Fundamentos de Mecánica Cuántica

Postulados y Primeras Consecuencias

1. Introducción

En estas notas abordaremos los aspectos formales de la Mecánica Cuántica, principalmente a partir de la formulación axiomática, es decir, de los postulados.

No será parte de este material el desarrollo previo de la Física Cuántica que dió lugar a la formalización, sino que comenzaremos directamente de su más acabada formulación, aunque parezca extremadamente artificial.

Para hacer un recorrido más histórico y desde los experimentos físicos y resultados de los mismos, invitamos a revisar los materiales que se dan en la bibliografía.

2. Notación de Dirac

Paul Dirac ha propuesto una notación a partir de la cual se puede desarrollar toda la teoría del Álgebra Lineal, como así también -y fundamentalmente- la teoría de *Espacios de Hilbert*.

Consideremos primero un espacio vectorial V cuyo cuerpo sea el de los complejos, dotado de un producto interno. En este espacio existe una operación binaria, $\langle \bullet | \bullet \rangle$, que satisface las siguientes propiedades:

I. $\langle \bullet | \bullet \rangle : V \times V \to \mathbb{C}$

II. $\langle \vec{v} | \vec{w} \rangle = \langle \vec{w} | \vec{v} \rangle^*$, (* indica conjugación en complejos)

III. $\langle \vec{v} | \lambda\, \vec{w}_1 + \vec{w}_2 \rangle = \lambda \langle \vec{v} | \vec{w}_1 \rangle + \langle \vec{v} | \vec{w}_2 \rangle$ (lineal en el segundo argumento)

IV. Si $\vec{v} \neq 0$, $\langle \vec{v} | \vec{v} \rangle > 0$. Además, $\langle \vec{0} | \vec{0} \rangle = 0$

Podemos notar que dada la linealidad respecto al segundo argumento, si fijamos un vector, por ejemplo $\vec{v}$ para el primer argumento tenemos una funcional lineal:

$$f_{\vec{v}}(\vec{w}) = \langle \vec{v} | \vec{w} \rangle$$

Es decir, a un dado vector $\vec{v}$ le podemos asociar una funcional lineal (también llamada 1-forma) $f_{\vec{v}}$ tal que

$$f_{\vec{v}}(\bullet) = \langle \vec{v} | \bullet \rangle$$

2.1. Vectores Ket y Vectores Bra

Como se denotó el producto interno, podemos notar entonces que $\langle \vec{v} |$ es una funcional lineal que al aplicarle a un vector $\vec{w}$ resulta

$$\langle \vec{v} | \vec{w} \rangle$$

A partir de este este resultado, Dirac propuso que los vectores pertenecientes a V, sean denotados como

$$\vec{v} := |v\rangle$$

denominados *vectores Ket* y a las funcionales lineales definidas con el producto interno $f_{\vec{v}}(\bullet) = \langle \vec{v} | \bullet \rangle$

$$f_{\vec{v}} = \langle v |$$

vectores Bras. De esta manera, al combinar estos dos vectores tenemos el Bra-Ket (bracket: del inglés, paréntesis)

$$\langle v|w\rangle$$

que es un número complejo.

El Álgebra Lineal puede escribirse ahora en esta notación. Dado un espacio vectorial de dimensión n, V, tendrá una base

$$\mathcal{B} = \{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |n\rangle\}$$

que será equivalente a

$$\mathcal{B} = \{\mathbf{e_1}, \mathbf{e_2}, \dots, \mathbf{e_n}\}$$

Dado un vector *ket* $|v\rangle \in V$, podrá escribirse:

$$|v\rangle = \sum_{\ell=1}^{n} v^{\ell}|\ell\rangle$$

donde v^{ℓ} son las coordenadas en esa base. Si la base llegara a ser ortonormal para el producto interno, tendremos

$$\langle \ell'|v\rangle = \sum_{\ell=1}^{n} v^{\ell}\langle \ell'|\ell\rangle = \sum_{\ell=1}^{n} v^{\ell}\delta_{\ell'\ell} = v^{\ell'}$$

Entonces, podemos escribir al vector $|v\rangle$

$$|v\rangle = \sum_{\ell=1}^{n}\langle \ell|v\rangle\, |\ell\rangle$$

o, equivalentemente,

$$|v\rangle = \sum_{\ell=1}^{n}\, |\ell\rangle\langle \ell|v\rangle$$

Proyector. Notemos que podemos definir la proyección $P(m)$ a

$$P(m) = |m\rangle\langle m|,$$

ya que

$$P(m)|v\rangle = |m\rangle\langle m|v\rangle = v^{m}\, |m\rangle$$

es la proyección sobre el eje generado por el vector $|m\rangle$.

Además, notemos que

$$\sum_{m=1}^{n} P(m) = \sum_{m=1}^{n} |m\rangle\langle m|$$

es la identidad, ya que

$$\sum_{m=1}^{n} P(m)|v\rangle = \sum_{m=1}^{n} |m\rangle\langle m|v\rangle = \sum_{m=1}^{n}\langle m|v\rangle|m\rangle = v^m|m\rangle = |v\rangle$$

Entonces, tenemos

$$\sum_{\ell=1}^{n} |\ell\rangle\langle\ell| = \mathbb{I}_{n\times n}$$

esta relación se la denomina también, *relación de clausura.*

3. Operadores Lineales

Consideremos un operador

$$\hat{A} : V \to V.$$

La construcción de la matriz asociada se efectúa a partir de evaluar el operador en los elementos de la base y encolumnar las coordenadas. Con esto y dada la forma de obtener las coordenadas a partir del producto interno, podemos notar que

$$a^{\ell}_{\ell'} = \langle\ell|\hat{A}|\ell'\rangle$$

serán los elementos de matriz, siempre y cuando la base sea ortonormal.

3.1. Bases con índice continuo

Un aspecto nada frecuente en Álgebra Lineal o incluso en Análisis Funcional es contar con una base cuyos elementos

$$\mathcal{B} = \{|1\rangle, |2\rangle, \ldots, |n\rangle \ldots\}$$

tiene además de infinitos elementos, índice continuo. Esto es,

$$\mathcal{B} = \{\ |\mu\rangle\ \}$$

donde el subíndice μ no toma valores naturales, sino reales en un intervalo dado.

