

Teoría de Transformaciones Físicas en el Espacio de Hilbert

Como vimos, el escenario de la mecánica cuántica es el espacio de Hilbert (un espacio vectorial complejo, con un producto interno hermitiano y que satisface el axioma de completitud). En ese espacio se representan todos los estados físicos de cualquier sistema cuántico. Estos sistemas pueden transformarse, pueden evolucionar, pueden modificar su estado. En este capítulo describiremos cómo representar cualquier transformación física en el espacio de estados de la mecánica cuántica.

En primer lugar conviene aclarar que es lo que entendemos por una “transformación física” de un sistema. En ese concepto incluiremos a cualquier cambio que tiene lugar en el sistema real, y por lo tanto ocurre en el laboratorio. Por ejemplo, podemos tomar un sistema cualquiera (un conjunto de partículas puntuales, por ejemplo) y desplazarlo moviéndolo de un lugar a otro. También podemos imprimirle un impulso en alguna dirección o rotarlo alrededor de algún eje. Asimismo, también podemos dejar que el sistema evolucione librado a su propia suerte. Tanto sea por su propia dinámica interna o a causa de su interacción con otros objetos. Cambios en la posición o en la velocidad y rotaciones son los ejemplos típicos de las transformaciones físicas a las que nos referiremos en este capítulo. Reservaremos el caso especial de la evolución temporal debido a interacciones naturales para el próximo capítulo. La pregunta a la que nos abocaremos ahora es: ¿Cómo representar en el espacio de estados de la mecánica cuántica una transformación?

Supongamos que en nuestro laboratorio tenemos un sistema físico que fue preparado en un estado descrito por el vector $|\phi\rangle$. Luego aplicamos al sistema alguna de las transformaciones mencionadas más arriba, a la que llamaremos genéricamente T . Al aplicarla, el estado cambiará y pasará a ser otro al que llamaremos

$|\phi'\rangle$). Nuestro objetivo será encontrar al “representante” de la transformación T en el espacio de Hilbert. Es decir, para cada T existirá un operador $\hat{D}(T) : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ tal que

$$|\phi'\rangle = \hat{D}(T)|\phi\rangle, \quad (6.1)$$

para todo estado $|\phi\rangle$.

El método que usaremos es el siguiente: en primer lugar, describiremos la teoría clásica de las transformaciones de un sistema analizando cómo se representan estas transformaciones en el espacio de las fases. Esta es la teoría de las transformaciones canónicas, que repasaremos brevemente. Con esta herramienta a mano, estudiaremos ciertas propiedades esenciales que definen a cada una de ellas. Para construir su correlato cuántico, postularemos que estas propiedades deben ser heredadas por sus representantes en el espacio de estados.

Nos adelantamos a mencionar el ejemplo más sencillo: las rotaciones. Es conocido el hecho de que si rotamos a un objeto primero alrededor de un eje y luego lo rotamos alrededor de otro eje diferente del anterior obtenemos un estado distinto que aquel al que llegamos si hacemos las rotaciones en el orden inverso. Esta diferencia puede ser cuantificada matemáticamente y esta propiedad, que define a las rotaciones, nos servirá para definir a su representante en el espacio de Hilbert.

6.1. Transformaciones Clásicas

El escenario de la física clásica es el espacio de las fases. El estado de un sistema de N grados de libertad es identificado N coordenadas y N momentos. Podemos representar a este estado mediante el vector $2N$ dimensional

$$\alpha = (q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N). \quad (6.2)$$

Es decir, un punto en el espacio de fases contiene toda la información del estado del sistema en un dado momento. Para un sistema clásico, las coordenadas y momentos son todas propiedades observables del sistema. En lo que sigue, analizaremos el caso de un único grado de libertad $\alpha = (q, p)$, siendo al extensión a más una consecuencia directa de lo que aquí se describe.

Si suponemos que no tenemos información completa sobre el estado del sistema, el estado no está representado por un punto en el espacio de las fases sino por una *densidad de probabilidad* en dicho espacio. Esta es una función $\rho(\alpha)$ que permite calcular la probabilidad de encontrar al sistema en cualquier región del espacio de las fases. Si la región es \mathcal{R} , la probabilidad será

$$\text{Prob}(\mathcal{R}) = \int_{\mathcal{R}} d\alpha \rho(\alpha). \quad (6.3)$$

6.1.1. Transformaciones canónicas

Los representantes de las transformaciones físicas en el espacio de las fases corresponden a cambios en las coordenadas α . Si el estado inicial está descrito

por el punto $\alpha = (q, p)$ el estado luego de la transformación F estará descrito por las coordenadas

$$\alpha' = F(\alpha). \quad (6.4)$$

En cambio, para el caso en que desconocemos el estado completamente, si el estado antes de la transformación estaba descrito por la densidad de probabilidad $\rho(\alpha)$, entonces el estado después de la transformación estará descrito por

$$\rho'(\alpha) = \rho(F^{-1}(\alpha)). \quad (6.5)$$

Podemos interpretar esta definición con la ayuda de la figura 6.1. En ella vemos que el valor de la densidad de probabilidad ρ' que describe en el punto α luego de la transformación es el que tenía densidad de probabilidad ρ en el punto que se transforma en α al aplicar la transformación.

