



# 8 SIMETRÍAS

Introducimos en este capítulo el concepto de las transformaciones canónicas en mecánica cuántica y su relación con las transformaciones canónicas de la mecánica clásica. Especial énfasis se presta al concepto de transformaciones de simetría y al concepto de evolución temporal en la teoría.

## 8.1 Quincuagésimo séptima lección

Hasta ahora hemos visto que para el tratamiento mecánico cuántico de un sistema físico necesitamos del vector de estado  $|\psi\rangle$  que me representa el sistema [o equivalentemente de su función de onda  $\psi(\xi) = \langle \xi | \psi \rangle$ ] y de todos los operadores que me representan los observables del sistema físico. Pero la pregunta es si esta descripción es única, o si hay maneras equivalentes de caracterizar la misma situación física.

Mostraremos a continuación que, al igual que en la mecánica clásica, uno puede realizar transformaciones canónicas en la descripción del sistema físico que permiten formulaciones alternas del problema.

### 8.1.1 Transformaciones canónicas

Sea  $\{\hat{\Omega}_r\} = \{\hat{\Omega}_1, \hat{\Omega}_2, \dots\}$  el conjunto de todos los operadores lineales, acotados y hermíticos (observables) que caracterizan un sistema físico, y sea  $|\Phi\rangle$  el vector de estado que me describe dicho sistema. Sea igualmente  $\hat{U}$  un operador unitario del espacio de representaciones del

sistema (el cual satisface la propiedad  $\hat{U}\hat{U}^\dagger = \hat{U}^\dagger\hat{U} = I$ , es decir  $\hat{U}^{-1} = \hat{U}^\dagger$ ).

Realicemos ahora tanto en los operadores del sistema físico como en el vector de estado, la siguiente transformación unitaria:

$$\hat{\Omega}_r \rightarrow \hat{\Omega}'_r = \hat{U}\hat{\Omega}_r\hat{U}^{-1}, \quad |\Phi\rangle \rightarrow |\Phi'\rangle = \hat{U}|\Phi\rangle. \quad (8.1)$$

Como vamos a probar a continuación, esta transformación deja la descripción matemática del sistema físico completamente inalterada, en el sentido que las propiedades físicas que describen el sistema transformado son exactamente las mismas que las del sistema antes de la transformación.

Note primero la diferencia que hay entre esta transformación unitaria y un cambio de base (rotación) que pueda hacerse en el espacio lineal de representación del sistema físico. Según el álgebra lineal, dicho cambio de base se puede efectuar de una de las dos maneras siguientes:

- Por una rotación de los vectores de la base

$$\hat{\Omega}_r \rightarrow \hat{\Omega}'_r = \hat{\Omega}_r, \quad |\Phi\rangle \rightarrow |\Phi'\rangle = \hat{U}|\Phi\rangle.$$

- Por una rotación de las aplicaciones lineales del sistema

$$\hat{\Omega}_r \rightarrow \hat{\Omega}'_r = \hat{U}\hat{\Omega}_r\hat{U}^{-1}, \quad |\Phi\rangle \rightarrow |\Phi'\rangle = |\Phi\rangle,$$

donde  $\hat{U}$  es un operador cuyo inverso existe.

## 8.1.2 Propiedades

Las transformaciones unitarias en mecánica cuántica definidas mediante (8.1) satisfacen las siguientes propiedades:

### Invarianza de autovalores

**Para cualquier operador se cumple que  $\hat{\Omega}_r$  Y  $\hat{\Omega}'_r$  tienen el mismo espectro de autovalores.**

Para probar esto partamos de  $w_r$  y  $|\phi_{w_r}\rangle$ , el conjunto completo de autovalores y autovectores de  $\hat{\Omega}_r$ . Es decir

$$\hat{\Omega}_r|\phi_{w_r}\rangle = w_r|\phi_{w_r}\rangle,$$

multiplicando esta ecuación por  $\hat{U}$  a izquierda tenemos

$$\hat{U}\hat{\Omega}_r|\phi_{w_r}\rangle = w_r\hat{U}|\phi_{w_r}\rangle,$$

insertando ahora en el lado izquierdo el factor  $\hat{U}^{-1}\hat{U}$  luego del operador  $\hat{\Omega}_r$  tenemos

$$\hat{U}\hat{\Omega}_r\hat{U}^{-1}\hat{U}|\phi_{w_r}\rangle = w_r\hat{U}|\phi_{w_r}\rangle,$$

es decir, tenemos que

$$\hat{\Omega}'_r\hat{U}|\phi_{w_r}\rangle = w_r\hat{U}|\phi_{w_r}\rangle = \hat{\Omega}'_r|\phi'_{w_r}\rangle = w_r|\phi'_{w_r}\rangle.$$

## Invarianza del álgebra

### El álgebra de operadores permanece inalterada

Demostraremos esto partiendo primero de la ecuación

$$\hat{\Omega}_1 + \hat{\Omega}_2 = \hat{\Omega}_3.$$

Multiplicando ahora a izquierda por  $\hat{U}$  y a derecha por  $\hat{U}^{-1}$  tenemos

$$\hat{U}\hat{\Omega}_1\hat{U}^{-1} + \hat{U}\hat{\Omega}_2\hat{U}^{-1} = \hat{U}\hat{\Omega}_3\hat{U}^{-1},$$

es decir, tenemos que

$$\hat{\Omega}'_1 + \hat{\Omega}'_2 = \hat{\Omega}'_3.$$

De igual manera, partiendo de

$$\hat{\Omega}_1\hat{\Omega}_2 = \hat{\Omega}_3,$$

y multiplicando ahora a izquierda por  $\hat{U}$  y a derecha por  $\hat{U}^{-1}$  tenemos

$$\hat{U}\hat{\Omega}_1\hat{\Omega}_2\hat{U}^{-1} = \hat{U}\hat{\Omega}_3\hat{U}^{-1} = \hat{\Omega}'_3;$$

insertando ahora el factor  $\hat{U}^{-1}\hat{U}$  en el medio de los operadores  $\hat{\Omega}_1$  y  $\hat{\Omega}_2$  tenemos

$$\hat{U}\hat{\Omega}_1\hat{U}^{-1}\hat{U}\hat{\Omega}_2\hat{U}^{-1} = \hat{\Omega}'_1\hat{\Omega}'_2 = \hat{\Omega}'_3.$$

