

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas

Simetrías del operador hamiltoniano y operadores conservados

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

Licenciado en Física

por

José Emmanuel Herrera Flores

asesorado por

Dr. Gerardo F. Torres del Castillo

Puebla Pue.
Enero 2016

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas

Simetrías del operador hamiltoniano y operadores conservados

Tesis presentada al

Colegio de Física

como requisito parcial para la obtención del grado de

Licenciado en Física

por

José Emmanuel Herrera Flores

asesorado por

Dr. Gerardo F. Torres del Castillo

Puebla Pue.
Enero 2016

Título: Simetrías del operador hamiltoniano y operadores conservados
Estudiante: JOSÉ EMMANUEL HERRERA FLORES

COMITÉ

Dra. Mercedes P. Velázquez Quesada
Presidente

Dr. Gilberto Silva Ortigoza
Secretario

Dr. Cupatitzio Ramírez Romero
Vocal

Dr. Roberto Cartas Fuentes
Vocal

Dr. Gerardo F. Torres del Castillo
Asesor

Índice general

Agradecimientos	v
Resumen	vii
Introducción	ix
1. Simetrías en la mecánica clásica hamiltoniana y en la mecánica cuántica	1
1.1. Mecánica clásica hamiltoniana	1
1.1.1. Paréntesis de Poisson	2
1.1.2. Transformaciones canónicas	3
1.1.3. Simetrías en la mecánica clásica hamiltoniana	5
1.2. Mecánica cuántica	7
1.2.1. Operadores	7
1.2.2. Operador de evolución y ecuación de Schrödinger	10
1.2.3. Imagen de Schrödinger e imagen de Heisenberg	12
1.2.4. Simetrías en la mecánica cuántica	13
2. Simetrías del hamiltoniano y operadores conservados	17
2.1. Ejemplos	18
2.1.1. Transformaciones de Galileo	19
2.1.2. Transformaciones de simetría generadas por una constante de movimiento determinada	19
2.1.3. Un sistema tridimensional	21
2.1.4. Invariancia de un operador hamiltoniano	23
3. Conclusiones	25
A. Apéndice A	27
B. Apéndice B	29

Agradecimientos

A mi familia, por su inmenso apoyo, porque, aunque muchas veces estuve ausente, ellos siempre estuvieron allí incondicionalmente. Por confiar en mí y en todo lo que hago, a pesar de que en algunas ocasiones no tome la decisión correcta. Por sus consejos y regaños, los cuales valoro bastante, ya que gracias a ellos he crecido.

A mis amigos. En especial a Angel, Berenice, Jorge y Juan, por su madurez que ha dejado huella en mi persona. Porque con sus anécdotas, comentarios, consejos y demás han hecho más liviano el camino.

A todos los profesores con los que conviví a lo largo de la carrera. Principalmente le agradezco al Dr. Gerardo Torres del Castillo que, además de haberme aceptado en este proyecto, ha sido una persona fundamental en mi formación, que me ha motivado día a día con su pasión hacia la ciencia y dedicación que va más allá de lo profesional.

A la VIEP por el apoyo económico a través del proyecto *Aplicaciones de las transformaciones canónicas*.

Un agradecimiento especial a los miembros del jurado, que con sus observaciones y comentarios ayudaron a mejorar este trabajo.

Finalmente a ti, Lilia, por tu grata compañía, por tus consejos sensatos, por alentarme, por tus atenciones y regaños. Por esa sonrisa que me alegra el día. Sabes que siempre me harán falta palabras para decirte lo mucho que estoy agradecido. Risa y misa cuando estoy contigo. . .

Resumen

Se estudia la invariancia del operador hamiltoniano bajo una transformación unitaria que puede depender del tiempo. Se da una definición general que contenga estos casos. Además, se muestran también dos resultados importantes en el marco de la mecánica cuántica, los cuales relacionan simetrías con cantidades conservadas, análogos a los existentes en la mecánica clásica.