De alguna manera, este salto al continuo fue el que se planteó para la definición de la *Transformada de Fourier*. Es decir, se hizo, a partir de un determinado criterio,

$$\sum_{\ell} v^{\ell}\,|\ell\rangle \qquad \to \qquad \int_{-\infty}^{\infty} v^{\mu}|\mu\rangle d\mu$$

Análogamente, tendremos

$$v^{\mu} = \langle\mu|v\rangle$$

Con lo cual, se puede obtener

$$|v\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\mu\rangle\langle\mu|v\rangle\, d\mu$$

Más aún, la relación equivalente de clausura será:

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\mu\rangle\langle\mu|\, d\mu = \mathbb{I}$$

Es importante notar que la integral no es el producto interno, sino el paso al continuo de la sumatoria.

Ortogonormalidad. Análogamente a lo obtenido para el producto interno en la definición de la Transformada de Fourier:

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\,t(\omega-\omega')}\,dt = \delta(\omega-\omega')$$

vamos a definir la relación de ortonormalidad a través de la relación:

$$\langle\mu|\nu\rangle = \delta(\mu-\nu)$$

donde $\delta(\mu-\nu)$ es la Delta de Dirac.

4. Operadores Hermíticos

Un operador $\hat{A}$ se dice que es hermítico si es autoadjunto, esto es:

$$\langle\hat{A}v|w\rangle = \langle v|\hat{A}w\rangle$$

Por este motivo, la notación adoptada para este tipo de operadores es comun expresar su actuación

$$\langle v|\hat{A}|w\rangle$$

ya que al ser Hermítico, será indistinto a quien esté aplicado, si al bra $\langle v|$ o al ket, $|v\rangle$.

Hemos visto, además, que los operadores hermíticos tienen autovalores reales y que autovectores asociados a distintos autovalores son ortogonales.

Suponiendo que además los operadores son diagonalizables, tendremos base de autovectores. Cada operador Hermítico tendrá su base de operadores que,a su vez, será ortogonal.

Con estos rudimentos notacionales podemos establecer los postulados:

5. Postulados

5.1. Primer Postulado: Estado

El estado de un sistema cuántico es representado por un vector $|\psi(t)\rangle$ en un espacio de Hilbert.

5.2. Segundo Postulado: Observables

Este postulado reformula la idea de *cantidades observables.*

Las cantidades observables en Mecánica Clásica son expresiones de las coordenadas y los momentos. En particular, lo son también lo son éstas cantidades.

El segundo postulado establece:

Los observables cuánticos son operadores Hermíticos actuantes en el espacio de Hilbert. En particular, la posición x (para el caso unidimensional) será un operador $\hat{X}$ cuyos elementos de matriz serán:

$$\langle x|\hat{X}|x'\rangle = x\,\delta(x-x')$$

El momento lineal p (también en una dimensión) será un operador hermítico $\hat{P}$ cuyos elementos de matriz son, en la base $\{\ |x\rangle\ \}$ a saber:

$$\langle x|\hat{P}|x'\rangle = -i\,\hbar\,\delta'(x-x')$$

En general, las cantidades observables serán funciones de x y p, por lo que como operadores Hermíticos serán definidos a partir de: Si $\omega = (x,p)$ es una cantidad observable en Mecánica Clásica, el operador Hermítico asociado será $\hat{\Omega}$ el cual se obtiene

$$\hat{\Omega}(\hat{X},\hat{P}) = \omega\left(x \to \hat{X}, p \to \hat{P}\right)$$

Un ejemplo de esto es la Energía (Hamiltoniano) del Sistema,

$$H = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{\text{cinética}} + \underbrace{V(x)}_{potencial}$$

Esto define el operador *Hamiltoniano*

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + V(\hat{X})$$

5.3. Tercer Postulado: El Efecto de la Medición

Este postulado establece las características que tiene el proceso de medición de un observable. Es claro que lo que se espera al hacer una medición, es que lo medible sea un número real. Sin embargo, ahora las cantidades cuánticas son operadores Hermíticos, por lo que el efecto de una medición debe tener que ver con tal operador.

El tercer postulado establece:

Si el sistema se encuentra en un estado caracterízado por $|\psi(t)\rangle$ a medir una cierta cantidad observable (ω, con operador Hermítico asociado $\hat{\Omega}$) sólo se podrá medir un autovalor del operador, llamémoslo ω, con probabilidad

$$P(\omega) \propto |\langle\omega|\psi\rangle|^2$$

En este caso, $\langle\omega|$ es el bra asociado al autovector ket $|\omega\rangle$.

Al medir y obtener un autovalor, asociado al autovector $|\omega\rangle$ el estado del sistema cambiará de

$$|\psi(t)\rangle \qquad \to \qquad |\omega\rangle$$

como resultado de la medida.

5.4. Cuarto Postulado: Evolución Temporal

El cuarto postulado da la Ley de evolución temporal de los estados cuánticos de un sistema. El mismo establece

La evolución temporal de un estado cuántico obecede la Ecuación de Schrödinger,

$$i\,\hbar\,\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle.$$

6. Consecuencias de los postulados

En Mecánica Clasica, cuando conocemos las cantidades coordenadas y momentos, una cantidad derivada se obtiene a partir de una operación entre estas cantidades. Es lo que habíamos definido como observable clásico, ω.

En Mecánica Cuántica, si un sistema está en el estado $|\psi\rangle$ y queremos describir qué le ocurre a un determinado observable, debemos aplicar los primeros tres postulados en el siguiente esquema:

- Paso I. Construir el operador *observable* mediante lo establecido en el segundo postulado, (P II)

$$\hat{\Omega} = \omega(\hat{X}, \hat{P})$$

- Paso II. Hallar la base ortonormal de autovalores de $\hat{\Omega}$,

$$\mathcal{B} = \{\, |\omega_1\rangle, |\omega_2\rangle, \dots \}$$

  la cual puede ser de espectro discreto o continuo.