Finalmente, la multiplicación de un operador por un escalar  $\alpha\hat{\Omega}_j$  se convierte en  $\alpha\hat{\Omega}'_j$ ; luego de multiplicar a derecha por  $\hat{U}$  y a izquierda por  $\hat{U}^{-1}$  y utilizar el hecho que  $\alpha$  es un número complejo y no un operador.

Hasta este punto, cualquier operador  $\hat{U}$  cuyo inverso  $\hat{U}^{-1}$  exista satisface las dos propiedades anteriores, sin necesidad que este sea unitario. Sin embargo, en las dos propiedades que siguen, las cuales son físicas, es indispensable la propiedad de unitariedad  $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$  del operador.

### Invarianza de la norma

**La normalización del vector de estado permanece inalterada**

Es simple ver que se cumple

$$\langle \Phi' | \Phi' \rangle = \langle \hat{U}\Phi | \hat{U}\Phi \rangle = \langle \Phi | \hat{U}^\dagger \hat{U}\Phi \rangle = \langle \Phi | \hat{U}^{-1} \hat{U}\Phi \rangle = \langle \Phi | \Phi \rangle.$$

### Invarianza del valor esperado

**El valor esperado de cualquier operador permanece inalterado**

La definición del valor esperado para el sistema transformado es la siguiente:

$$\langle \hat{\Omega}'_r \rangle_{\Phi'} = \frac{\langle \Phi' | \hat{\Omega}'_r | \Phi' \rangle}{\langle \Phi' | \Phi' \rangle}.$$

Como vimos en la demostración anterior, el denominador permanece inalterado. De igual manera tenemos para el numerador que:

$$\langle \Phi' | \hat{\Omega}'_r | \Phi' \rangle = \langle \hat{U}\Phi | \hat{U}\hat{\Omega}_r\hat{U}^{-1} | \hat{U}\Phi \rangle = \langle \Phi | \hat{U}^\dagger \hat{U}\hat{\Omega}_r\hat{U}^{-1} \hat{U}\Phi \rangle = \langle \Phi | \hat{\Omega}_r | \Phi \rangle.$$

Es decir, hemos mostrado que

$$\langle \hat{\Omega}'_r \rangle_{\Phi'} = \langle \hat{\Omega}_r \rangle_{\Phi}. \quad (8.2)$$

Queda entonces demostrado de esta manera que el operar con una transformación unitaria sobre el espacio de representaciones de un sistema físico, no me altera las predicciones matemáticas que para dicho sistema pueda hacer mi modelo matemático.

### 8.1.3 Transformaciones infinitesimales

De especial importancia en la física son las transformaciones unitarias infinitesimales, las cuales son transformaciones para las cuales podemos escribir

$$\hat{U} = \hat{I} + i\epsilon\hat{G}, \quad (8.3)$$

donde el parámetro real  $\epsilon$  es infinitesimal y el operador  $\hat{G}$  es Hermítico, tal que la transformación inversa, en primer orden en el parámetro infinitesimal  $\epsilon$  la podemos escribir como

$$\hat{U}^{-1} = \hat{I} - i\epsilon\hat{G} = \hat{U}^\dagger. \quad (8.4)$$

Bajo la transformación infinitesimal dada por (8.3) el operador  $\hat{\Omega}$  cambia como

$$\hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}' = (\hat{I} + i\epsilon\hat{G})\hat{\Omega}(\hat{I} - i\epsilon\hat{G}) \approx \hat{\Omega} + i\epsilon[\hat{G}, \hat{\Omega}], \quad (8.5)$$

de tal manera que el cambio del operador  $\delta\hat{\Omega} = \hat{\Omega}' - \hat{\Omega}$  toma la forma

$$\delta\hat{\Omega} = i[\hat{F}, \hat{\Omega}], \quad (8.6)$$

donde  $\hat{F} = \epsilon\hat{G}$ , ecuación que tiene una análoga en física clásica, en donde para  $F$ , el generados de una transformación infinitesimal, el cambio de una entidad dinámica  $\Omega$  producida por esta transformación esta dado por

$$\delta\Omega = -i[F, \Omega]_P, \quad (8.7)$$

dond  $[F, \Omega]_P$  representa el corchete de Poisson entre  $F$  y  $\Omega$ .

Es por esta analogía que una transformación unitaria en mecánica cuántica como la estudiada en esta lección, la cual me deja la descripción de mi sistema físico inalterada, se le conoce como una transformación canónica en la mecánica cuántica.

En resumen, enfatizamos que una transformación unitaria en mecánica cuántica no es solamente una nueva rotulación de los estados de la base del espacio de Hilbert  $\{\mathcal{H}\}$ . En lugar de esto, la transformación unitaria cambia el espacio de Hilbert  $\{\mathcal{H}\}$  a un nuevo espacio de Hilbert  $\{\mathcal{H}'\}$  y cambia el álgebra de operadores en una nueva álgebra, la cual es de la misma forma en los dos espacios de Hilbert.