Introducción

A finales del siglo XVII Isaac Newton publicó su obra *Principia Mathematica* la cual marcó un cambio no solo para la mecánica clásica sino para la ciencia en general; en esta obra Newton recopiló sus conocimientos sobre mecánica y cálculo. Sin embargo al paso de los años la mecánica clásica ha sido abordada a través de distintas formulaciones (con el mismo contenido físico) que simplifican la solución de muchos problemas físicos; entre estas formulaciones se encuentran la lagrangiana y la hamiltoniana introducidas por *Joseph Louis Lagrange* en 1788 y *William R. Hamilton* en 1833, respectivamente.

Por una parte, la mecánica lagrangiana es más fundamental, ya que se basa en principios variacionales y es la que se adapta de forma más directa al contexto de la relatividad general. Por otra parte, la mecánica hamiltoniana se basa directamente con el concepto de energía y es la que está más estrechamente ligada con la mecánica cuántica.

Al igual como ocurre con la mecánica clásica, la mecánica cuántica también se puede abordar de dos formas fundamentales equivalentes entre sí, a través de la formulación ondulatoria de Schrödinger y a través de la formulación matricial de Heisenberg. La primera, auxiliándose principalmente de la *ecuación de Schrödinger*, describe el movimiento en el espacio de la onda de probabilidad asociada a una partícula (por ejemplo un electrón). Mientras que la mecánica matricial, desarrollada por *Werner Heisenberg*, interpreta determinadas propiedades de las partículas (por ejemplo el espín) en términos de matrices.

Saber qué formalismo emplear depende de cada problema físico con el que se esté trabajando; sin embargo, aún con la elección del formalismo apropiado en ciertas ocasiones resulta complicado o laborioso resolver estos problemas mediante los métodos tradicionales, por ello se recurre a ciertas alternativas para hacerlo (ver por ejemplo, Ref. [8]). Una de estas alternativas es a través del uso de simetrías.

Cuando un sistema físico permanece inalterado bajo una transformación en una o más de sus coordenadas se dice que existe una simetría. Estas transformaciones pueden ser una variedad de operaciones en las coordenadas, por ejemplo traslaciones o rotaciones. Sin embargo, éstas pueden ser algo abstracto que no tenga relación directa con un cambio geométrico.

El estudio de las simetrías juega un papel importante en la física, desde básicas formulaciones de principios fundamentales hasta aplicaciones concretas. En la mecánica clásica hamiltoniana, un grupo de transformaciones canónicas de la función hamiltoniana está asociado con una cantidad conservada. En el caso de la mecánica cuántica el estudio de las simetrías continuas que se halla usualmente se limita a un conjunto pequeño de ellas, como lo son las rotaciones y traslaciones (espaciales y temporales), dejando a un lado las transformaciones que involucran al tiempo (como el caso de las transformaciones de Galileo¹).

En este trabajo se tratará de establecer una relación entre simetrías del operador hamiltoniano y cualquier tipo de transformaciones (que involucren al tiempo o no), y por supuesto esto requiere de una definición de simetría para un operador hamiltoniano cualquiera que se simplifique para el caso en el que la constante de movimiento no dependa explícitamente del tiempo.

El primer capítulo se divide en dos secciones principales. En la primera se establecen todos los fundamentos de la mecánica hamiltoniana para entender de manera completa un resultado importante: *Si H es invariante bajo una familia uniparamétrica de transformaciones canónicas entonces el generador de dicha familia se conserva.* Mientras que la segunda sección está enfocada en entender las bases de la mecánica cuántica que conducen al estudio de las simetrías, con la restricción de que el generador de dichas simetrías no dependa del tiempo. Por supuesto, este caso no es el más general ya que existen simetrías que dependen del tiempo que son interesantes; así, en el segundo capítulo se presenta una definición general

¹Cabe mencionar que en las Refs. [2,5,10] se trata también el caso de las transformaciones de Galileo.

sobre la simetría en el operador hamiltoniano y operadores conservados. Además, al final de este capítulo se muestran algunos ejemplos que involucran constantes de movimiento dependientes del tiempo.