- Paso III. Expandir el estado en esa base:

$$|\psi\rangle = \sum_{\ell} |\omega_\ell\rangle\langle\omega_\ell|\psi\rangle$$

- Paso IV. La probabilidad de que el resultado de una medición sea ω, $P(\omega)$, será proporcional a $|\langle\omega|\psi\rangle|^2$. En términos de proyecciones, el operador proyector en la dirección $|\omega\rangle$ será

$$\mathbb{P}_\omega = |\omega\rangle\langle\omega|^2$$

  tendremos entonces

$$P(\omega) \propto |\omega\rangle\langle\omega|^2 = \langle\psi|\omega\rangle\langle\omega|\psi\rangle = \langle\psi|\mathbb{P}_\omega|\psi\rangle = \langle\psi|\mathbb{P}_\omega\mathbb{P}_\omega|\psi\rangle = \langle\mathbb{P}_\omega\psi|\mathbb{P}_\omega\psi\rangle$$

Ejemplo. Consideremos un espacio hipotético tridimensional. Consideremos un determinado operador hermítico, $\hat{\Omega}$ que tiene una base de autovectores ortonormales

$$\mathcal{B} = \{\, |\omega_1\rangle, |\omega_2\rangle, |\omega_3\rangle \,\}$$

Supongamos que en esta base, el estado del sistema tiene por representación

$$|\psi\rangle = \frac{1}{3}|\omega_1\rangle + \frac{1}{3}|\omega_2\rangle + \frac{\sqrt{7}}{3}|\omega_3\rangle$$

Entonces, la probabilidades de medir los autovalores del observable $\hat{\Omega}$, esto es, ω_1, ω_2 o ω_3 serán,

$$P(\omega_1) = \frac{1}{9}, \quad P(\omega_2) = \frac{1}{9}, \quad P(\omega_3) = \frac{7}{9}$$

Obviamente,

$$P(\omega_1) + P(\omega_2) + P(\omega_3) = 1$$

6.1. Valor de Expectación. Desviación Estandar.

Dado un operador $\hat{\Omega}$ se define el valor de expectación o esperanza

$$\langle\hat{\Omega}\rangle = \sum_\ell P(\omega_\ell)\,\omega_\ell = \sum_\ell \langle\psi|\omega_\ell\rangle\langle\omega_\ell|\psi\rangle\omega_\ell$$

ahora, como ω_ℓ es autovalor de $\hat{\Omega}$, tendremos

$$\langle\psi|\hat{\Omega}|\omega_\ell\rangle = \omega_\ell\langle\psi|\omega_\ell\rangle$$

Entonces,

$$\langle\hat{\Omega}\rangle = \sum_\ell \langle\psi|\omega_\ell\rangle\langle\omega_\ell|\psi\rangle\omega_\ell = \sum_\ell \omega_\ell\langle\psi|\omega_\ell\rangle\langle\omega_\ell|\psi\rangle = \sum_\ell \langle\psi|\hat{\Omega}|\omega_\ell\rangle\langle\omega_\ell|\psi\rangle$$

Además, como la identidad podemos escribirla como $\mathbb{I} = \sum_\ell |\omega\rangle\langle\omega|$, entonces,

$$\langle\hat{\Omega}\rangle = \sum_\ell \langle\psi|\hat{\Omega}|\omega_\ell\rangle\langle\omega_\ell|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{\Omega}|\mathbb{I}|\psi\rangle$$

Con lo que obtenemos

$$\langle\hat{\Omega}\rangle = \langle\psi|\hat{\Omega}|\psi\rangle$$

Obtenida la expresión del valor de expectación podemos resaltar:

- Para obtener $\langle\hat{\Omega}\rangle$ sólo es necesario el vector estado, $|\psi\rangle$, no son necesarios conocer los autovectores o autovalores de $\hat{\Omega}$.
- Si el sistema está en un autoestado -por ejemplo, el j-ésimo- $|\psi\rangle = |\omega_j\rangle$. Entonces, el valor de expectación será

$$\langle\hat{\Omega}\rangle = \langle\psi|\hat{\Omega}|\psi\rangle = \langle\omega_j|\hat{\Omega}|\omega_j\rangle = \omega_j$$

Desviación Estándar. Una vez definido el valor de expectación, definimos la *desviación estándar*, $\Delta\hat{\Omega}$, definida a través de la relación

$$[\Delta\hat{\Omega}]^2 = (\langle\hat{\Omega} - \langle\hat{\Omega}\rangle)^2$$

Desarrollemos el miembro de la derecha para poder calcular la desviación en términos de cantidades ya calculadas. Comencemos por

$$\begin{aligned}[\Delta\hat{\Omega}]^2 &= \langle(\hat{\Omega} - \langle\hat{\Omega}\rangle)^2 = \langle\Big[\hat{\Omega}^2 - 2\,\hat{\Omega}\,\langle\hat{\Omega}\rangle + (\langle\hat{\Omega}\rangle)^2\Big]\rangle \\ &= \langle\hat{\Omega}^2\rangle - 2\langle\hat{\Omega}\rangle\langle\hat{\Omega}\rangle + (\langle\hat{\Omega}\rangle)^2\end{aligned}$$

Además, cada término puede representarse:

$$\langle\hat{\Omega}^2\rangle = \langle\psi|\hat{\Omega}^2|\psi\rangle = \sum_\ell \langle\psi|\hat{\Omega}^2|\omega_\ell\rangle\langle\omega_\ell|\psi\rangle = \sum_\ell \omega_\ell^2 P(\omega_\ell)$$

$$\langle\hat{\Omega}\rangle = \sum_\ell \langle\psi|\hat{\Omega}|\omega_\ell\rangle\langle\omega_\ell|\psi\rangle = \sum_\ell \omega_\ell P(\omega_\ell)$$

y

$$(\langle\hat{\Omega}\rangle)^2 = \sum_\ell (\langle\hat{\Omega}\rangle)^2\langle\psi|\omega_\ell\rangle\langle\omega_\ell|\psi\rangle = \sum_\ell (\langle\hat{\Omega}\rangle)^2 P(\omega_\ell)$$

Entonces, se obtiene:

$$[\Delta\hat{\Omega}]^2 = \sum_\ell P(\omega_\ell)\left(\omega_\ell - \langle\hat{\Omega}\rangle\right)^2$$

7. Variables Compatibles e Incompatibles

Uno de los resultados más relevantes de la Mecánica Cuántica es el *Principio de Incertidumbre* el cual establece, que no se puede determinar la posición y el momento simultáneamente.

Partiendo de los postulados, este principio puede deducirse y tiene como origen un concepto más general respecto de los operadores, es decir, de los observables.

El tercer postulado establece que si medimos un determinado observable, por ejemplo el caracterizado por el operador $\hat{\Omega}$, el proceso de medición actúa como un filtro, ya que el resultado de la medición es -como medida- el autovalor ω_ℓ, dejando al sistema en el estado $|\omega_\ell\rangle$.