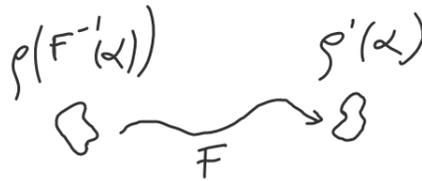


Figura 6.1: La densidad de probabilidad ρ que describe al estado antes de la transformación en el punto $F^{-1}(\alpha)$ se transforma mediante F en la densidad de probabilidad ρ' en el punto α .

También podemos aplicar la transformación a una región \mathcal{R} . Toda región del espacio de fases puede asociarse en forma unívoca a un estado físico: aquél en el cual la densidad de probabilidad es uniforme sobre la región \mathcal{R} y vale cero fuera de ella. A esta función la llamaremos $\mathcal{R}(\alpha)$. Análogamente al caso anterior, una transformación mapeará la región \mathcal{R} en \mathcal{R}' según

$$\mathcal{R}'(\alpha) = \mathcal{R}(F^{-1}(\alpha)). \quad (6.6)$$

Teniendo en cuenta lo anterior surge naturalmente una condición fundamental para la función $F(\alpha)$. Los representantes de las transformaciones físicas en el espacio de las fases deben preservar el área. Esto surge de exigir que la probabilidad de que el sistema cuyo estado es $\rho(\alpha)$ se encuentre en la región $\mathcal{R}(\alpha)$ debe ser la misma que la probabilidad de que el sistema cuyo estado es $\rho'(\alpha) = \rho(F^{-1}(\alpha))$ se encuentre en la región $\mathcal{R}'(\alpha) = \mathcal{R}(F^{-1}(\alpha))$.

La preservación de áreas es el requisito fundamental que deben satisfacer los representantes de las transformaciones físicas en el espacio de fases. Deben conservar el área de cualquier región, no solamente el volumen total sino también cualquier área definida en cualquier superficie del espacio de fases. Una transformación que cumple con esta condición es lo que se denomina *transformación canónica*.

6.1.2. Funciones Generatrices y Generadores

Un poderoso teorema, cuya prueba omitiremos ya que puede hallarse en los buenos libros de Mecánica Clásica, establece condiciones necesarias y suficientes para que una transformación sea canónica. Una transformación es canónica si y solo si existe una función generatriz a partir de la cual puede derivarse.

Hay funciones generatrices de cuatro tipos distintos y todas ellas dependen de una de las componentes previas y una de las componentes posteriores a la transformación. Es decir, una de las componentes de $\alpha = (q, p)$ y una de las componentes de $\alpha' = (Q, P)$ respectivamente. Existen, por lo tanto, cuatro tipos de funciones $F_1(q, Q), F_2(q, P), F_3(p, P), F_4(p, Q)$.

Para funciones del segundo tipo, por ejemplo, la transformación es canónica si se cumple que $Q = \partial_q F_2(q, P)$ y $p = \partial_P F_2(q, P)$. Un caso particular es aquel en el cual $F_2(q, P) = qP$. En ese caso es inmediato ver que la transformación es la identidad. Que no resulta muy interesante.

En cambio, un caso muy importante a considerar es el caso de transformaciones que difieren poco de la identidad. Estas son llamadas “transformaciones canónicas infinitesimales”. Estas son funciones del tipo

$$F_2(q, P) = qP + \epsilon G(q, P), \quad (6.7)$$

donde ϵ es un parámetro pequeño y la función $G(q, P)$ puede ser cualquiera. la función $G(q, P)$ caracteriza a la transformación y se la denomina “generador de la transformación canónica”. En ese caso, las viejas y nuevas coordenadas y momentos están relacionadas de la siguiente forma:

$$Q = q + \epsilon \partial_P G(q, P), \quad p = P + \epsilon \partial_q G(q, P). \quad (6.8)$$

Lo interesante de esta construcción es que para cualquier elección de $G(q, P)$ la transformación resultante es canónica. Algunos ejemplos sencillos serán discutidos en lo que sigue.

6.1.3. Traslaciones espaciales infinitesimales

Veamos la representación de la primera operación física: la traslación. Supongamos que desplazamos rígidamente a nuestro sistema desde su posición original \vec{r}_0 hasta una posición vecina $\vec{r}'_0 = \vec{r}_0 + \vec{\epsilon}$ para un cierto vector de magnitud infinitesimal $\vec{\epsilon}$. Supongamos por ahora que el sistema tiene solamente 1 grado de libertad (la generalización es inmediata). En el espacio de las fases esta transformación está representada por la función que mapea $\alpha = (q, p)$ en $\alpha' = (Q, P) = (q + \epsilon, p)$. Correspondientemente, el estado del sistema transformará a $\rho'(q, p) = \rho(q - \epsilon, p)$. Inspeccionando la ecuación general 6.8 es inmediato ver que esta transformación es canónica y se obtiene si elegimos como generador a el momento. Es decir, si elegimos $G(q, P) = P$. Diremos entonces que el *momento es el generador de las traslaciones*.

Para encontrar el representante de las traslaciones en la mecánica cuántica tenemos que encontrar una propiedad de esta operación que no esté directamente asociada a la formulación en el espacio de fases.