## 8.2 Quincuagésimo octava lección

Las simetrías son un atributo particular del mundo físico, que le permiten al investigador estudiar aspectos particulares de un sistema específico. Por ejemplo, la propiedad de homogeneidad en un espacio físico conduce a la conclusión que el momentum lineal es una magnitud física conservada en dicho espacio, y nos permite estudiar de manera separada el movimiento del centro de masa y el movimiento interno relativo del sistema. De igual manera un espacio físico isotrópico conduce a la conclusión que el momento angular es una magnitud física conservada en dicho espacio. Estas propiedades del espacio, las cuales se pueden expresar matemáticamente como relaciones de simetría, son de especial relevancia en la formulación matemática de cualquier teoría física.

### 8.2.1 Homogeneidad del espacio

Que el espacio sea homogéneo en una dirección específica implica que las ecuaciones que me describen el sistema físico son invariantes bajo una traslación espacial en esa dirección. Para un sistema físico unidimensional  $x$ , la homogeneidad del espacio significa que mis ecuaciones de movimiento deben permanecer inalteradas si yo las escribo en función de la posición  $x$  o de la posición desplazada  $x' = x + a_x$  donde  $a_x$  es un valor constante; este desplazamiento producido por el operador  $\hat{D}_{a_x}$ , cambia la función de onda de la siguiente manera

$$\hat{D}_{a_x} \psi(x) = \psi'(x') = \psi(x') = \psi(x + a_x), \quad (8.8)$$

expresión que para un valor muy pequeño de  $a_x$  (un desplazamiento infinitesimal) podemos expandir en una serie de Maclaurin de la forma

$$\begin{aligned}\psi(x + a_x) &= \psi(x) + a_x \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) + \frac{a_x^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x) + \dots \\ &= e^{a_x(\partial/\partial x)} \psi(x) = e^{ia_x(-i\partial/\partial x)} \psi(x) = e^{ia_x p_x/\hbar} \psi(x).\end{aligned}\quad (8.9)$$

Para el desplazamiento en un espacio tri-dimensional necesitamos de tres parámetros, uno para cada dirección cartesiana del espacio. Es decir, reemplazaremos el vector posición  $\vec{r}$  por  $\vec{r}' = \vec{r} + \vec{a}$ , donde  $\vec{a} = \vec{u}_x a_x + \vec{u}_y a_y + \vec{u}_z a_z$ , de tal manera que el operador  $a_x(\partial/\partial x)$  lo debemos reemplazar por  $\vec{a} \cdot \vec{\nabla}$ , obteniendo de esta manera

$$\psi(\vec{r}') = \psi(\vec{r} + \vec{a}) = e^{\vec{a} \cdot \vec{\nabla}} \psi(\vec{r}) = e^{i\vec{a} \cdot \vec{p}/\hbar} \psi(\vec{r}) = \hat{D}_{\vec{a}} \psi(\vec{r}), \quad (8.10)$$

donde en las dos ecuaciones anteriores se ha hecho uso del hecho que  $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$  y hemos hallado la forma explícita del operador traslación  $\hat{D}_{\vec{a}} = \exp(i\vec{a} \cdot \vec{p}/\hbar)$ , un operador el cual es unitario debido a la Hermiticidad de  $\vec{p}$ . Nótese que el operador traslación como una función de  $\vec{\nabla}$  es válido en cualquier sistema de coordenadas y aún más, en función de  $\vec{p}$  es válido en cualquier representación del operador momentum lineal  $\vec{p}$ .

Pero, cual es la condición matemática para que mi sistema físico no cambie bajo el desplazamiento del operador posición? Para responder a esta pregunta comencemos por suponer que la función de onda  $\psi(\vec{r})$  satisface la ecuación de Schrödinger y tomemos la derivada parcial con respecto al tiempo de mi función de onda trasladada  $\psi(\vec{r}')$ :

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}') &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{D}_{\vec{a}} \psi(\vec{r}) = i\hbar \hat{D}_{\vec{a}} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}) \\ &= \hat{D}_{\vec{a}} \hat{H} \psi(\vec{r}) = \hat{D}_{\vec{a}} \hat{H} \hat{D}_{\vec{a}}^{-1} \hat{D}_{\vec{a}} \psi(\vec{r}) = \hat{D}_{\vec{a}} \hat{H} \hat{D}_{\vec{a}}^{-1} \psi(\vec{r}'),\end{aligned}$$

expresión esta última que es igual a  $\hat{H} \psi(\vec{r}')$  solo si se cumple la relación

$$\hat{D}_{\vec{a}} \hat{H} \hat{D}_{\vec{a}}^{-1} = \hat{H}; \quad \text{o} \quad [\hat{D}_{\vec{a}}, \hat{H}] = 0, \quad (8.11)$$

es decir, que el Hamiltoniano del sistema conmute con el operador desplazamiento  $\hat{D}_{\vec{a}}$ , lo cual es válido siempre y cuando el operador Hamiltoniano conmute con el vector momentum lineal  $\vec{p}$ ; es decir, si se

cumple que

$$[\hat{H}, \hat{\vec{p}}] = \sum_{j=1}^3 \vec{u}_j [\hat{H}, \hat{p}_j] = 0. \quad (8.12)$$

Como es bien sabido, la conmutación de un operador que no depende explícitamente del tiempo, con el Hamiltoniano del sistema, es la manera de expresar la conservación de la magnitud física en cuestión.