Capítulo 1

Simetrías en la mecánica clásica hamiltoniana y en la mecánica cuántica

Dentro de los formalismos más importantes en la mecánica clásica se encuentran el formalismo de Lagrange y de Hamilton. El formalismo de Lagrange se basa en resolver n^1 ecuaciones de segundo orden (*ecuaciones de Lagrange*) para obtener las ecuaciones de movimiento; mientras que el formalismo de Hamilton consiste en resolver $2n$ ecuaciones de primer orden, lo que parece contraproducente. No obstante, existen ventajas al trabajar con el enfoque hamiltoniano; por ejemplo, el conjunto de transformaciones que dejan invariantes las ecuaciones de Hamilton es más amplio que el que existe en la mecánica lagrangiana. Otra característica importante es que, en gran parte, el formalismo en la mecánica hamiltoniana es bastante parecido al de la mecánica cuántica lo cual es una ventaja para el estudio de esta última.

1.1. Mecánica clásica hamiltoniana

Históricamente, la formulación lagrangiana se creó antes de la hamiltoniana. Ambas formulaciones tienen un parecido en común, este es, a partir de una función real se puede obtener las ecuaciones de movimiento. Más aún el enfoque hamiltoniano es posible desarrollarlo a partir del lagrangiano como un cambio de las variables q_i, \dot{q}_i y t a las variables q_i, p_i y t . En efecto, en la mecánica lagrangiana un sistema con n grados de libertad puede ser descrito a través de las n ecuaciones de movimiento:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad i = 1, \dots, n. \quad (1.1)$$

conocidas como *ecuaciones de Euler-Lagrange*, donde $L(q_i, \dot{q}_i, t)^2$ es la función lagrangiana.

Por otro lado, las variables p_i se conocen como *momentos generalizados* conjugados a \dot{q}_i y se definen como:

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad i = 1, \dots, n. \quad (1.2)$$

Ahora, definimos la función H , conocida como *función hamiltoniana* o simplemente como *hamiltoniana*, de la siguiente manera:

$$H(q_i, p_i, t) \equiv \sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i - L = p_i \dot{q}_i - L, \quad (1.3)$$

¹Donde n es el número de grados de libertad del sistema físico.

² $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ es la forma corta de denotar $L(q_1, q_2, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_n, t)$.

**CAPÍTULO 1. SIMETRÍAS EN LA MECÁNICA CLÁSICA HAMILTONIANA Y EN
LA MECÁNICA CUÁNTICA**

1.1. MECÁNICA CLÁSICA HAMILTONIANA

en la segunda igualdad de la ecuación anterior hemos empleado la convención de suma para índices repetidos, la cual emplearemos de ahora en adelante.

Puesto que $H = H(q_i, p_i, t)$, su diferencial es:

$$dH = \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt \quad (1.4)$$

pero de las ecuaciones (1.1), (1.2) y de la definición (1.3) tenemos que:

$$dH = \dot{q}_i dp_i - \dot{p}_i dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (1.5)$$

comparando las ecuaciones (1.4) y (1.5) tenemos que:

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i, \quad (1.6a)$$

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{p}_i, \quad (1.6b)$$

$$\frac{\partial H}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}, \quad (1.7)$$

para $i = 1, \dots, n$. A las $2n$ ecuaciones de primer orden (1.6) se les conoce como *ecuaciones de Hamilton*.