Ahora, si queremos hacer otra medición, por ejemplo asociada al operador $\hat{\Lambda}$, si el estado del sistema $|\omega_\ell\rangle$ la única posibilidad es que este autovector sea también autovector de $\hat{\Lambda}$, de manera de poder tener el resultado de la medición como lo establece el tercer postulado. Esto es,

$$\hat{\Lambda}|\omega_\ell\rangle = \lambda_j|\omega_\ell\rangle.$$

Para que esto ocurra, es necesario que ambos operadores tengan los mismos autovectores.

Vamos a definir *variables compatibles* a dos operadores que tengan un conjunto común de autovectores que además forman la base del espacio.

Si llamamos *conmutador* entre los operadores $\hat{\Omega}$ y $\hat{\Lambda}$ a la operación

$$[\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}] = \hat{\Omega}\hat{\Lambda} - \hat{\Lambda}\hat{\Omega}$$

Podemos afirmar que si admiten un mismo conjunto de autovectores, entonces

$$[\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}] = \hat{0}$$

Llamemos $|\omega\,\lambda\rangle$ a un autovector simultáneo de $\hat{\Omega}$ y $\hat{\Lambda}$ de manera tal que

$$\begin{aligned}\hat{\Omega}|\omega\lambda\rangle &= \omega|\omega\lambda\rangle \\ \hat{\Lambda}|\omega\lambda\rangle &= \lambda|\omega\lambda\rangle\end{aligned}$$

Entonces, aplicando $\hat{\Lambda}$ a la primera ecuación y $\hat{\Omega}$ a la segunda, tenemos ,

$$\begin{aligned}\hat{\Lambda}\hat{\Omega}|\omega\lambda\rangle &= \omega\lambda|\omega\lambda\rangle \\ \hat{\Omega}\hat{\Lambda}|\omega\lambda\rangle &= \lambda\omega|\omega\lambda\rangle\end{aligned}$$

restando,

$$\left(\hat{\Omega}\hat{\Lambda} - \hat{\Lambda}\hat{\Omega}\right)|\omega\lambda\rangle = [\hat{\Omega}, \hat{\Lambda}]|\omega\lambda\rangle = (\omega\lambda - \lambda\omega)|\omega\lambda\rangle = 0|\omega\lambda\rangle = |0\rangle$$

Claramente, esta última relación es necesaria, pero no suficiente.

Cuando dos operadores no conmutan, será llamados *incompatibles.* El ejemplo más relevante de incompatibilidad es el de los operadores posición y momento, ya que obeceden a la regla canónica de conmutación (la cual será demostrada más adelante).

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$$

Esta característica permite obtener la relación de incertidumbre

$$\Delta\hat{X}\Delta\hat{P} \geq \frac{\hbar}{2}$$

que demostraremos más adelante.

8. Representación en autovectores de $\hat{X}$

Si un determinado operador $\hat{\Omega}$ tiene un espectro de autovectores continuos, la representación de un determinado estado cuántico será, como se ha visto,

$$|\psi\rangle = \int |\omega\rangle\langle\omega|\psi\rangle\, d\omega$$

En este caso, el concepto de probabilidad se redefine como una *densidad de probabilidad.* En efecto, notemos que

$$\int P(\omega)\, d\omega = \int |\langle\psi|\omega\rangle|^2 d\omega = \int \langle\psi|\omega\rangle\langle\omega|\psi| d\omega = \langle\psi|\mathbb{I}|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle = 1$$

Para determinar las coordenadas en determinada base, es necesario multiplicar por $\langle\ell|$ elemento base del espacio (asumiendo ortonormalidad).

Para trabajar en la representación de la base de autovectores del operador $\hat{X}$ debemos tener en cuenta que el espectro será continuo, por lo que la combinación lineal será la integral.

Con esto, consideremos un estado $|\psi\rangle$. Si queremos obtener las coordenadas en la base $\{\,|x\rangle\,\}$ debemos hacer

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$$

Además, obtengamos:

$$\langle x|\hat{P}|\psi\rangle = \langle x|\hat{P}\mathbb{I}|\psi\rangle = \int \langle x|\hat{P}|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle dx'$$

Ahora, del segundo postulado

$$\langle x|\hat{P}|x'\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx'}\delta(x-x')$$

entonces, por las propiedades de la delta de Dirac, tenemos

$$\langle x|\hat{P}|\psi\rangle = -i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx}$$

O, la asociación

$$\hat{P} \to -i\hbar\frac{d}{dx}$$

Esta asociación sólo es válida para la representación x.

8.1. Regla Canónica de Conmutación

Hemos puesto como válido que

$$[\hat{X},\hat{P}] = i\hbar$$

Calculemos el operador a un estado cuántico, $|\psi\rangle$.

$$[\hat{X},\hat{P}]|\psi\rangle = \left(\hat{X}\hat{P} - \hat{P}\hat{X}\right)|\psi\rangle$$

Distribuyendo,

$$[\hat{X},\hat{P}]|\psi\rangle = \hat{X}\hat{P}|\psi\rangle - \hat{P}\hat{X}|\psi\rangle$$

Para representar en la base de autoestados de $\hat{X}$, que llamamos *representación* x debemos hacer

$$\langle x|[\hat{X},\hat{P}]|\psi\rangle = \langle x|\hat{X}\hat{P}|\psi\rangle - \langle x|\hat{P}\hat{X}|\psi\rangle$$

Calculemos primero

$$\langle x|\hat{X}\hat{P}|\psi\rangle = \langle x|\hat{X}\mathbb{I}\hat{P}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\langle x|\hat{X}|x'\rangle\langle x'|\hat{P}|\psi\rangle dx'$$

Pero, habíamos obtenido

$$\langle x|\hat{X}|x'\rangle = x'\,\delta(x-x'), \qquad \langle x'|\hat{P}|\psi\rangle = -i\hbar\frac{d\psi}{dx'}$$

Entonces, se obtiene

$$\langle x|\hat{X}\hat{P}|\psi\rangle = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty} x'\,\delta(x-x')\,\frac{d\psi}{dx'}dx'$$

Análogamente, podemos calcular

$$\langle x|\hat{P}\hat{X}|\psi\rangle = \langle x|\hat{P}\mathbb{I}\hat{X}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\langle x|\hat{P}|x'\rangle\langle x'|\hat{X}|\psi\rangle dx'$$

Calculemos $\langle x'|\hat{X}|\psi\rangle$

$$\langle x'|\hat{X}|\psi\rangle = \langle x'|\hat{X}\mathbb{I}|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\langle x'|\hat{X}|x''\rangle\langle x''|\psi\rangle dx'' = \int_{-\infty}^{\infty} x''\delta(x'-x'')\psi(x'')dx'' = x'\,\psi(x')$$