Concluimos pues que el momentum lineal  $\vec{p}$  es la magnitud física cuya conservación proviene de la homogeneidad del espacio. Lo anterior en completo acuerdo con el concepto clásico en donde una partícula es invariante bajo el desplazamiento del vector posición, solo si no hay fuerzas que actúen sobre el, en cuyo caso el momentum lineal es una constante del movimiento.

## 8.2.2 Simetría y degeneración

Un aspecto importante de las simetrías es que estas están asociadas con autoestados degenerados de la energía. Para ver esto, supongamos que  $\Phi_n$  es un autoestado de la energía de un sistema físico descrito por el Hamiltoniano  $\hat{H}$ ; es decir  $\hat{H}\Phi_n = E_n\Phi_n$ , y que al mismo tiempo hay un operador  $\hat{\Omega}$  el cual conmuta con el Hamiltoniano, es decir que se cumple  $[\hat{H}\hat{\Omega}, \hat{\Omega}\hat{H}] = 0$ , lo cual implica  $\hat{H}\hat{\Omega} = \hat{\Omega}\hat{H}$ ; entonces es fácil ver que  $\hat{\Omega}\Phi_n$  es también autofunción del Hamiltoniano  $\hat{H}$  con el mismo autovalor  $E_n$ , lo cual se puede ver fácilmente de la siguiente manera:

$$\hat{H}(\hat{\Omega}\Phi_n) = (\hat{H}\hat{\Omega})\Phi_n = (\hat{\Omega}\hat{H})\Phi_n = \hat{\Omega}(\hat{H}\Phi_n) = \hat{\Omega}(E_n\Phi_n) = E_n(\hat{\Omega}\Phi_n);$$

en donde tenemos que si  $\psi_n \equiv \hat{\Omega}\Phi_n$  es independiente de la autofunción  $\Phi_n$ , el Hamiltoniano del sistema es degenerado. Nótese que la condición de degeneración es la independencia lineal de las funciones  $\Phi_n$  y  $\psi_n = \hat{\Omega}\Phi_n$ .

Para el caso del desplazamiento espacial, el vector de estado desplazado  $\psi(\vec{r} + \vec{a})$  es independiente del vector  $\psi(\vec{r})$  implicando de esta manera la degeneración de las autofunciones del Hamiltoniano, lo cual no es nada nuevo ya que en el tratamiento de la partícula libre aprendimos que las autofunciones de la energía de una partícula libre dependen solo de la magnitud del vector momentum lineal  $|\vec{p}|$  y no de su dirección.

### 8.2.3 Homogeneidad del tiempo

Que el tiempo sea homogéneo implica que las ecuaciones que me describen el sistema físico sean invariantes bajo una redefinición del tiempo inicial  $t_0$ . Lo cual significa que las ecuaciones de movimiento deben permanecer inalteradas si yo las escribo en función del tiempo  $t$ , o del tiempo  $t' = t + \tau$ , donde  $\tau$  es un valor de tiempo constante. En analogía con el desplazamiento espacial definimos el operador  $\hat{D}_\tau$ , el cual actúa sobre la función de onda de la siguiente manera

$$\hat{D}_\tau \psi(t) = \psi'(t') = \psi(t') = \psi(t + \tau), \quad (8.13)$$

lo que para un valor muy pequeño de  $\tau$  podemos expandir en una serie de Maclaurin de la forma

$$\psi(t + \tau) = \psi(t) + \tau \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) + \frac{\tau^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(t) + \dots = e^{\tau(\partial/\partial t)} \psi(t). \quad (8.14)$$

En este punto se debe ser cuidadoso ya que en el segundo término en la serie de Maclaurin podemos reemplazar el operador  $\partial/\partial t$  por el operador  $-i\hat{H}/\hbar$ , reemplazo que no se puede hacer de manera rigurosa en los términos siguientes de la serie, a menos que el Hamiltoniano no dependa explícitamente del tiempo; es decir, si  $\hat{H} \neq \hat{H}(t)$ ; en cuyo caso podemos escribir  $\hat{D}_\tau = \exp(-i\tau\hat{H}/\hbar)$ , operador que de nuevo es unitario debido a la Hermiticidad del Hamiltoniano  $\hat{H}$ .

Nótese de nuevo que como todo operador conmuta consigo mismo ( $[\hat{H}, \hat{H}] = 0$ ), la energía, la magnitud física asociada con el Hamiltoniano es conservada siempre y cuando el Hamiltoniano no dependa explícitamente del tiempo  $t$ .

### 8.2.4 Isotropía del espacio

Que el espacio sea isotrópico implica que todas las direcciones en el espacio son equivalentes. Así pues, en un espacio isotrópico las ecuaciones que me describen el sistema físico deben permanecer inalteradas bajo una rotación del sistema por un ángulo cualesquiera  $\phi$  alrededor de un eje espacial arbitrario. Al igual que en los dos casos anteriores, podemos trabajar con una rotación infinitesimal  $\delta\phi$  alrededor de un eje

perpendicular al plano de la rotación el cual denotaremos  $\delta\vec{\phi} \equiv \vec{u}_s\delta\phi$ , donde  $\vec{u}_s$  es un vector unitario perpendicular al plano de la rotación. El vector posición cambiará entonces como

$$\vec{r} \longrightarrow \vec{r}' = \vec{r} + \delta\vec{r} = \vec{r} + \delta\vec{\phi} \times \vec{r}. \quad (8.15)$$

Podemos entonces escribir la función de onda  $\psi(\vec{r})$  que me describe mi sistema físico luego de la rotación como

