\mu=0}^3 p^\mu p_\mu \equiv p^\mu p_\mu = -\hbar^2 \partial^\mu \partial_\mu = -\hbar^2 \square = m^2 c^2, \quad (5.40)$$

donde se ha introducido la definición del operador Dalambertiano como

$$\square = \partial^\mu \partial_\mu = \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t^2} - \nabla^2.$$

Con la ayuda de (5.40) podemos escribir entonces la ecuación

$$[\square + (\frac{mc}{\hbar})^2]\phi = [\frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t^2} - \nabla^2 + (\frac{mc}{\hbar})^2]\phi = 0, \quad (5.41)$$

la cual es la misma ecuación que se obtuvo en la ecuación (5.32).

5.3.3 Ecuación de Dirac

Una manera alterna de sacarle la raíz cuadrada al Hamiltoniano en (5.29) la propuso Dirac en 1928 para lo cual propuso una expresión de la forma

$$\hat{H} = c\sqrt{-\hbar^2\nabla^2 + m^2c^2} \rightarrow -i\hbar\left(\alpha_1\frac{\partial}{\partial x^1} + \alpha_2\frac{\partial}{\partial x^2} + \alpha_3\frac{\partial}{\partial x^3} + \right) + \beta mc^2, \quad (5.42)$$

donde α_i , $i = 1, 2, 3$ y β son números hipercomplejos (matrices) cuya álgebra y propiedades deben ser determinadas de condiciones físicas.

Para comenzar, calculemos primero el operador \hat{H}^2 . Tenemos

$$\begin{aligned}\hat{H}^2 &= \left(-i\hbar c \sum_{l=1}^3 \alpha_l \frac{\partial}{\partial x^l} + \beta mc^2 \right) \left(-i\hbar c \sum_{j=1}^3 \frac{\partial}{\partial x^j} + \beta mc^2 \right) \\ &= -c^2 \hbar^2 \sum_{l=1}^3 \sum_{k=1}^3 \frac{1}{2} (\alpha_k \alpha_l + \alpha_l \alpha_k) \frac{\partial^2}{\partial x^l \partial x^k} \\ &\quad - imc^3 \hbar \sum_{l=1}^3 (\beta \alpha_l + \alpha_l \beta) \frac{\partial}{\partial x^l} + m^2 c^4 \beta^2,\end{aligned}$$

el cual debe ser igual a $-c^2 \hbar^2 \nabla^2 + m^2 c^4$, para lo cual las matrices α_j y β deben satisfacer la siguiente álgebra:

$$\alpha_l \alpha_k + \alpha_k \alpha_l = 2\delta_{lk} \quad (5.43)$$

$$\alpha_l \beta + \beta \alpha_l = 0, \quad \beta^2 = 1, \quad (5.44)$$

la cual es llamada el álgebra de Clifford de las matrices de Dirac.

Propiedades de las matrices de Dirac

Las siguientes son algunas de las propiedades mas importantes de las matrices α_j , $j = 1, 2, 3$ y β .

- α_j , $j = 1, 2, 3$ y β son matrices Hermíticas. Esto se sigue del hecho que el Hamiltoniano \hat{H} debe ser hermítico y que el operador $\hat{p}^j \sim i\hbar \partial / \partial x_j = -i\hbar \partial / \partial x^j$ es también Hermítico.
- Los autovalores de α_j , $j = 1, 2, 3$ y β son solo ± 1 . Lo cual se sigue inmediatamente de la ecuación (5.44).
- La traza de las cuatro matrices α_j , $j = 1, 2, 3$ y β es nula. Se prueba haciendo uso de las dos ecuaciones en (5.44) ya que de ella podemos escribir: $\alpha_l \beta = -\beta \alpha_l$, la que multiplicada por β a izquierda produce $\alpha_l = -\beta \alpha_l \beta$. Tomando ahora la traza a ámbos lados y utilizando la propiedad de ciclicidad de la traza, obtenemos que $Tr. \alpha_l = -Tr. \alpha_l = 0$.