Entonces,

$$\langle x|\hat{P}\hat{X}|\psi\rangle = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-x')\,\frac{d}{dx'}\left[x'\,\psi(x')\right]dx'$$

es decir,

$$\langle x|\hat{P}\hat{X}|\psi\rangle = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-x')\,\left[\psi(x')\,+x'\frac{d\psi}{dx'}\right]dx'$$

Integrando tenemos,

$$\langle x|\hat{X}\hat{P}|\psi\rangle = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}x'\,\delta(x-x')\,\frac{d\psi}{dx'}dx' = -i\hbar x\,\frac{d\psi}{dx}$$

y

$$\langle x|\hat{P}\hat{X}|\psi\rangle = -i\hbar\int_{-\infty}^{\infty}\delta(x-x')\,\left[\psi(x')\,+x'\frac{d\psi}{dx'}\right]dx' = -i\hbar\left[\psi(x)+x\,\frac{d\psi}{dx}\right]$$

Restando ambas expresiones tenemos

$$\langle x|\hat{X}\hat{P}|\psi\rangle - \langle x|\hat{P}\hat{X}|\psi\rangle = \langle x|[\hat{X},\hat{P}]|\psi\rangle = -i\hbar x\,\frac{d\psi}{dx} - \left\{-i\hbar\left[\psi(x)+x\,\frac{d\psi}{dx}\right]\right\} = i\hbar\psi(x)$$

Entonces,

$$\langle x|[\hat{X},\hat{P}]|\psi\rangle = i\hbar\psi(x) = i\hbar\langle x|\psi\rangle = \langle x|i\hbar|\psi\rangle$$

Por identificación, obtenemos el operador conmutación

$$[\hat{X},\hat{P}] = i\,\hbar$$

8.2. Relaciones de Incertidumbre

Consideremos dos operadores $\hat{\Omega}$ y $\hat{\Lambda}$. Se ha definido la varianza

$$\Delta^2[\hat{\Omega}] = \left[\langle\Big(\hat{\Omega}-\langle\hat{\Omega}\rangle\Big)\rangle\right]^2$$

Que a su vez podíamos obtenerlo como

$$\Delta^2[\hat{\Omega}] = \langle\psi|(\hat{\Omega}-\langle\hat{\Omega}\rangle)^2|\psi\rangle$$

Si definimos el ket

$$|v\rangle = (\hat{\Omega}-\langle\hat{\Omega}\rangle)|\psi\rangle$$

Entonces

$$\Delta^2[\hat{\Omega}] == \langle v|v\rangle = ||v||^2$$

Análogamente,

$$\Delta^2[\hat{\Lambda}] == \langle u|u\rangle = ||u||^2$$

donde

$$|u\rangle = (\hat{\Lambda}-\langle\hat{\Lambda}\rangle)|\psi\rangle$$

Aplicando la *Desigualdad de Cauchy-Schwarz*,

$$\|v\|^2 \cdot \|u\|^2 \geq |\langle v|u\rangle|^2$$

Recordemos que $|\langle v|u\rangle|^2$ es el módulo del número complejo $\langle v|u\rangle$. Entonces, tendremos

$$\langle v|u\rangle = \mathrm{Re}[\langle v|u\rangle] + i\,\mathrm{Im}[\langle v|u\rangle]$$

con

$$\mathrm{Re}[\langle v|u\rangle] = \frac{\langle v|u\rangle + \langle v|u\rangle^*}{2} \qquad\qquad \mathrm{Im}[\langle v|u\rangle] = \frac{\langle v|u\rangle - \langle v|u\rangle^*}{2i}$$

Además, por los axiomas de producto interno, tenemos

$$\mathrm{Re}[\langle v|u\rangle] = \frac{\langle v|u\rangle + \langle u|v\rangle}{2} \qquad\qquad \mathrm{Im}[\langle v|u\rangle] = \frac{\langle v|u\rangle - \langle u|v\rangle}{2i}$$

Volviendo a la expresión de Cauchy-Schwarz,

$$\|v\|^2 \cdot \|u\|^2 \geq |\langle v|u\rangle|^2 \geq \{\mathrm{Re}[\langle v|u\rangle]\}^2 + \{\mathrm{Im}[\langle v|u\rangle]\}^2 \geq \{\mathrm{Im}[\langle v|u\rangle]\}^2$$

Calculemos entonces $\{\mathrm{Im}[\langle v|u\rangle]\}^2$

$$\{\mathrm{Im}[\langle v|u\rangle]\}^2 = \left[\frac{\langle v|u\rangle - \langle u|v\rangle}{2i}\right]^2$$

Por un lado, tenemos

$$\langle v|u\rangle = \langle\psi|(\hat{\Omega} - \langle\hat{\Omega}\rangle)|(\hat{\Lambda} - \langle\hat{\Lambda}\rangle)|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{\Omega}\hat{\Lambda}|\psi\rangle - \langle\psi|\hat{\Omega}\langle\hat{\Lambda}\rangle|\psi\rangle - \langle\psi|\langle\hat{\Omega}\rangle\hat{\Lambda}|\psi\rangle + \langle\psi|\langle\hat{\Omega}\rangle\langle\hat{\Lambda}\rangle|\psi\rangle$$

Operando, tenemos

$$\langle v|u\rangle = \langle\psi|\hat{\Omega}\hat{\Lambda}|\psi\rangle - \langle\hat{\Lambda}\rangle\langle\psi|\hat{\Omega}|\psi\rangle - \langle\hat{\Omega}\rangle\langle\psi|\hat{\Lambda}|\psi\rangle + \langle\hat{\Omega}\rangle\langle\hat{\Lambda}\rangle\langle\psi|\psi\rangle$$

Entonces,

$$\langle v|u\rangle = \langle\psi|\hat{\Omega}\hat{\Lambda}|\psi\rangle - \langle\hat{\Omega}\rangle\langle\hat{\Lambda}\rangle$$

Análogamente,

$$\langle u|v\rangle = \langle\psi|\hat{\Lambda}\hat{\Omega}|\psi\rangle - \langle\hat{\Omega}\rangle\langle\hat{\Lambda}\rangle$$

Entonces, la diferencia

$$\langle v|u\rangle - \langle u|v\rangle = \langle\psi|\hat{\Lambda}\hat{\Omega} - \hat{\Omega}\hat{\Lambda}|\psi\rangle$$