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}') &= \psi(\vec{r} + \delta\vec{r}) = \psi(\vec{r} + \delta\vec{\phi} \times \vec{r}) \approx \psi(\vec{r}) + (\delta\vec{r} \cdot \vec{\nabla})\psi|_{\vec{r}'=\vec{r}} \\ &\approx \psi(\vec{r}) + (\delta\vec{\phi} \times \vec{r} \cdot \vec{\nabla})\psi|_{\vec{r}'=\vec{r}} = \psi(\vec{r}) + (\delta\vec{\phi} \cdot \vec{r} \times \vec{\nabla})\psi|_{\vec{r}'=\vec{r}} \\ &\approx \psi(\vec{r}) + \delta\vec{\phi} \cdot (\vec{r} \times \vec{\nabla})\psi|_{\vec{r}'=\vec{r}} = \psi(\vec{r}) + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \vec{L}\psi|_{\vec{r}'=\vec{r}}, \end{aligned} \quad (8.16)$$

donde hemos usado la definición de  $\vec{L} \equiv \vec{r} \times \vec{p} = -i\hbar\vec{r} \times \vec{\nabla}$ . Así pues, el generador de una rotación infinitesimal por un ángulo  $\delta\phi$  alrededor de un eje arbitrario es el vector momento angular alrededor del eje de la rotación. Al igual que antes, la invarianza de la función de onda  $\psi(\vec{r})$  debido a la isotropía del espacio implica que  $[\hat{H}, \vec{L}] = 0$ , lo cual no es más que la conservación del momento angular en mecánica cuántica (la misma situación se da en mecánica clásica).

## 8.3 Quincuagésimo nona lección

Introduciremos en esta lección los conocidos cuadros de la mecánica cuántica los cuales son tres y constituyen las diversas maneras de mirar la evolución temporal de los sistemas físicos en el marco de la teoría, o en otras palabras, el desarrollo dinámico de los sistemas cuánticos.

### 8.3.1 Evolución temporal de los sistemas cuánticos

De manera más precisa podemos decir que, ya que las cantidades que se observan en el laboratorio son los valores esperados de los observables cuánticos  $\langle \hat{\Omega} \rangle_\psi = \langle \psi | \hat{\Omega} | \psi \rangle / \langle \psi | \psi \rangle$ , entonces queremos saber como estos valores esperados cambian con el tiempo. Hay tres maneras de responder a este interrogante:

- Los vectores de estado cambian con el tiempo pero no los operadores cuánticos.
- Los operadores cuánticos cambian con el tiempo pero no los vectores de estado.
- Los vectores de estado y los operadores cuánticos cambian simultáneamente con el tiempo.

A cada una de estas tres maneras de mirar la evolución temporal de los sistemas físicos se les conoce como los cuadros de Schrödinger, de Heisenberg y de Interacciones respectivamente.

### 8.3.2 Cuadro de Schrödinger

Aquí se supone que los operadores  $\hat{\Omega}$  retienen su forma explícita en el tiempo (aunque pueden tener una dependencia temporal implícita) pero que los vectores de estado  $|\psi\rangle$  evolucionan con el tiempo. Sea  $|\psi(t_0)\rangle$  el vector de estado que me representa el sistema físico en el tiempo  $t_0$ . El vector de estado  $|\psi(t)\rangle$  en el instante de tiempo  $t > t_0$  debe estar relacionado a  $|\psi(t_0)\rangle$  mediante la acción de un operador  $\hat{T}(t, t_0)$  en el espacio de Hilbert (el cual no necesariamente está relacionado directamente con un observable del sistema), de la siguiente manera:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{T}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle, \quad (8.17)$$

el cual debe satisfacer la condición de frontera  $\hat{T}(t_0, t_0) = \hat{I}$ , donde  $\hat{I}$  es el operador identidad. Como es de esperarse (y ya se demostró al principio del curso), la probabilidad total es una cantidad que se conserva en el tiempo, lo cual es una consecuencia de la conservación de la normalización del vector de estado  $|\psi(t)\rangle$ ; es decir

$$\begin{aligned} \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle &= \langle\hat{T}(t, t_0)\psi(t_0)|\hat{T}(t, t_0)\psi(t_0)\rangle \\ &= \langle\psi(t_0)|\hat{T}^\dagger(t, t_0)\hat{T}(t, t_0)\psi(t_0)\rangle = \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle; \end{aligned}$$

lo cual tiene como consecuencia que

$$\hat{T}^\dagger(t, t_0)\hat{T}(t, t_0) = \hat{I}, \quad (8.18)$$

lo que no necesariamente implica que  $\hat{T}$  sea un operador unitario, ya que es necesario demostrar simultáneamente que  $\hat{T}(t, t_0)\hat{T}^\dagger(t, t_0) = \hat{I}$ . Pero la unitariedad la podemos demostrar utilizando la llamada propiedad de grupo del operador  $\hat{T}$  la cual podemos derivar utilizando la definición del operador  $\hat{T}$ , de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \hat{T}(t, t_1)|\psi(t_1)\rangle \\ |\psi(t_1)\rangle &= \hat{T}(t_1, t_0)|\psi(t_0)\rangle, \end{aligned}$$

de donde podemos concluir que

$$|\psi(t)\rangle = \hat{T}(t, t_1)\hat{T}(t_1, t_0)|\psi(t_0)\rangle, \quad (8.19)$$

lo que comparado con la anterior expresión implica que

$$\hat{T}(t, t_0) = \hat{T}(t, t_1)\hat{T}(t_1, t_0), \quad (8.20)$$

propiedad esta última conocida en la literatura como la propiedad de grupo del operador evolución temporal  $\hat{T}$ . Como esta propiedad es válida para cualquier instante de tiempo en el intervalo  $t \geq t_1 \geq t_0$ , hagamos en ella  $t = t_0$ , lo cual implica