Para hacer esto, aún en el contexto de estados clásicos definiremos dos operaciones que “no conmuten”. Es decir, dos operaciones que, dependiendo del orden en el que se las aplique, producirán distintos estados. Una de estas operaciones será la traslación T . La otra será, que denotaremos M_q , será la multiplicación por la coordenada de posición de la siguiente manera:

$$M_q \rho(q, p) = q \rho(q, p). \quad (6.9)$$

Remarcamos que esta segunda operación *no* es el representante de una operación física y que $q \rho(q, p)$ ya no es una distribución de probabilidad. Sin embargo es una operación posible y veremos que nos ayudará a determinar las propiedades de T .

Consideremos primero que es lo que sucede si primero aplicamos una traslación T y luego M_q . En ese caso obtenemos una función $\tilde{\rho}_1(q, p)$ que es

$$\tilde{\rho}_1(q, p) = M_q T \rho(q, p) = q \rho'(q, p). \quad (6.10)$$

En cambio, si aplicamos esta operación en el orden inverso (primero M_q y luego T) obtenemos

$$\tilde{\rho}_2(q, p) = T M_q \rho(q, p) = (q - \epsilon) \rho'(q, p). \quad (6.11)$$

La diferencia entre estas dos transformaciones $\delta \tilde{\rho}(q, p) = \tilde{\rho}_1 - \tilde{\rho}_2$ es, a primer orden en ϵ ,

$$\delta \tilde{\rho}(q, p) = (M_q T - T M_q) \rho'(q, p) = \epsilon \rho'(q, p). \quad (6.12)$$

Cómo esto debe valer para cualquier función ρ , podemos decir que el representante de las traslaciones en el espacio de fases debe cumplir con la propiedad general:

$$M_q T - T M_q = \epsilon \mathbb{1}. \quad (6.13)$$

Lo interesante de este cálculo es notar que la relación, que es de conmutación, define completamente a las traslaciones espaciales y no es una expresión sobre las coordenadas ni sobre el estado, sino sobre operaciones. Esto nos permitirá extender estas simetrías a la mecánica cuántica.

6.1.4. Traslaciones en momento.

Otra transformación física posible es imprimir bruscamente (acoplando a alguna fuente externa, por ejemplo) un pequeño momento ϵ_p a todas las partículas. En ese caso la transformación canónica es $Q = q$ y $P = p + \epsilon_p$. Siguiendo el procedimiento anterior vemos que el generador en este caso es $G(q, P) = q$. Es decir, *la posición es el generador de las traslaciones en momento*.

Análogamente para obtener una relación de conmutación de la traslación en momento T_p introduciremos la operación M_p , que multiplica por el argumento de

la función que representa al estado. Si comparamos ahora lo que resulta aplicando estas dos operaciones en distinto orden obtenemos

$$\delta\tilde{\rho}(q, p) = (M_p T_p - T_p M_p) \rho'(q, p) = \epsilon_p \rho'(q, p) \quad (6.14)$$

Que escribimos en su forma general, independiente de $\rho(q, p)$ como:

$$M_p T_p - T_p M_p = \epsilon_p \mathbb{1}. \quad (6.15)$$

Nuevamente, vemos que la relación de conmutación (clásica) entre M_p y T_p , es equivalente a imponer la representación natural para esta transformación, que está dada por $Q = q$, $P = p + \epsilon_p$. Como dijimos, la virtud de la relación de conmutación es que podrá ser utilizada para definir las traslaciones en el caso cuántico.

6.1.5. Rotaciones

Estudiaremos ahora las rotaciones. Veremos ahora cómo es la estructura equivalente a las relaciones de conmutación clásicas obtenidas para traslaciones espaciales y en momento, pero para rotaciones. En este caso, como las rotaciones en distintas direcciones no conmutan, no necesitaremos construir operaciones que no representen transformaciones físicas. Deduciremos las relaciones necesarias comparando rotaciones en distintos ejes.

Toda rotación en el espacio tridimensional está caracterizada por un eje de rotación y un ángulo. El eje \vec{e}_n es el eje de rotación y el ángulo nos dice cuanto rotamos alrededor de dicho eje. La acción de las rotaciones en el espacio real es bien conocida. Cuando rotamos una partícula alrededor del eje \vec{e}_n en un ángulo ϕ la nueva posición \vec{r}' se relaciona con la posición antes de la transformación (\vec{r}) mediante la ecuación $\vec{r}' = R_{\vec{e}_n}(\phi)\vec{r}$. En los casos particulares de los ejes cartesianos, la forma de las matrices de 3×3 que aparece en esa expresión es bien conocida. Por ejemplo, una rotación alrededor del eje \vec{e}_z está descrita por la matriz

$$R_{\vec{e}_z}(\phi) = \begin{bmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (6.16)$$

Análogamente, las matrices de rotación alrededor de los otros ejes cartesianos son

$$R_{\vec{e}_y}(\phi) = \begin{bmatrix} \cos \phi & 0 & \sin \phi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi & 0 & \cos \phi \end{bmatrix}, \quad R_{\vec{e}_x}(\phi) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi & -\sin \phi \\ 0 & \sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix}. \quad (6.17)$$