- Las dos propiedades anteriores nos permiten afirmar que la dimensionalidad de las matrices α_j , $j = 1, 2, 3$ y β es par, ya que como su traza es nula, el número de veces que aparece el autovalor $+1$ es igual al número de veces que aparece el autovalor -1 .
- La dimensionalidad de las matrices α_j , $j = 1, 2, 3$ y β no puede ser 2×2 , ya que las únicas cuatro matrices Hermíticas independientes que existen en un espacio de dimensión 2×2 son las tres matrices espín de Pauli y la identidad 2×2 . Está última no sirve ya que su traza es dos (no es nula).

De lo anterior podemos concluir que la mínima dimensión en que pueden existir las cuatro matrices α_j , $j = 1, 2, 3$ y β es 4×4 . Dirac en su tratamiento original presentó las cuatro matrices siguientes, las cuales satisfacen el álgebra enunciada en las ecuaciones (5.43) y (5.44)

$$\alpha_j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}, \quad (5.45)$$

donde I_2 es la matrix identidad 2×2 y σ_j , $j = 1, 2, 3 = x, y, z$ son las tres matrices espín de Pauli dadas por

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (5.46)$$

Operando entonces con el Hamiltoniano en (5.42) en una función de onda, obtenemos la llamada ecuación de Dirac

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -ic\hbar \left(\alpha_1 \frac{\partial \psi}{\partial x^1} + \alpha_2 \frac{\partial \psi}{\partial x^2} + \alpha_3 \frac{\partial \psi}{\partial x^3} \right) + \beta mc^2 \psi, \quad (5.47)$$

donde ψ es una matrix columna de cuatro componentes

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}, \quad (5.48)$$

llamado en la literatura espinor de Dirac.

Notación covariante

De manera muy elegante la ecuación de Dirac se puede escribir en notación cuatridimensional, la cual preserva la simetría que tiene la ecuación entre $x^0 = ct$ y x^j . Para esto, multipliquemos la ecuación de Dirac a ámbos lados por β/c e introduzcamos la notación

$$\gamma^0 \equiv \beta, \quad \gamma^j \equiv \beta\alpha^j, \quad j = 1, 2, 3 = x, y, z.$$

De esta manera obtenemos

$$i\hbar \left(\gamma^0 \frac{\partial\psi}{\partial x^0} + \gamma^1 \frac{\partial\psi}{\partial x^1} + \gamma^2 \frac{\partial\psi}{\partial x^2} + \gamma^3 \frac{\partial\psi}{\partial x^3} \right) - mc\psi = 0. \quad (5.49)$$

Donde las nuevas matrices γ^μ , $\mu = 0, 1, 2, 3$, las cuales toman la forma

$$\gamma^j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ -\sigma_j & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma^0 = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix}, \quad (5.50)$$

satisfacen el álgebra

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu} I_4, \quad (5.51)$$

donde I_4 es la matriz unidad 4×4 , la cual por lo general se sobreentiende y no se coloca.

En este punto es conveniente introducir la notación de Feynman de barras la cual hace uso de la definición

$$\not{A} \equiv \gamma^\mu A_\mu = g_{\mu\nu} \gamma^\mu A^\nu = \gamma^0 A^0 - \vec{\gamma} \cdot \vec{A},$$

la que en particular para el cuadrioperador derivada covariante toma la forma

$$\not{\partial} \equiv \gamma^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} = \frac{\gamma^0}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \vec{\gamma} \cdot \vec{\nabla}.$$

Haciendo uso de esta notación podemos escribir la ecuación de Dirac de manera abreviada como

$$(i\hbar \not{\partial} - mc)\psi = (\not{p} - mc)\psi = 0, \quad (5.52)$$

donde se ha hecho uso de la asignación cuántica $p^\mu = i\hbar\partial/(\partial x_\mu)$.

En este punto podemos introducir la interacción electromagnética en la ecuación de Dirac haciendo uso de la substitución mínima $p^\mu \rightarrow \Pi^\mu = p^\mu - eA^\mu/c$, para obtener finalmente de esta manera la ecuación

$$\left(\not{p} - \frac{e}{c}\not{A} - mc\right)\psi = 0. \quad (5.53)$$