$$\hat{T}(t_0, t_1)\hat{T}(t_1, t_0) = \hat{T}(t_0, t_0) = \hat{I}, \quad (8.21)$$

lo que multiplicado a izquierda por  $\hat{T}^{-1}(t_0, t_1)$  nos da la relación

$$\hat{T}(t_1, t_0) = \hat{T}^{-1}(t_0, t_1). \quad (8.22)$$

Multiplicando ahora (8.21) a izquierda por  $\hat{T}^\dagger(t_0, t_1)$  y haciendo uso de la relación (8.18) obtenemos que  $\hat{T}(t_1, t_0) = \hat{T}^\dagger(t_0, t_1)$  lo cual comprado con (8.22) nos muestra que

$$\hat{T}^{-1}(t_0, t_1) = \hat{T}^\dagger(t_0, t_1), \quad (8.23)$$

la cual es la propiedad deseada de unitariedad del operador  $\hat{T}$ . Además, multiplicando esta última expresión por  $\hat{T}(t_0, t_1)$  a izquierda, produce la relación

$$\hat{T}\hat{T}^\dagger = \hat{I}. \quad (8.24)$$

## Ecuación diferencial para $\hat{T}$

Pero cual es la ecuación diferencial que debe satisfacer el operador unitario de evolución temporal  $\hat{T}$ ? Para hallarla comencemos por considerar un instante de tiempo infinitesimal  $t - \delta t$  anterior al momento  $t$ . Por la propiedad de grupo del operador  $\hat{T}$  podemos entonces escribir

$$\hat{T}(t, t_0) = \hat{T}(t, t - \delta t)\hat{T}(t - \delta t, t_0). \quad (8.25)$$

Ahora, si  $\delta t$  es pequeño, entonces  $\hat{T}(t, t - \delta t)$  es un operador unitario infinitesimal con el intervalo de tiempo  $\delta t$  como parámetro, el cual, de acuerdo a la teoría de transformaciones canónicas podemos escribir como

$$\hat{T}(t, t - \delta t) = 1 - \frac{i}{\hbar}\delta t\hat{H}, \quad (8.26)$$

donde  $\hat{H}$ , el generador de la transformación infinitesimal  $|\psi(t - \delta t)\rangle \rightarrow |\psi(t)\rangle$ , es algún operador Hermítico (el factor de  $1/\hbar$  ha sido introducido por conveniencia, para asegurar que el generador  $\hat{H}$  tenga unidades de energía). Insertando ahora esta última expresión en (8.25) tenemos que

$$\frac{\hat{T}(t, t_0) - \hat{T}(t - \delta t, t_0)}{\delta t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}\hat{T}(t - \delta t, t_0).$$

Tomando ahora el límite  $\delta t \rightarrow 0$  obtenemos la ecuación diferencial

$$\frac{\partial \hat{T}(t, t_0)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)\hat{T}(t, t_0). \quad (8.27)$$

Podemos integrar esta última ecuación haciendo uso de la condición de frontera  $\hat{T}(t_0, t_0) = \hat{I}$ , la cual nos produce

$$\hat{T}(t, t_0) = \hat{I} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(t')\hat{T}(t', t_0)dt'. \quad (8.28)$$

Nótese que la ecuación (8.27) aplicada sobre el vector de estado  $|\psi(t_0)\rangle$  nos produce de inmediato la ecuación diferencial

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle, \quad (8.29)$$

la cual no es más que la conocida ecuación dinámica de evolución temporal de Schrödinger la cual fué postulada al comienzo de estas lecciones, donde podemos identificar  $\hat{H}$  como el operador Hamiltoniano, el cual es el operador de evolución temporal infinitesimal, de acuerdo al formalismo desarrollado en la lección anterior.

Nótese igualmente que si  $\hat{H}$  no depende explícitamente del tiempo, podemos integrar de inmediato la ecuación diferencial (8.27) la cual nos produce

$$\hat{T}(t, t_0) = e^{-(i/\hbar)(t-t_0)\hat{H}}, \quad (8.30)$$

coincidiendo de nuevo con el formalismo presentado en la lección anterior.

Nótese finalmente que en este cuadro, la evolución temporal del sistema físico está dada por la evolución temporal de la función de onda y por lo tanto la evolución temporal del valor esperado de un observable está dada por el llamado teorema de Ehrenfest el cual fué derivada en la primera parte de estas notes y el cual es

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\Omega} \rangle_{\psi} = \frac{d}{dt} \frac{\langle \psi | \hat{\Omega} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \left\langle \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\Omega}] + \frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial t} \right\rangle_{\psi}.$$

### 8.3.3 Cuadro de Heisenberg

Empecemos por suponer que el desarrollo temporal de un sistema físico está dado en el cuadro de Schrödinger. Podemos entonces tener una formulación alterna de evolución temporal del sistema físico al realizar una transformación canónica en cada instante de tiempo  $t_i$ , con el generador unitario de esta transformación dado por el operador  $\hat{T}^{-1}(t_i, t_0)$ . Esto nos define el llamado cuadro de Heisenberg en el cual el nuevo vector de estado  $|\psi\rangle_H$  y los nuevos operadores  $\hat{\Omega}_H$  están dados por

$$|\psi\rangle_H \equiv \hat{T}^{-1}(t, t_0)|\psi(t)\rangle, \quad (8.31)$$

$$\hat{\Omega}_H \equiv \hat{T}^{-1}(t, t_0)\hat{\Omega}\hat{T}(t, t_0), \quad (8.32)$$

donde  $|\psi\rangle_H$  y  $\hat{\Omega}_H$  se refieren a elementos del cuadro de Heisenberg y  $|\psi\rangle$  y  $\hat{\Omega}$  a elementos del cuadro de Schrödinger respectivamente.