1.1.1. Paréntesis de Poisson

Hallemos la derivada total con respecto al tiempo de una función³, f , que depende de las variables q_i , p_i y t :

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt} &= \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i \\ &= \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \end{aligned} \quad (1.8)$$

La estructura matemática de los últimos dos términos de la ecuación anterior ocurren frecuentemente en la mecánica hamiltoniana, por ello definimos el *paréntesis de Poisson* de dos funciones, f y g , de la siguiente manera:

$$\{f, g\} \equiv \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i}. \quad (1.9)$$

Dada la definición de los paréntesis de Poisson se pueden demostrar fácilmente las siguientes propiedades:

$$\{f, g\} = -\{g, f\} \quad (1.10a)$$

$$\{f, g + h\} = \{f, g\} + \{f, h\} \quad (1.10b)$$

$$\{f, gh\} = \{f, g\}h + g\{f, h\} \quad (1.10c)$$

$$\{f, c\} = 0, \quad \forall c \in \mathbb{R}. \quad (1.10d)$$

$$\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0 \quad (1.10e)$$

³De ahora en adelante todas las funciones que se empleen en la sección 1.1 serán función de las variables q_i , p_i y t , a menos que se especifique lo contrario.

a esta última propiedad se le conoce como *identidad de Jacobi*.

Además, los parentesis de Poisson fundamentales son:

$$\{q_i, q_j\} = 0, \quad \{p_i, p_j\} = 0, \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij}$$

donde, δ_{ij} es la *delta de Kronecker*. Estos párentesis fundamentales junto con las propiedades (1.10) pueden ser empleados para calcular los párentesis de Poisson sin tener que recurrir a la definición (1.9).

Una vez definido el paréntesis de Poisson podemos escribir la ecuación (1.8) como:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\}, \quad (1.11)$$

así, f es una *constante de movimiento o cantidad conservada* si:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\} = 0, \quad (1.12)$$

en particular si H no depende explícitamente del tiempo entonces será una constante de movimiento.

1.1.2. Transformaciones canónicas

El lenguaje matemático que se emplea en la física nos ayuda a describir de una manera accesible los fenómenos que ocurren en la naturaleza. Por ello, la elección de las coordenadas es independiente del sistema físico, siempre y cuando éstas lo describan en su totalidad. En la mecánica lagrangiana las transformaciones del tipo $Q_i = Q_i(q_j, t)$ (*transformaciones puntuales*) generan otro conjunto de coordenadas generalizadas; de hecho, estas transformaciones mantienen la forma de las ecuaciones de Lagrange mediante la relación $L'(Q_i, \dot{Q}_i, t) = L(q_i, \dot{q}_i, t)$. De la misma manera como ocurre en la mecánica lagrangiana, en la mecánica hamiltoniana nos interesan cambios en el sistema de coordenadas que dejen invariante las ecuaciones de movimiento.

Consideremos un sistema descrito por la hamiltoniana $H(q_i, p_i, t)$, deseamos encontrar transformaciones,

$$Q_i = Q_i(q_j, p_j, t) \text{ y } P_i = P_i(q_j, p_j, t) \quad (1.13)$$

que mantengan la forma de las ecuaciones (1.6). El conjunto que contiene este tipo de transformaciones es mucho más extenso que el que contiene a las transformaciones puntuales, pues además de involucrar a las posiciones y al tiempo también se toman en cuenta los momentos. Como ya se mencionó la restricción principal que le ponemos a las transformaciones dadas por (1.13) es que dejen invariantes a las ecuaciones de Hamilton, es decir:

$$\frac{\partial K}{\partial P_i} = \dot{Q}_i, \quad (1.14a)$$

$$\frac{\partial K}{\partial Q_i} = -\dot{P}_i, \quad (1.14b)$$

donde K es alguna función de Q_i , P_i y t que, en principio, no esperamos que se relacione con H de la manera en que lo hacían L' y L .

La condición impuesta por las ecuaciones (1.14) se satisface si existe una función F tal que:

$$p_i dq_i - P_i dQ_i + (K - H) dt = dF, \quad (1.15)$$

donde F es conocida como *función generatriz*.