Luego,

$$\langle v|u\rangle - \langle u|v\rangle = \langle\psi|[\hat{\Lambda}, \hat{\Omega}]|\psi\rangle = \langle[\hat{\Lambda}, \hat{\Omega}]\rangle$$

Entonces, elevando al cuadrado

$$(\langle v|u\rangle - \langle u|v\rangle)^2 = \langle[\hat{\Lambda}, \hat{\Omega}]\rangle^2$$

Volviendo entonces a los operadores, se obtiene

$$\Delta^2[\hat{\Omega}]\Delta^2[\hat{\Lambda}] \geq \left(\frac{\langle[\hat{\Lambda}, \hat{\Omega}]\rangle}{2\,i}\right)^2$$

En particular, para los operadores $\hat{X}$ y $\hat{P}$ habíamos obtenido

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$$

con lo cual, sus varianzas

$$\Delta^2[\hat{X}]\Delta^2[\hat{P}] \geq \left(\frac{\langle[\hat{X}, \hat{P}]\rangle}{2\,i}\right)^2 = \left(\frac{\langle i\hbar\rangle}{2\,i}\right)^2 = \left(\frac{i\hbar}{2i}\right)^2$$

Entonces, aplicando raíz cuadrada a ambos miembros, obtenemos

$$\Delta[\hat{X}]\Delta[\hat{P}] \geq \frac{\hbar}{2}$$

Las relaciones de incertidumbre no son exclusivas para la posición y momento, sino que es una propiedad general para observables incompatibles.

9. Ecuación de Schrödinger en la representación x

La evolución temporal del estado cuántico obedece a la ecuación de Schrödinger,

$$i\,\hbar\,\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle.$$

Ahora, si consideramos el operador Hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 + V(\hat{X})$$

Tendremos que en la representación x la ecuación de Schrödinger será una ecuación diferencial

$$\left[\frac{1}{2m}\left(-i\hbar\frac{d}{dx}\right)^2 + V(x)\right]\psi(x,t) = i\hbar\,\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$$

o bien

$$-\frac{1}{2m}\hbar^2\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\,\psi(x,t) = i\hbar\,\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$$

10. Propagador Temporal

En la representación x, la ecuación de Schrödinger es la ecuación diferencial

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\,\psi(x,t) = i\hbar\,\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}$$

En lo que respecta a lo temporal, podemos considerar que si llamamos a $|\psi(t)\rangle$ al estado en el instante t, y a $|\psi(0)\rangle$ al estado en el instanto $t = 0$ la relación entre un estado y otro vendrá a través de un operador denominado *propagador temporal*, análogo al definido para sistemas de ecuaciones lineales. Esto es,

$$|\psi(t)\rangle = \mathbf{\Psi}(t,0)|\psi(0)\rangle$$

o, más generalmente,
$$|\psi(t)\rangle = \mathbf{\Psi}(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle$$
Ahora veamos cómo calculamos el propagador.

La Energía del sistema, E tendrá un operador asociado, el cual es el Hamiltomiano del sistema, $\hat{H}$. Con lo cual, en la base de estados de Energía, tendremos
$$\hat{H}|E\rangle = E|E\rangle$$
Esta ecuación se la denomina *ecuación de Schrodinger independiente del tiempo*. Ahora en la base de autoestados de energía, expandamos un estado cuántico, $|\psi(t)\rangle$
$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\ell} |E_\ell\rangle\langle E_\ell|\psi(t)\rangle$$
Esto es, las coordenadas de la representación serán
$$a_{E\ell}(t) = \langle E_\ell|\psi(t)\rangle$$
Nuevamente,
$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\ell} a_{E\ell}(t)|E_\ell\rangle$$
Entonces, tendremos:
$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = \hat{H}\left[\sum_{\ell} a_{E\ell}(t)|E_\ell\rangle\right] = \sum_{\ell} a_{E\ell}(t)\hat{H}|E_\ell\rangle$$
resultando
$$\hat{H}|\psi(t)\rangle = \sum_{\ell} a_{E\ell}(t)E_\ell|E_\ell\rangle$$
Entonces, la ecuación de Schrödinger se puede escribir:
$$i\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle - \hat{H}|\psi(t)\rangle = 0$$
reemplazando
$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\ell} a_{E\ell}(t)|E_\ell\rangle$$
Tenemos
$$\sum_{\ell}\left[i\hbar\frac{da_{E\ell}}{dt} - E_\ell a_{E\ell}\right]|E_\ell\rangle = 0$$
entonces, para las coordenadas obtenemos la ecuación diferencial:
$$i\hbar\frac{da_{E\ell}}{dt} - E_\ell a_{E\ell} = 0 \quad\rightarrow\quad \frac{da_{E\ell}(t)}{dt} = -\frac{i}{\hbar}E_\ell a_{E\ell}(t)$$
que es una ecuación de primer orden a variables separables.

Entonces, su solución temporal es
$$a_{E_\ell}(t) = e^{-i\frac{E_\ell}{\hbar}(t-t_0)}a_{E_\ell}(t_0)$$

Reemplazando, obtenemos:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\ell} e^{-i\frac{E_\ell}{\hbar}(t-t_0)} a_{E_\ell}(t_0)|E_\ell\rangle$$

Ahora, como

$$a_{E_\ell}(t) = \langle E_\ell|\psi(t)\rangle$$

tendremos

$$a_{E_\ell}(t_0) = \langle E_\ell|\psi(t_0)\rangle$$

Con lo cual,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\ell} e^{-i\frac{E_\ell}{\hbar}(t-t_0)}|E_\ell\rangle\langle E_\ell|\psi(t_0)\rangle$$

Lo que implica que el *propagador temporal* será

$$\mathbf{\Psi}(t,t_0) = \sum_{\ell} e^{-i\frac{E_\ell}{\hbar}(t-t_0)}|E_\ell\rangle\langle E_\ell|$$

de manera tal que

$$|\psi(t)\rangle = \mathbf{\Psi}(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

Dado que el propagador temporal está escrito como combinación de los autovectores del operador Hamiltoniano, $\hat{H}$ es que la forma más general de expresarlo será

$$\mathbf{\Psi}(t,t_0) = e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)}.$$

Con esto, podremos escribir:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)}|\psi(t_0)\rangle$$

Notemos que el *propagador temporal* es unitario.

$$[\mathbf{\Psi}(t,t_0)]^\dagger = e^{\frac{i\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)}$$

Entonces,

$$[\mathbf{\Psi}(t,t_0)]^\dagger \cdot [\mathbf{\Psi}(t,t_0)] = \mathbb{I}$$

Entonces,

$$\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t_0)|e^{\frac{i\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)}e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)}|\psi(t_0)\rangle\langle\psi(t_0)|\mathbb{I}|\psi(t_0)\rangle = \langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle$$

Ejemplo. Consideremos un electrón en interacción con un campo magnético orientado en el eje y. El Hamiltoniano para este sistema será:

$$\hat{H} = \omega\,\hat{S}_y = \frac{\omega\,\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}$$

Consideremos el problema de la evolución temporal del estado spin, cuya condición inicial es $|+\rangle$ (llamado *spin up*).