Para empezar es simple ver que en este cuadro los vectores de estado son constantes en el tiempo (no tienen evolución temporal) y son elementos fijos del espacio de Hilbert, ya que

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle_H &= \hat{T}^{-1}(t, t_0)|\psi(t)\rangle = \hat{T}^{-1}(t, t_0)\hat{T}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \\ &= \hat{T}(t_0, t)\hat{T}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle = \hat{T}(t_0, t_0)|\psi(t_0)\rangle = \hat{I}|\psi(t_0)\rangle = |\psi(t_0)\rangle, \end{aligned} \quad (8.33)$$

es decir, en todo instante de tiempo  $t$ , el vector de estado en el cuadro de Heisenber  $|\psi\rangle_H$  coincide con el vector de estado en el cuadro de Schrödinger  $|\psi(t_0)\rangle$  en el instante de tiempo inicial  $t_0$ . Es decir, el vector de estado no evoluciona con el tiempo.

Esta falta de evolución temporal del vector de estado puede entenderse como que la transformación canónica hecha sobre el vector de estado, lo lleva en cada instante al vector de estado en su momento inicial  $|\psi(t_0)\rangle$ .

Mostremos a continuación la forma como en el cuadro de Heisenber un operador  $\hat{\Omega}_H$  evoluciona con el tiempo; para esto, tomemos la derivada temporal de la ecuación (8.32)

$$\frac{d\hat{\Omega}_H}{dt} = \frac{\partial\hat{T}^{-1}}{\partial t}\hat{\Omega}\hat{T} + \hat{T}^{-1}\hat{\Omega}\frac{\partial\hat{T}}{\partial t}. \quad (8.34)$$

Pero tomando el Hermítico adjunto de la ecuación (8.27) tenemos

$$\frac{\partial\hat{T}^\dagger}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\hat{T}^\dagger\hat{H}, \quad (8.35)$$

donde hemos usado el hecho que el Hamiltoniano  $\hat{H}$  es autoadjunto. Pero como ya vimos en la lección anterior,  $\hat{T}^\dagger = \hat{T}^{-1}$  lo que reemplazado en la ecuación anterior nos dá

$$\frac{\partial\hat{T}^{-1}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\hat{T}^{-1}\hat{H}. \quad (8.36)$$

Ahora reemplazando las ecuaciones (8.27) y (8.36) en (8.34) obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\Omega}_H}{dt} &= \frac{i}{\hbar}(\hat{T}^{-1}\hat{H}\hat{\Omega}\hat{T} - \hat{T}^{-1}\hat{\Omega}\hat{H}\hat{T}) \\ &= \frac{i}{\hbar}(\hat{T}^{-1}\hat{H}\hat{T}\hat{T}^{-1}\hat{\Omega}\hat{T} - \hat{T}^{-1}\hat{\Omega}\hat{T}\hat{T}^{-1}\hat{H}\hat{T}) \\ &= \frac{i}{\hbar}(\hat{H}_H\hat{\Omega}_H - \hat{\Omega}_H\hat{H}_H). \end{aligned}$$

De esta manera se ha obtenido la ecuación de evolución temporal (ecuación de movimiento) del observable  $\hat{\Omega}_H$  en el cuadro de Heisenberg, la cual es

$$\frac{d\hat{\Omega}_H}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_H, \hat{\Omega}_H]. \quad (8.37)$$

Nótese que si el observable  $\hat{\Omega}_H$  tiene una dependencia temporal explícita, la derivada parcial  $\partial\hat{\Omega}_H/\partial t$  debe de adicionarse en el lado derecho.

Comparando la forma de esta última ecuación con las ecuaciones (8.6) y (8.7) las cuales especifican el cambio en forma de un operador bajo una transformación canónica infinitesimal podemos ver que la evolución temporal de los operadores en el cuadro de Heisenberg puede verse como una secuencia de transformaciones unitarias infinitesimales las cuales tienen como generador el Hamiltoniano  $\hat{H}_H$ , el cual es el análogo de un teorema bien conocido en la mecánica clásica. De esta manera, el cuadro de Heisenberg enfatiza mucho más el aspecto clásico de los sistemas físicos, que lo que lo hace el cuadro de Schrödinger. De igual manera, nótese que en el cuadro de Heisenberg, el vector de estado, el cual no tiene ningún análogo en mecánica clásica, no juega ningún papel en el cuadro de Heisenberg y ni siquiera aparece en las ecuaciones que controlan el comportamiento dinámico del sistema, las cuales son simplemente las ecuaciones clásicas del movimiento en forma de operadores cuánticos, como ya se vió en el caso del oscilador armónico simple.

De igual manera podemos concluir finalmente que si las ecuaciones clásicas están dadas en forma covariante (invariantes relativistas), las respectivas ecuaciones de movimiento de Heisenberg del sistema cuántico estarán dadas igualmente de manera covariante.

### 8.3.4 Cuadro de Interacciones

Hay una tercer manera de describir la evolución temporal de los sistemas cuánticos, la cual combina las ventajas de los descripciones de Schrödinger y de Heisenberg y es de gran utilidad y aplicación inmediata en la teoría de perturbaciones.

Comencemos por partir el Hamiltoniano del sistema físico en una

parte  $\hat{H}^0$  la cual es independiente del tiempo y de la cual podemos hallar solución exacta a la ecuación de sus autovalores (o ecuación de Schrödinger independiente del tiempo) y de una parte  $\hat{H}^1$  la cual puede o no depender del tiempo y que la consideraremos como una perturbación de  $\hat{H}^0$ . Es decir, tenemos que  $\hat{H} = \hat{H}^0 + \hat{H}^1$ .