Estudiemos entonces la diferencia de componer dos rotaciones en ejes ortogonales en distintos órdenes para ángulos pequeños $\delta\phi$. Comenzaremos con los ejes x e y , tenemos

$$R_{\vec{e}_x}(\delta\phi)R_{\vec{e}_y}(\delta\phi) \approx \begin{bmatrix} 1 - \frac{\delta\phi^2}{2} & 0 & \delta\phi \\ \delta\phi^2 & 1 - \frac{\delta\phi^2}{2} & -\delta\phi \\ -\delta\phi & \delta\phi & 1 - \delta\phi^2 \end{bmatrix}, \quad (6.18)$$

mientras que las rotaciones en orden inverso dan lugar a

$$R_{\vec{e}_y}(\delta\phi)R_{\vec{e}_x}(\delta\phi) \approx \begin{bmatrix} 1 - \frac{\delta\phi^2}{2} & \delta\phi^2 & \delta\phi \\ 0 & 1 - \frac{\delta\phi^2}{2} & -\delta\phi \\ -\delta\phi & \delta\phi & 1 - \delta\phi^2 \end{bmatrix}. \quad (6.19)$$

Por lo tanto, el conmutador de estas dos rotaciones es:

$$\begin{aligned} R_{\vec{e}_x}(\delta\phi)R_{\vec{e}_y}(\delta\phi) - R_{\vec{e}_y}(\delta\phi)R_{\vec{e}_x}(\delta\phi) &\approx \begin{bmatrix} 0 & -\delta\phi^2 & 0 \\ \delta\phi^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ &\approx R_{\vec{e}_z}(\delta\phi^2) - \mathbb{1}. \end{aligned} \quad (6.20)$$

Esta expresión nos muestra, en primera medida, que las rotaciones infinitesimales conmutan ya que el resultado es una matriz en la que solamente aparecen términos de segundo orden en $\delta\phi$. En segundo lugar, podemos ver que misma expresión define la forma en que las rotaciones dejan de conmutar y permite definir a las rotaciones.

Permutando cíclicamente los índices en la anterior se obtiene igualdades del mismo tipo que utilizaremos caracterizar a las rotaciones en cualquier dirección:

$$R_{\vec{e}_j}(\delta\phi)R_{\vec{e}_k}(\delta\phi) - R_{\vec{e}_k}(\delta\phi)R_{\vec{e}_j}(\delta\phi) = \epsilon_{jkl}R_{\vec{e}_l}(\delta\phi^2) - \mathbb{1}. \quad (6.21)$$

Es fácil ver que si pedimos que el representante de las rotaciones en el espacio de las fases satisfaga esta identidad entonces resulta que el generador de una rotación infinitesimal alrededor del eje \vec{e}_n es $\vec{L} \cdot \vec{e}_n$, es decir, la componente del momento angular sobre el eje de rotación. Veremos que lo mismo sucede en el caso cuántico.

6.2. Transformaciones Cuánticas.

6.2.1. Transformaciones físicas en el espacio de Hilbert

Tal como razonamos en el caso del espacio de las fases, es posible imponer restricciones muy fuertes sobre las posibles formas que puede tener las representaciones de las transformaciones físicas en el espacio de Hilbert. En efecto, en el espacio de las fases pudimos razonar de la siguiente forma: dado que las áreas de las distintas regiones tienen una interpretación física (en términos de probabilidades) concluimos que las transformaciones físicas deben ser representadas en dicho espacio mediante transformaciones que preserven dichas áreas. Estas son las transformaciones canónicas. En el caso de la mecánica cuántica podemos razonar de la misma manera: Dados dos estados $|\phi\rangle$ y $|\psi\rangle$, el módulo del producto escalar entre ambos tiene una interpretación física ya que $|\langle\phi|\psi\rangle|^2$ es la probabilidad de que una vez preparado el estado $|\phi\rangle$ midamos el estado $|\psi\rangle$. Teniendo en cuenta esto, si realizamos una transformación física en el espacio real que cambia los estados $|\phi\rangle$ y $|\psi\rangle$ mapeándolos a los estados $|\phi'\rangle = \hat{U}|\phi\rangle$ y $|\psi'\rangle = \hat{U}|\psi\rangle$ debemos exigir

que el representante de la transformación (que aquí denominamos \hat{U}) satisfaga la ley de conservación de las probabilidades (las probabilidades deben ser idénticas antes y después de la transformación):

$$|\langle \phi' | \psi' \rangle|^2 = |\langle \phi | \psi \rangle|^2. \quad (6.22)$$

Esta igualdad debe valer para cualquier par de estados $|\phi\rangle$ y $|\psi\rangle$. Por lo tanto, los representantes de la transformación deben satisfacer que

$$\hat{U}^\dagger \hat{U} = \pm \mathbb{1}. \quad (6.23)$$

Es decir, las transformaciones deben estar representados por operadores unitarios o antiunitarios. En particular, aquellas transformaciones que forman una familia continua que incluye a la identidad (por ejemplo, las traslaciones espaciales, en momento, las rotaciones, la evolución temporal, etc), deben ser representadas por operadores unitarios. Esta es la condición más importante que impondremos sobre los representantes de las transformaciones físicas en el espacio de Hilbert.