A las transformaciones que cumplen con la ecuación (1.15) se les conoce como *transformaciones canónicas*. Además, si la transformación dada cumple con (1.15) entonces:

$$\{Q_i, Q_j\} = 0 \quad (1.16a)$$

$$\{P_i, P_j\} = 0 \quad (1.16b)$$

**CAPÍTULO 1. SIMETRÍAS EN LA MECÁNICA CLÁSICA HAMILTONIANA Y EN
LA MECÁNICA CUÁNTICA**

1.1. MECÁNICA CLÁSICA HAMILTONIANA

$$\{Q_i, P_j\} = \delta_{ij} \quad (1.16c)$$

Las transformaciones canónicas no son las transformaciones más generales que dejan invariante a las ecuaciones de movimiento (ver Ref. [7]); sin embargo, una buena razón para considerar solo este tipo de transformaciones es debido a que el paréntesis de Poisson es invariante bajo estas transformaciones, es decir:

$$\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} = \frac{\partial f}{\partial Q_i} \frac{\partial g}{\partial P_i} - \frac{\partial f}{\partial P_i} \frac{\partial g}{\partial Q_i}. \quad (1.17)$$

En general, la función F depende de $2n + 1$ variables, esta función genera las transformaciones dadas por (1.13), pero para que esto suceda es necesario expresarla como una combinación de n variables *viejas*, n variables *nuevas* y de t . Las funciones generatrices más comunes son $F_1(q_i, Q_i, t)$, $F_2(q_i, P_i, t)$, $F_3(p_i, Q_i, t)$ y $F_4(p_i, P_i, t)$; aunque, la elección de las variables es arbitraria, siempre y cuando éstas sean funcionalmente independientes.

A su vez, si conocemos la función F se pueden obtener las transformaciones que genera a partir de (1.15). En efecto, supongamos que F es función de q_i , Q_i y t ($F \equiv F_1$), así su diferencial está dada por:

$$dF_1 = \frac{\partial F_1}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} dQ_i + \frac{\partial F_1}{\partial t} dt, \quad (1.18)$$

entonces de (1.15) y (1.18) tenemos que:

$$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i}, \quad (1.19a)$$

$$P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i}, \quad (1.19b)$$

$$K - H = \frac{\partial F_1}{\partial t}. \quad (1.20)$$

Si F depende de otras variables las ecuaciones (1.19) cambiarán⁴, pero la ecuación (1.20) se mantendrá sin importar cuáles sean las variables de las que dependa F , es decir:

$$K - H = \frac{\partial F}{\partial t}, \quad (1.21)$$

esta ecuación es importante ya que de aquí podemos hallar K .

Familias uniparamétricas de transformaciones canónicas

Las transformaciones canónicas que consideramos anteriormente son pasivas, ya que no afectan a los cuerpos que conforman el sistema sino solo a su descripción. No obstante, se pueden considerar transformaciones canónicas activas, es decir, que afecten a los cuerpos del espacio (por ejemplo, traslaciones espaciales).

Consideremos familias uniparamétricas de transformaciones canónicas, es decir, transformaciones canónicas de la forma:

$$Q_i = Q_i(q_j, p_j, t, s) \text{ y } P_i = P_i(q_j, p_j, t, s) \quad (1.22)$$

donde s es un parámetro real contenido en alguna vecindad abierta del cero. Además imponemos que en $s = 0$ se cumpla que:

$$Q_i(q_j, p_j, t, 0) = q_i \quad (1.23a)$$

$$P_i(q_j, p_j, t, 0) = p_i \quad (1.23b)$$

⁴Las ecuaciones análogas pueden hallarse mediante el uso de transformadas de Legendre en (1.15) y siguiendo un proceso similar al que se empleó para hallar (1.19a) y (1.19b)

**CAPÍTULO 1. SIMETRÍAS EN LA MECÁNICA CLÁSICA HAMILTONIANA Y EN
LA MECÁNICA CUÁNTICA**
1.1. MECÁNICA CLÁSICA HAMILTONIANA

es decir, que se reduzcan a la transformación identidad.