Comencemos primero por introducir un nuevo vector de estado  $|\psi\rangle_I$  y los nuevos operadores  $\hat{\Omega}_I$  en el cuadro de interacción, los cuales están definidos por

$$|\psi\rangle_I \equiv \hat{R}(t_0, t)|\psi(t)\rangle, \quad (8.38)$$

$$\hat{\Omega}_I \equiv \hat{R}(t_0, t)\hat{\Omega}\hat{R}^{-1}(t_0, t), \quad (8.39)$$

con  $\hat{R}$  una familia de operadores unitarios  $\hat{R}^\dagger(t_0, t) = \hat{R}^{-1}(t_0, t)$ , y que satisfacen la ecuación diferencial

$$i\hbar \frac{\partial \hat{R}(t_0, t)}{\partial t} = -\hat{R}(t_0, t)\hat{H}^0, \quad (8.40)$$

con la condición de frontera  $\hat{R}(t_0, t_0) = 1$ ; ecuación esta última que podemos integrar como

$$\hat{R}(t_0, t) = \hat{I} + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{R}(t_0, t')\hat{H}^0 dt'. \quad (8.41)$$

Hallemos ahora la ecuación de evolución temporal del nuevo vector de estado  $|\psi\rangle_I$  y de los nuevos observables  $\hat{\Omega}_I$ . Haciendo uso de la ecuación (8.40) y la ecuación dinámica de Schrödinger la cual escribimos ahora como

$$i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = (\hat{H}^0 + \hat{H}^1)|\psi(t)\rangle. \quad (8.42)$$

Un cálculo directo nos permite escribir

$$\begin{aligned} \frac{\partial |\psi\rangle_I}{\partial t} &= \frac{\partial \hat{R}}{\partial t} |\psi(t)\rangle + \hat{R} \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} (\hat{R}\hat{H}^0|\psi(t)\rangle - \hat{R}\hat{H}^0|\psi(t)\rangle - \hat{R}\hat{H}^1|\psi(t)\rangle) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \hat{R}\hat{H}^1\hat{R}^{-1}\hat{R}|\psi(t)\rangle = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_I^1|\psi\rangle_I. \end{aligned}$$

Es decir, en este nuevo cuadro la evolución temporal del vector de estado  $|\psi\rangle_I$  está dado por la ecuación diferencial tipo Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle_I}{\partial t} = \hat{H}_I^1 |\psi\rangle_I, \quad (8.43)$$

ecuación en la que interviene solo la parte perturbada del Hamiltoniano  $\hat{H}^1$  como era nuestra intención.

Ahora, para la evolución temporal del observable  $\hat{\Omega}_I$  tenemos de acuerdo a la ecuación (8.39) que

$$\frac{\partial \hat{\Omega}_I}{\partial t} = \frac{\partial \hat{R}}{\partial t} \hat{\Omega} \hat{R}^{-1} + \hat{R} \hat{\Omega} \frac{\partial \hat{R}^{-1}}{\partial t}. \quad (8.44)$$

Haciendo uso ahora en el primer término de la ecuación diferencial (8.40) y en el segundo término de su ecuación adjunta, la cual, teniendo en cuenta que el operador  $\hat{R}$  es unitario, podemos escribir como

$$i\hbar \frac{\partial \hat{R}^{-1}(t_0, t)}{\partial t} = \hat{H}^0 \hat{R}^{-1}(t_0, t), \quad (8.45)$$

obtenemos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{\Omega}_I}{\partial t} &= (\hat{R} \hat{H}^0 \hat{\Omega} \hat{R}^{-1} - \hat{R} \hat{\Omega} \hat{H}^0 \hat{R}^{-1}) \\ &= \frac{i}{\hbar} (\hat{R} \hat{H}^0 \hat{R}^{-1} \hat{R} \hat{R}^{-1} - \hat{R} \hat{\Omega} \hat{R}^{-1} \hat{R} \hat{H}^0 \hat{R}^{-1}), \end{aligned}$$

la cual podemos escribir finalmente como

$$\frac{\partial \hat{\Omega}_I}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}_I^0, \hat{\Omega}_I], \quad (8.46)$$

donde de nuevo, si el observable  $\hat{\Omega}_I$  tiene una dependencia temporal, un término de la forma  $\partial \hat{\Omega}_I / \partial t$  debe de adicionarse al lado derecho de la anterior ecuación.

Como puede verse, en esta cuadro de interacción los observables también evolucionan con el tiempo, pero su evolución está determinada solo por la parte no perturbada del Hamiltoniano  $\hat{H}_I^0$ . De esta manera,

el cuadro de interacciones es un cuadro intermedio entre el cuadro de Schrödinger y el cuadro de Heisenberg. En este cuadro, tanto los vectores de estado como los operadores evolucionan con el tiempo, con la propiedad muy importante que se han separado los aspectos dinámicos y los aspectos cinemáticos en la descripción de los sistemas físicos. Como puede verse, la evolución temporal de los observables depende solo de la parte no perturbada del Hamiltoniano  $\hat{H}_I^0$  la cual en la mayoría de las aplicaciones corresponde al movimiento de partícula libre y no está afectada por la interacción, mientras que los vectores de estado tienen una evolución temporal la cual está determinada solamente por la perturbación  $\hat{H}_I^1$  y que caracteriza los aspectos dinámicos de los sistemas físicos.

Nótese finalmente que el cuadro de interacción coincide con el cuadro de Heisenberg en el límite en que  $\hat{H}_I^1 = 0$ , es decir, cuando no hay presencia de interacciones en el sistema.