Para transformaciones infinitesimales esta conclusión impone límites muy fuertes a la expresión matemática que pueden adoptar los operadores que representan a la transformación. Consideremos una transformación infinitesimal de algún tipo, que está caracterizada por algún parámetro pequeño δa (que podrá ser una distancia, un momento, un ángulo, un intervalo de tiempo, etc, según sea la transformación en cuestión). Cualquier transformación de este tipo puede ser expresada como $\hat{D}(\delta a) = \mathbb{1} - i\delta a \hat{K} + O(\delta a^2)$, donde el operador \hat{K} caracteriza a la transformación (es el generador de la transformación). Este operador debe ser hermítico, es decir: $\hat{K}^\dagger = \hat{K}$. Esta es una condición necesaria y suficiente para que $\hat{D}(\delta a)$ sea unitario. En efecto, esto puede demostrarse notando que

$$\begin{aligned} \hat{D}^\dagger(\delta a)\hat{D}(\delta a) &= (\mathbb{1} + i\delta a \hat{K}^\dagger)(\mathbb{1} - i\delta a \hat{K}) + O(\delta a^2) \\ &= \mathbb{1} + i\delta a (\hat{K}^\dagger - \hat{K}) + O(\delta a^2). \end{aligned} \quad (6.24)$$

Por último es posible obtener una expresión simple para una transformación física no infinitesimal, sino finita. En efecto, el operador $\hat{D}(a)$ puede obtenerse como una composición de n operadores $\hat{D}(\delta a)$ donde $\delta a = a/n$. Tomando el límite para $n \rightarrow \infty$ con $\delta a \rightarrow 0$ de modo tal que $n\delta a = a$ obtenemos la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \hat{D}(a) &= \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\mathbb{1} - i \frac{a}{n} \hat{K} \right)^n \\ &= \exp(-ia\hat{K}). \end{aligned} \quad (6.25)$$

En la deducción anterior hay una hipótesis implícita, que se cumple en todos los casos que estudiaremos salvo para la evolución temporal. En efecto, estamos suponiendo que el generador de la transformación infinitesimal \hat{K} que nos permite dar un salto desde 0 hasta δa es el mismo que el que nos permite dar saltos sucesivos de tamaño δa desde cualquier otro punto del eje del parámetro de la transformación.

6.2.2. Traslaciones

Traslaciones en posición. El representante de las traslaciones será un operador unitario tal que para el caso infinitesimal cumple con la relación de conmutación análoga a la que vimos en el caso clásico. El representante de una traslación infinitesimal en una distancia ϵ será denotado como $\hat{T}(\epsilon)$. Teniendo en cuenta lo anterior, este operador debe satisfacer:

$$\hat{X}\hat{T}(\epsilon) - \hat{T}(\epsilon)\hat{X} = \epsilon\mathbb{1}.$$

Reemplazando la expresión $\hat{T}(\epsilon) \approx \mathbb{1} - i\epsilon\hat{K}_x$, obtenemos que el generador de las traslaciones debe cumplir que

$$[\hat{X}, \hat{K}_x] = i\mathbb{1}. \quad (6.26)$$

Es decir, el generador de las traslaciones espaciales es un operador tal que su conmutador con el operador posición es el indicado mas arriba. Obviamente \hat{K}_x tiene unidades de inversa de longitud y siempre puede escribirse como $\hat{K}_x = \hat{P}/\hbar$. De este modo, el generador de las traslaciones espaciales es el operador que satiface la relación de conmutación

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar\mathbb{1}. \quad (6.27)$$

En términos de este operador (el momento), las traslaciones infinitesimales son $\hat{T}(\epsilon) = \mathbb{1} - i\epsilon\hat{P}/\hbar$ y las traslaciones finitas resultan ser

$$\hat{T}(x) = \exp(-ix_0\hat{P}/\hbar), \quad (6.28)$$

dónde x_0 es un número real que determina la magnitud del desplazamiento en posición.

Traslaciones en momento. Razonando en forma análoga a la anterior. Podemos deducir fácilmente que las traslaciones en momento tienen un generador \hat{K}_p tal que satisface la relación de conmutación $[\hat{P}, \hat{K}_p] = i\mathbb{1}$. Nuevamente, el operador \hat{K}_p tiene unidades de inversa de momento y puede ser escrito siempre como $\hat{K}_p = -\hat{X}/\hbar$. Entonces, el generador de las traslaciones en momento es el operador posición (con el signo cambiado). Las traslaciones en momento, infinitesimales y finitas, resultan ser $\hat{T}_p(\epsilon') \approx \mathbb{1} + i\epsilon'X/\hbar$ y si exponenciamos obtenemos la que la traslación en un momento p_0 es

$$\hat{T}_p(p) = \exp(+ip_0\hat{X}/\hbar). \quad (6.29)$$

Traslaciones en el espacio de fases. Usando traslaciones espaciales y en momento podemos definir operadores de traslación en el espacio de las fases. En efecto, estos se definen como la composición de una traslación espacial y una en momento. Sin embargo, estas operaciones no conmutan asique la forma de definir traslaciones en el espacio de las fases no es única. La relación entre traslaciones espaciales y en momento es la siguiente:

$$\hat{T}(x_0)\hat{T}_p(p_0) = \hat{T}(p_0)\hat{T}_p(x_0)\exp(-ix_0p_0/\hbar). \quad (6.30)$$

El operador de desplazamiento en el espacio de fases se define de modo tal que sea simétrico ante el orden de las traslaciones. Esto es:

$$\begin{aligned}
\hat{D}(x_0, p_0) &= \exp(-i(x_0P - p_0X)/\hbar) \\
&= \hat{T}(x_0)\hat{T}_p(p_0)\exp(ix_0p_0/2\hbar). \\
&= \hat{T}_p(p_0)\hat{T}(x_0)\exp(-ix_0p_0/2\hbar).
\end{aligned} \tag{6.31}$$

Para demostrar la validez de estas identidades podemos proceder a partir de la versión infinitesimal de estas transformaciones o bien aplicar la relación de Baker-Campbell-Hausdorff que establece que $\exp(A+B) = \exp(A)\exp(B)\exp(-[A,B]/2)$ si A y B conmutan con $[A,B]$.