Entonces, llamando $t_0 = 0$, $|\psi(0)\rangle = |+\rangle$, tenemos

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}t}|\psi(0)\rangle = e^{-\frac{i\hat{H}}{\hbar}t}|+\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}t\omega\,\hbar\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}}|+\rangle =$$

Asociando

$$|+\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}, \qquad |-\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix}$$

calculando la exponencial tenemos

$$|\psi(t)\rangle = \begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\omega\,t}{2}\right) & -\operatorname{sen}\left(\frac{\omega\,t}{2}\right)\\ \operatorname{sen}\left(\frac{\omega\,t}{2}\right) & \cos\left(\frac{\omega\,t}{2}\right)\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\omega\,t}{2}\right)\\ \operatorname{sen}\left(\frac{\omega\,t}{2}\right)\end{pmatrix}$$

Entonces,

$$|\psi(t)\rangle = \cos\left(\frac{\omega\,t}{2}\right)|+\rangle + \operatorname{sen}\left(\frac{\omega\,t}{2}\right)|-\rangle$$

Entonces, la probabilidad de hallar al sistema en spin up o down será

$$P(+) = \cos^2\left(\frac{\omega\,t}{2}\right), \qquad P(-) = \operatorname{sen}^2\left(\frac{\omega\,t}{2}\right)$$

El estado de spin es binario, por lo que no hay otra alternativa que al exponenciar el Hamiltoniano obtengamos la evoluvión temporal del estado de spin en el tiempo, ya que las condiciones iniciales están bien determinadas. En este caso, $|+\rangle$.

10.1. Propagador Temporal y Separación de Variables

Si expresamos el estado autoestados de energía,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\ell}|E_\ell\rangle\langle E_\ell|\psi(t)\rangle$$

donde habíamos llamado

$$a_{E\ell}(t) = \langle E_\ell|\psi(t)\rangle$$

Entonces,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{\ell} a_{E\ell}(t)|E_\ell\rangle$$

Si queremos representar el la base $|x\rangle$, las coordenadas serán,

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \sum_{\ell} a_{E\ell}(t)\langle x|E_\ell\rangle$$

Además, llamando

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \psi(x,t), \qquad \text{y} \qquad \langle x|E_\ell\rangle = \psi_{1\ell}(x)$$

tendremos

$$\psi(x,t) = \sum_{\ell} a_{E\ell}(t)\, \psi_{1\ell}(x)$$

Además, en esta representación, la ecuación de Schrödinger se escribe

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t)$$

Además, tenemos,

$$i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = \sum_{\ell} i\hbar \frac{da_{E\ell}(t)}{dt}\, \psi_{1\ell}(x)$$

y

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x,t) = \sum_{\ell} a_{E\ell}(t) \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\right)\frac{d^2\psi_{1\ell}(x)}{dx^2} + V(x)\psi_{1\ell}(x)\right]$$

Con lo cual, para cada ℓ, tendremos

$$i\hbar \frac{da_{E\ell}(t)}{dt}\, \psi_{1\ell}(x) = a_{E\ell}(t) \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{1\ell}(x)}{dx^2} + V(x)\psi_{1\ell}(x)\right]$$

O, equivalentemente,

$$i\hbar \frac{1}{a_{E\ell}(t)}\frac{da_{E\ell}(t)}{dt} = \frac{1}{\psi_{1\ell}(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{1\ell}(x)}{dx^2} + V(x)\psi_{1\ell}(x)\right]$$

que no es otra cosa que el método de *separación de variables*, aplicado a varias ecuaciones diferenciales parciales. Si llamamos E_ℓ a la constante de separación, tendremos:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{1}{a_{E\ell}(t)}\frac{da_{E\ell}(t)}{dt} &= E_\ell \\ \frac{1}{\psi_{1\ell}(x)} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{1\ell}(x)}{dx^2} + V(x)\psi_{1\ell}(x)\right] &= E_\ell \end{aligned}$$

Lo que significa que la parte temporal de la *función de onda* $\psi(x,t)$ satisface

$$i\hbar \frac{1}{a_{E\ell}(t)}\frac{da_{E\ell}(t)}{dt} = E_\ell$$

Cuya solución ya la habíamos obtenido

$$a_{E\ell}(t) = a_{E\ell}(t_0) e^{-\frac{i E_\ell}{\hbar}(t-t_0)}$$

y la parte espacial satisface la ecuación independiente del tiempo,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_{1\ell}(x)}{dx^2} + V(x)\psi_{1\ell}(x) = E_\ell\, \psi_{1\ell}(x)$$

Esta última ecuación es una ecuación de autovalores para el operador

$$L = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

que es un operador de Sturm-Liouville, con funciones

$$p(x) = \frac{\hbar^2}{2m}, \qquad q(x) = V(x)$$

11. Momento Angular

11.1. El momento lineal en $\mathbb{R}^3$

Hasta ahora se ha visto problemas unidimensionales, en los cuales el operador momento (lineal) en la representación de coordenada $\{\,|x\rangle\,\}$ es

$$\hat{P} \equiv -i\hbar\,\frac{d}{dx}$$

La extensión al espacio $\mathbb{R}^3$ será

$$\hat{P}_x \equiv -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial x}, \qquad \hat{P}_y \equiv -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial y}, \qquad \hat{P}_z \equiv -i\hbar\,\frac{\partial}{\partial z}$$

o, en términos "vectoriales" en la representación posición,

$$\hat{\vec{P}} \equiv -i\hbar\,\nabla$$

Las relaciones de conmutación, análogas a la obtenida para el caso unidimensional,

$$[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$$

serán

$$[\hat{X}, \hat{P}_x] = [\hat{Y}, \hat{P}_y] = [\hat{Z}, \hat{P}_z] = i\hbar$$

y las demás combinaciones serán nulas.