Puesto que las transformaciones dadas por (1.22) son canónicas se cumple (1.15), derivando esta ecuación con respecto a s y evaluando en $s = 0$,

$$-\left. \frac{\partial P_i}{\partial s} \right|_{s=0} dq_i - p_i d\left(\left. \frac{\partial Q_i}{\partial s} \right|_{s=0} \right) + \left. \frac{\partial K}{\partial s} \right|_{s=0} dt = d\left(\left. \frac{\partial F_1}{\partial s} \right|_{s=0} \right)$$

o bien:

$$-\left. \frac{\partial P_i}{\partial s} \right|_{s=0} dq_i + \left. \frac{\partial Q_i}{\partial s} \right|_{s=0} dp_i + \left. \frac{\partial K}{\partial s} \right|_{s=0} dt = d\left(\left. \frac{\partial F_1}{\partial s} \right|_{s=0} + p_i \left. \frac{\partial Q_i}{\partial s} \right|_{s=0} \right).$$

Definiendo:

$$G \equiv \left. \frac{\partial F_1}{\partial s} \right|_{s=0} + p_i \left. \frac{\partial Q_i}{\partial s} \right|_{s=0}$$

se tiene que:

$$-\left. \frac{\partial P_i}{\partial s} \right|_{s=0} dq_i + \left. \frac{\partial Q_i}{\partial s} \right|_{s=0} dp_i + \left. \frac{\partial K}{\partial s} \right|_{s=0} dt = dG \quad (1.24)$$

donde G es el generador de las transformaciones (1.22).

De (1.24) podemos percatarnos de dos puntos importantes, el primero es que la función generatriz, G , es función de q_i , p_i y t , y el segundo:

$$\left. \frac{\partial P_i}{\partial s} \right|_{s=0} = -\frac{\partial G}{\partial q_i} \quad (1.25a)$$

$$\left. \frac{\partial Q_i}{\partial s} \right|_{s=0} = \frac{\partial G}{\partial p_i} \quad (1.25b)$$

$$\left. \frac{\partial K}{\partial s} \right|_{s=0} = \frac{\partial G}{\partial t}. \quad (1.25c)$$

Similarmente, dada una función diferenciable arbitraria, G , existe un grupo de transformaciones canónicas tal que:

$$\left. \frac{\partial Q_i}{\partial s} \right|_{s=0} = \frac{\partial G}{\partial p_i}$$

$$\left. \frac{\partial P_i}{\partial s} \right|_{s=0} = -\frac{\partial G}{\partial q_i}$$

Finalmente, es importante destacar que para una transformación canónica la diferencia $K - H$ queda determinada hasta una función aditiva de t , y s para el caso de una familia de transformaciones canónicas, la cual afecta a F_1 , y G .

1.1.3. Simetrías en la mecánica clásica hamiltoniana

Hemos visto que las transformaciones canónicas relacionan representaciones equivalentes de un sistema dado. El cambio de una representación a otra involucra una redefinición de la hamiltoniana, la cual está determinada hasta una función aditiva de t . Existen transformaciones canónicas que mantienen la forma de ciertas hamiltonianas; dicho de otra manera, una hamiltoniana H es invariante bajo una transformación canónica $Q_i = Q_i(q_j, p_j, t)$, $P_i = P_i(q_j, p_j, t)$ si:

$$K(q_i, p_i, t) = H(Q_i, P_i, t) \quad (1.26)$$

donde K es la nueva hamiltoniana. Se dice que dicha transformación canónica es una simetría del sistema, puesto que la hamiltoniana, que determina el comportamiento del sistema, no sufre un cambio significativo ante dicha transformación.