Es interesante notar que los operadores de traslación en el espacio de fases forman una base ortonormal y completa del espacio de operadores. En efecto, se puede probar que

$$\text{Tr}(\hat{D}^\dagger(x_0, p_0)\hat{D}(x'_0, p'_0)) = 2\pi\delta(p_0 - p'_0)\delta(x_0 - x'_0) \tag{6.32}$$

Autoestados de posición y momento. De las expresiones que hemos obtenido para los operadores de traslación surge que: *los autoestados de la posición son invariantes ante desplazamientos en momento* y, correspondientemente, los autoestados de momento son invariantes frente a traslaciones en posición. Veamos, para cada caso,

$$T(x_0)|p\rangle = \exp(ix_0\hat{P}/\hbar)|p\rangle = \exp(ix_0p/\hbar)|p\rangle \tag{6.33}$$

$$T_p(p_0)|x\rangle = \exp(ip_0\hat{X}/\hbar)|x\rangle = \exp(ip_0x/\hbar)|x\rangle \tag{6.34}$$

Esto surge directamente del hecho de que posición y momento son generadores de las respectivas transformaciones. Esto equivale a decir que los autoestados de momento están completamente deslocalizados en posición y viceversa.

6.2.3. Rotaciones

Buscaremos ahora al representante de una rotación $R_{\vec{e}_n}(\phi)$ al que denotaremos $\hat{D}(R_{\vec{e}_n}(\phi))$. El representante de una rotación infinitesimal en un ángulo $\delta\phi$ alrededor del eje \vec{e}_n debe cumplir una propiedad esencial: su desarrollo a primer orden en $\delta\phi$ debe ser tal que $\hat{D}(R_{\vec{e}_n}(\delta\phi)) \approx \mathbb{1} - iJ_n\delta\phi/\hbar$. Donde J_n es algún operador hermítico con unidades de momento angular (las mismas que \hbar) y cuyas propiedades debemos determinar. Para encontrar las propiedades que deben cumplir los generadores de las rotaciones alrededor de los tres ejes cartesianos impondremos, al igual que antes, la condición que establece que estos representantes tengan las mismas propiedades que sus representados. Es decir, impondremos la validez de la condición

$$\hat{D}(R_{\vec{e}_x}(\delta\phi))\hat{D}(R_{\vec{e}_y}(\delta\phi)) - \hat{D}(R_{\vec{e}_y}(\delta\phi))\hat{D}(R_{\vec{e}_x}(\delta\phi)) = \hat{D}(R_{\vec{e}_z}(\delta\phi^2)) - \mathbb{1}. \tag{6.35}$$

Reemplazando las expresiones correspondientes para los representantes de las rotaciones alrededor de los ejes cartesianos se verifica que se debe cumplir la siguiente relación entre los generadores.

$$\begin{aligned} J_x J_y - J_y J_x &= i\hbar J_z \\ [J_x, J_y] &= i\hbar J_z. \end{aligned} \quad (6.36)$$

Para cualquier par de ejes, se puede verificar que, se cumple la relación general

$$[J_j, J_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} J_l. \quad (6.37)$$

Estas expresiones nos indican que para encontrar los representantes de las rotaciones debemos encontrar tres operadores que satisfagan esta relación de conmutación. Una vez hecho esto podemos escribir $J_n = \vec{e}_n \cdot \vec{J}$ y la rotación infinitesimal alrededor del eje \vec{e}_n está respresentada entonces por la expresión que escribimos más arriba. Con el mismo argumento que aplicamos a las traslaciones, para obtener la rotación finita debemos componer un número infinito de rotaciones infinitesimales. Haciendo esto obtenemos que una rotación finita debe ser tal que

$$\hat{D}(R_{\vec{e}_n}(\phi)) = \exp(-i\phi \vec{e}_n \cdot \vec{J}/\hbar) \quad (6.38)$$

Veamos algunos ejemplos sencillos de rotaciones. Para encontrar al representante de las rotaciones en un espacio cualquiera, basta con encontrar tres operadores que satisfagan la relación de conmutación $[J_j, J_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} J_l$. Mas adelante veremos una forma constructiva de hacer esto para cualquier dimensión. Pero hay algunas conclusiones que son evidentes a partir de estas relaciones de conmutación. Para dimensión finita es inmediato ver que $\text{Tr}(J_k) = 0$ para todo $k = x, y, z$ y por lo tanto todos estos operadores tienen autovalores positivos y negativos (que suman cero). Hay algunos ejemplos sencillos que es importante estudiar:

Dimensión $N = 2$ (Spin 1/2). En este caso es evidente que a partir de las matrices de Pauli podemos construir tres operadores que satisfacen las relaciones requeridas: $\hat{S}_k = \frac{\hbar}{2} \sigma_k$. En efecto, esto es evidente usando que $[\sigma_j, \sigma_k] = 2i\epsilon_{jkl} \sigma_l$. En consecuencia, el representante de las rotaciones en el espacio de dimensión $N = 2$ es:

$$\hat{D}(R_{\vec{e}_n}(\phi)) = \exp(-i\phi \vec{n} \cdot \vec{S}/\hbar) = \exp(-i\vec{n} \cdot \vec{\sigma} \phi/2)$$

Est expresión se simplifica notablemente expandiendo la exponencia como suma de potencias pares e impares. Usando la relación $(\vec{n} \cdot \vec{\sigma})^2 = \mathbb{1}$, es fácil mostrar que en este caso podemos escribir

$$\hat{D}(R_{\vec{e}_n}(\phi)) = \cos(\phi/2) \mathbb{1} - i\vec{n} \cdot \vec{\sigma} \sin(\phi/2) \quad (6.39)$$

Al aplicar una rotación modificamos el estado del sistema y por lo tanto también cambian los valores medios de todos los observables.

Para ver cómo se modifican los valores medios de las distintas componentes del spin $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$, debemos calcular el operador

$$\vec{\sigma}' = \hat{D}^\dagger(R_{\vec{e}_n}(\phi))\vec{\sigma}\hat{D}(R_{\vec{e}_n}(\phi)) \quad (6.40)$$

Empecemos por el caso particular en la dirección cartesiana z . En este caso σ_z permanecerá invariante $\sigma'_z = \sigma_z$. Veamos entonces cómo cambian las componentes $\vec{\sigma}_{x,y}$ del spin cuando realizamos una rotación alrededor del eje \vec{e}_z . Para \vec{e}_x tenemos

$$\begin{aligned} \sigma'_x &= \hat{D}^\dagger(R_{\vec{e}_z}(\phi))\sigma_x\hat{D}(R_{\vec{e}_z}(\phi)) \\ \sigma'_x &= (\cos(\phi/2)\mathbb{1} + i\sigma_z\sin(\phi/2))\sigma_x(\cos(\phi/2)\mathbb{1} - i\sigma_z\sin(\phi/2)) \\ \sigma'_x &= \sigma_x\cos(\phi) - \sigma_y\sin(\phi) \end{aligned} \quad (6.41)$$

Análogamente, tenemos

$$\sigma'_y = \sin(\phi)\sigma_x + \cos(\phi)\sigma_y.$$

Es interesante ver, que estos resultados para pueden resumirse mediante la siguiente ecuación:

$$\vec{\sigma}' = R_{\vec{e}_x}(\phi)\vec{\sigma} \quad (6.42)$$

donde $R_{\vec{e}_x}$ es la matriz de rotación cartesiana 6.16. Es decir, las componentes del vector de matrices de Pauli se transforman ante rotaciones como lo hace un vector en tres dimensiones, algo natural, pero no obvio a priori. De hecho, este caso particular puede generalizarse a cualquier dirección de rotación \vec{n} . El resultado que, damos ahora sin demostración, es la extensión esperable de la ecuación anterior.

$$\begin{aligned} \vec{\sigma}' &= \hat{D}(R_{\vec{e}_n}(\phi))^\dagger\vec{\sigma}\hat{D}(R_{\vec{e}_n}(\phi)) \\ \vec{\sigma}' &= R_{\vec{e}_n}(\phi)\vec{\sigma} \end{aligned} \quad (6.43)$$

Uno puede obtener este resultado siguiendo el proceso anterior, pero es trabajoso. Más adelante veremos una manera poderosa y elegante de obtener este resultado sin hacer demasiadas cuentas.

Dimensión $N = 3$. (Spin 1) En este caso debemos encontrar tres matrices de 3×3 que cumplan con las relaciones de conmutación requeridas (aunque por ahora no resulta obvio que haya una forma sistemática para hacerlo). Veamos un caso particular:

$$J_x = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, J_y = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{bmatrix}, J_z = \hbar \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (6.44)$$

La comprobación de que $[J_x, J_y] = i\hbar J_z$ puede hacerse de manera inmediata. Asimismo, es inmediato diagonalizar cualquiera de estas tres matrices ya que solamente tenemos que diagonalizar un bloque de 2×2 en el cual aparece una matriz de Pauli (σ_x o σ_y). Por ese mismo motivo, es claro que las tres matrices tienen autovalores

0 y $\pm\hbar$. A los autoestados de cada una de ellas podemos agruparlos en tres bases de la forma $\mathcal{B}_k = \{|m_j\rangle, m_j = 0, \pm 1\}$, con $k = x, y, z$. Es interesante notar que la representación de los generadores de las rotaciones en este espacio dada en (6.44) no es la habitual ya que ninguna de las matrices es diagonal en la base elegida para escribirlas. En efecto, dicha base tiene la siguiente propiedad: el primer vector es autoestado de J_x con autovalor nulo, el segundo es autoestado de J_y con autovalor nulo y el tercero es autovector de J_z con autovalor nulo. Esta base, entonces, podemos denotarla como $\mathcal{B} = \{|0_x\rangle, |0_y\rangle, |0_z\rangle\}$. En esta base podemos escribir, por ejemplo, los autoestados de J_z como $\mathcal{B}_z = \{|0_z\rangle, (|0_x\rangle \pm |0_y\rangle)/\sqrt{2}\}$.