11.2. El Momento Angular

El momento angular clásico tiene como defición

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$$

En los términos que se vienen definiendo los operadores, el momento angular tendrá sus componentes:

$$\begin{aligned}
\hat{L}_x &= \hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y \\
\hat{L}_y &= \hat{Z}\hat{P}_x - \hat{X}\hat{P}_z \\
\hat{L}_z &= \hat{X}\hat{P}_y - \hat{Y}\hat{P}_x
\end{aligned}$$

Calculemos

$$[\hat{L}_x, \hat{X}], \qquad [\hat{L}_x, \hat{Y}], \qquad [\hat{L}_x, \hat{Z}]$$

Para efectuar estas operaciones, es útil recordar el resultado que satisface el corchete de Poisson (para la Mecánica Clásica)

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$$

En el caso clásico se lo denomina *regla de Leinibz* ya que es la derivada de Lie, asociada al corchete.

En el caso del conmutador cuántico la regla sigue siendo válida, veamos:

$$
\begin{aligned}
[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} \\
[\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} &= \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{A}\hat{C} \\
\hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] &= \hat{B}\hat{A}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A}
\end{aligned}
$$

Entonces, restando la segunda y tercera ecuación a la primera obtenemos

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] - [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} - \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] = \hat{0}$$

Entonces,

$$[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$$

$$[\hat{L}_x, \hat{X}] = [\hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y, \hat{X}] = [\hat{Y}\hat{P}_z, \hat{X}] - [\hat{Z}\hat{P}_y, \hat{X}]$$

entonces, calculando cada término, tenemos

$$[\hat{Y}\hat{P}_z, \hat{X}] = -[\hat{X}, \hat{Y}\hat{P}_z] = -\left\{[\hat{X}, \hat{Y}]\,\hat{P}_z + \hat{Y}\,[\hat{X}, \hat{P}_z]\right\}$$

por las reglas de conmutación, tendremos

$$[\hat{Y}\hat{P}_z, \hat{X}] = \hat{0}$$

Análogamente,

$$[\hat{Z}\hat{P}_y, \hat{X}] = \hat{0}$$

Entonces,

$$[\hat{L}_x, \hat{X}] = \hat{0}$$

El cómputo de los demás conmutadores es análogo, se obtiene:

$$[\hat{L}_x, \hat{Y}] = i\hbar\hat{Z}, \qquad [\hat{L}_x, \hat{Z}] = -i\hbar\hat{Y}$$

Entonces,

$$[\hat{L}_x, \hat{X}] = \hat{0}, \qquad [\hat{L}_x, \hat{Y}] = i\hbar\hat{Z}, \qquad [\hat{L}_x, \hat{Z}] = -i\hbar\hat{Y}$$

Además, se obtiene,

$$[\hat{L}_x, \hat{P}_x] = \hat{0}, \qquad [\hat{L}_x, \hat{P}_y] = i\hbar\hat{P}_z, \qquad [\hat{L}_x, \hat{P}_z] = -i\hbar\hat{P}_y$$

calculemos $[\hat{L}_x, \hat{P}_y]$

$$[\hat{L}_x, \hat{P}_y] = [\hat{Y}\hat{P}_z - \hat{Z}\hat{P}_y, \hat{P}_y] = [\hat{Y}\hat{P}_z, \hat{P}_y] - [\hat{Z}\hat{P}_y, \hat{P}_y]$$

utilizando la regla de Leibniz,

$$[\hat{Y}\hat{P}_z, \hat{P}_y] = -[\hat{P}_y, \hat{Y}\hat{P}_z] = -\left\{[\hat{P}_y, \hat{Y}]\hat{P}_z + \hat{Y}\,[\hat{P}_y, \hat{P}_z]\right\} = -\left\{-[\hat{Y}, \hat{P}_y]\hat{P}_z + \hat{Y}\,[\hat{P}_y, \hat{P}_z]\right\} = i\hbar\hat{P}_x$$

a partir de cálculo directo, obtenemos

$$[\hat{Z}\hat{P}_y, \hat{P}_y] = 0$$

Entonces, comprobamos que $[\hat{L}_x, \hat{P}_y] = i\hbar\hat{P}_z$. De las misma manera se obtienen las demás relaciones de conmutación.

Otras relaciones de conmutación importantes son las siguientes

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z, \qquad [\hat{L}_y, \hat{L}_z] = i\hbar\hat{L}_x, \qquad [\hat{L}_z, \hat{L}_x] = i\hbar\hat{L}_y$$

Otra relación de conmutación importante es la que cumple el operador *norma cuadrado* del momento angular, $\|L\|^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$

En la asociación con operadores, tendremos

$$\hat{L^2} = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = \hat{L}_x\hat{L}_x + \hat{L}_y\hat{L}_y + \hat{L}_z\hat{L}_z$$

De las últimas relaciones de conmutación y aplicando propiedades elementales, se obtiene

$$[\hat{L^2}, \hat{L}_x] = [\hat{L^2}, \hat{L}_y] = [\hat{L^2}, \hat{L}_z] = \hat{0}$$

Quiere decir que es posible obtener una base de autovectores comunes de $\hat{L^2}$ y $\hat{L}_x$ o $\hat{L}_y$, o $\hat{L}_z$. Sin embargo, como entre las componentes del momento angular no conmutan, éstas compomentes serán magnitudes incompatibles.

Es muy común en Mecánica Cuántica trabajar con autoestados comunes de

$$\hat{L^2}, \qquad \text{y} \qquad \hat{L}_z$$

Comúnmente, la base de autoestados de $\hat{L^2}$ se la denota como $|\ell\rangle$ y la correspondiente a $\hat{L}_z$, $|m\rangle$, con lo que para simbolizar la base comun, usamos la notación

$$\mathcal{B} = \{\, |\ell\, m\rangle \,\}$$

Esto es,

$$\hat{L^2}|\ell\, m\rangle = \lambda_\ell|\ell\, m\rangle, \qquad \hat{L}_z|\ell\, m\rangle = \lambda_m|\ell\, m\rangle$$

12. Bibliografía Recomendada

- Cohen-Tannoudji C., Diu B., Laloe F. *Quantum Mechanics*, vol. 1, Ed. John Wiley Sons Inc. , 1991
- Merzbacher, E.: *Quantum Mechanics*, Ed. John Wiley Sons Inc. , 1961
- Shankar, R. *Principles of Quantum Mechanics*, Ed. Kluwer Academic, 2011