**CAPÍTULO 1. SIMETRÍAS EN LA MECÁNICA CLÁSICA HAMILTONIANA Y EN
LA MECÁNICA CUÁNTICA**
1.1. MECÁNICA CLÁSICA HAMILTONIANA

Por ejemplo, la hamiltoniana:

$$H = \frac{p^2}{2m} + mgq$$

es invariante bajo la transformación canónica:

$$Q = q - vt, \quad P = p - mv$$

donde v es un parámetro real. En efecto, para ello note que:

$$\begin{aligned} pdq - PdQ + (K - H) dt &= pdq - (p - mv)(dq - vdt) + (K - H) dt \\ &= mvdq + vpdt - mv^2 dt + (K - H) dt \\ &= d\left(mvq - \frac{1}{2}mv^2 t\right) + \left(K - H + vp - \frac{1}{2}mv^2\right) dt \end{aligned}$$

Así la nueva hamiltoniana debe estar dada por $K = H - vp + \frac{1}{2}mv^2 + f(t, v)$ (recordando que K queda determinada hasta una función de t y del parámetro), entonces:

$$\begin{aligned} K &= \frac{p^2}{2m} + mgq - vp + \frac{1}{2}mv^2 + f(t, v) \\ &= \frac{(P + mv)^2}{2m} + mg(Q + vt) - v(P + mv) + \frac{1}{2}mv^2 + f(t, v) \\ &= \frac{P^2}{2m} + Pv + \frac{1}{2}mv^2 + mgQ + mgvt - vP - mv^2 + \frac{1}{2}mv^2 + f(t, v) \\ &= \frac{P^2}{2m} + mgQ + mgvt + f(t, v) \\ &= H(Q, P, t) + mgvt + f(t, v). \end{aligned}$$

Y eligiendo $f(t, v) = -mgvt$ se cumple la condición (1.26).

En la subsección anterior fijamos nuestra atención en cierto tipo de transformaciones canónicas, las familias uniparamétricas de transformaciones canónicas. El interés especial que se tiene en este tipo de transformaciones es que la invariancia de una hamiltoniana bajo estas transformaciones está relacionada con una constante de movimiento.

Proposición 1.1. *Si la hamiltoniana, H , es invariante bajo una familia uniparamétrica de transformaciones canónicas generada por G , entonces G es una constante de movimiento.*

Prueba: Sea $Q_i = Q_i(q_j, p_j, t, s)$ y $P_i = P_i(q_j, p_j, t, s)$ una familia de transformaciones canónicas generada por G , además, H es invariante bajo dicha familia, es decir:

$$K(q_i, p_i, t, s) = H(Q_i, P_i, t)$$

Ahora hallems la derivada total con respecto al tiempo de G :

$$\begin{aligned} \frac{dG}{dt} &= \frac{\partial G}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial G}{\partial p_i} \dot{p}_i + \frac{\partial G}{\partial t} \\ &= \left(- \frac{\partial P_i}{\partial s} \Big|_{s=0} \right) \frac{\partial H}{\partial p_i} + \frac{\partial Q_i}{\partial s} \Big|_{s=0} \left(- \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial K}{\partial s} \Big|_{s=0} \\ &= - \frac{\partial}{\partial s} H(Q_i(q_j, p_j, t, s), P_i(q_j, p_j, t, s), t) \Big|_{s=0} + \frac{\partial K}{\partial s} \Big|_{s=0} \\ &= 0. \end{aligned}$$

$\therefore G$ es una constante de movimiento.

Ejemplo

Vimos que la familia uniparamétrica de transformaciones canónicas:

$$Q = q - vt, \quad P = p - mv$$

deja invariante a la hamiltoniana:

$$H = \frac{p^2}{2m} + mgq$$

Hallemos la función generatriz de dicha transformación mediante las ecuaciones (1.25),

$$\frac{\partial G}{\partial p} = \frac{\partial Q}{\partial v} \Big|_{v=0} = -t, \quad \frac{\partial G}{\partial q} = -\frac{\partial P}{\partial v} \Big|_{v=0} = m, \quad \frac{\partial G}{\partial t} = \frac{\partial K}{\partial v} \Big|_{v=0} = -p - mgt.$$

Por tanto, $G = mq - tp - \frac{1}{2}mgt^2$, que en efecto es una constante de movimiento.