La representación (6.44) hace evidente una propiedad importante de estos operadores: Sus cuadrados conmutan, o sea: $[J_j^2, J_k^2] = 0$, para todo par j, k . En efecto, las expresiones anteriores nos permiten demostrar que los operadores $\Pi_k = J_k^2/\hbar$ son proyectores. Esto se deduce inmediateamente notando que todos son diagonales en la base \mathcal{B} que sus autovalores son 1 y 0. En otras palabras, la base \mathcal{B} es la base de autovectores comunes de J_x^2, J_y^2 y J_z^2 .

Otra propiedad importante que se deduce a partir de la anterior es que $J_j^3/\hbar^3 = J_j/\hbar$, etc. En consecuencia, la matriz que representa a una rotación finita alrededor de cualquier eje en este espacio siempre puede escribirse como

$$\begin{aligned} \hat{D}(R_{\vec{e}_n}(\phi)) &= \exp(-i\phi J_n/\hbar) \\ &= \mathbb{1} - i\frac{J_n}{\hbar} \sin \phi + \frac{J_n^2}{\hbar^2} (\cos \phi - 1). \end{aligned} \quad (6.45)$$

6.2.4. Dimension Finita

En un espacio de dimensión finita (N) no es posible encontrar operadores X y P tales que $[X, P] = i\hbar\mathbb{1}$ y por lo tanto no es posible construir representaciones de las traslaciones en dichos espacios. Es sencillo demostrar que esto no es posible ya que en todo espacio de dimensión finita podemos usar libremente la relación $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$. Por lo tanto, debería cumplirse que $\text{Tr}[A, B] = 0$, con lo cual no podría cumplirse la condición antedicha que impone que $\text{Tr}[X, P] = i\hbar N$. Esto tiene una interpretación natural ya que las representaciones que discutimos más arriba corresponden a traslaciones infinitesimales o finitas pero continuas (continuamente conectadas con la identidad). Sin embargo, en un espacio de dimensión finita es posible encontrar una forma de representar a las traslaciones discretas.

En efecto, supongamos que en ese espacio definimos una base $\mathcal{B} = \{|k\rangle, k = 0, \dots, N-1\}$. Podemos pensar que cada estado $|k\rangle$ representa al sistema ubicado en una posición fija en una red de N puntos (con condiciones de contorno periódicas). Sea \hat{T} el operador de traslación discreto. Naturalmente este operador debe cumplir que $\hat{T}^q|k\rangle = |k+q, \text{mod}(N)\rangle$. Evidentemente este operador es unitario (mapea una base en otra base) y satisface $\hat{T}^N = \mathbb{1}$ y por lo tanto sus autovalores son las raíces N -ésimas de la unidad.

Asimismo, podemos definir un operador \hat{T}_p que traslade en momentos por analogía con el caso continuo: debe ser un operador que sea diagonal en la base \mathcal{B} , que representa a los autoestados de la posición y también debe cumplir

$\hat{T}_p|k\rangle = \exp(i2\pi k/N)|k\rangle$ (o sea, sus autovalores también son las raíces N -ésimas de la unidad. Tal como lo hicimos en el caso continuo, en este caso discreto el operador de traslación en el espacio de fases puede definirse de modo tal que $\hat{D}(a,b) = \hat{T}^a \hat{T}_p^b \exp(i\pi ab/N)$.

Es interesante ver un ejemplo concreto: Para $N = 2$ tenemos $\mathcal{B} = \{|0\rangle, |1\rangle\}$, el operador de traslación en posición es $U = \sigma_x$, el operador de traslación en momento es $V = \sigma_z$ (donde σ_i son las conocidas matrices de Pauli). Es un ejercicio interesante construir explícitamente estos operadores para $N = 3$ (prometo solución!).

En conclusión para dimensión finita no es posible encontrar operadores posición y momento que satisfagan las relaciones de conmutación canónicas. Sin embargo, podemos definir perfectamente operadores que trasladan en la base de posición y en la base de momento (y es posible demostrar que dichas bases se relacionan una con la otra mediante la transformada de Fourier discreta). Estos operadores de traslación cumplen con las mismas relaciones que en el caso continuo (reemplazando en todas las expresiones $\hbar \rightarrow 2\pi/N$).

6.2.5. La constante de Planck

Es importante notar que la teoría de transformaciones en el espacio de Hilbert requiere, necesariamente, la existencia de una constante fundamental con unidades de acción. En el caso clásico, las funciones generatrices tienen unidades de acción: la que corresponde a la identidad, por ejemplo, es $F_2(q,P) = qP$ y claramente tiene esas unidades. En cambio, el operador que representa a la identidad en el espacio de Hilbert es adimensional: es simplemente el operador identidad $U(0) = I$. Entonces, si usamos como principio que los generadores de las distintas transformaciones cuánticas sean los mismos que los de las transformaciones clásicas, al escribir $\hat{D}(T(\epsilon)) = I - i\epsilon K$ tenemos que usar un generador K cuyas unidades sean las inversas de las de ϵ . Siempre hay que usar una constante. Evidentemente una elección apropiada de unidades en cada caso puede lograr que la constante sea la misma para todas las transformaciones. Entonces, el formalismo de la mecánica cuántica visto hasta ahora implica la existencia de una constante \hbar . El valor de esa constante queda indeterminado y debe ser fijado por los experimentos.