Recíprocamente al resultado de la proposición 1.1, cualquier constante de movimiento, G , es la función generatriz de un grupo uniparamétrico de transformaciones canónicas que dejan invariante a la función hamiltoniana.

1.2. Mecánica cuántica

A finales del siglo XIX se creía que ya todo estaba hecho en la física, que los conocimientos que se tenían hasta ese momento bastaban para explicar todo fenómeno y que el desarrollo en la física había alcanzado su límite. No obstante, a inicios del siglo XX la falla de la física clásica para explicar algunos experimentos que involucraban fenómenos microscópicos demostró lo contrario. Así, había la necesidad de crear una nueva teoría que pudiese explicar dichos experimentos. Fue así como nació la mecánica cuántica, con la *mecánica matricial* (1925) y la *mecánica ondulatoria* (1926) desarrolladas por Heisenberg y Schrödinger, respectivamente. Más tarde Dirac introdujo una formulación más general en la cual se tratan objetos abstractos a los que llamó *kets* y *bras*. La representación del formalismo de Dirac en una base continua nos regresa a la mecánica ondulatoria de Schrödinger, mientras que la formulación matricial de Heisenberg puede ser obtenida por la representación del formalismo de Dirac en una base discreta. Para los fines de este trabajo haremos uso de la formulación de Dirac.

Representaremos los estados de un sistema cuántico mediante rayos y estos a su vez por vectores que son elementos de un espacio lineal, el *espacio de Hilbert* \mathcal{H} sobre el campo de los números complejos \mathbb{C} . A estos vectores, que llamaremos *kets de estado* o simplemente *kets*, los denotaremos por $|\psi\rangle$.

Además, a cada ket $|\psi\rangle$ le asociamos, en una relación uno a uno, un vector dual $\langle\psi|$ que llamaremos *bra*, este bra pertenece a un espacio de Hilbert \mathcal{H}^* que es el dual del espacio de Hilbert \mathcal{H} .

Sean $|\psi\rangle$ y $|\phi\rangle$, denotamos el producto escalar de estos kets como $\langle\psi|\phi\rangle$ el cual tiene la propiedad:

$$\langle\psi|\phi\rangle = \langle\phi|\psi\rangle^*,$$

donde $*$ denota el complejo conjugado. Este producto escalar representa la proyección de $|\phi\rangle$ en $|\psi\rangle$.

1.2.1. Operadores

Los cambios de los estados de un sistema cuántico son causados por operadores, por ejemplo la evolución temporal del sistema. Consideremos un operador lineal A^5 , es decir, dados los estados $|\psi\rangle$ y $|\phi\rangle$ y $a, b \in \mathbb{C}$, se cumple que:

$$A(a|\psi\rangle + b|\phi\rangle) = aA|\psi\rangle + bA|\phi\rangle. \tag{1.27}$$

⁵Aunque existen operadores antilineales, como es el caso del *operador de inversión temporal*, que tienen la propiedad:

$$B(a|\psi\rangle + b|\phi\rangle) = a^*B|\psi\rangle + b^*B|\phi\rangle,$$

solo haremos uso de operadores lineales.

Conmutadores

Si A y B son dos operadores definimos el *conmutador* de estos operadores como:

$$[A, B] \equiv AB - BA. \quad (1.28)$$

Si $[A, B] = \mathbf{0}^6$ entonces A y B *conmutan*, es decir, $AB = BA$.

De la definición (1.28) es fácil verificar las siguientes propiedades:

$$[A, B] = -[B, A] \quad (1.29a)$$

$$[A, B + C] = [A, B] + [A, C] \quad (1.29b)$$

$$[A, BC] = [A, B]C + B[A, C] \quad (1.29c)$$

$$[A, a] = \mathbf{0}, \quad \forall a \in \mathbb{C} \quad (1.29d)$$

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = \mathbf{0} \quad (1.29e)$$

a esta última propiedad, al igual que (1.10e), se le conoce como *identidad de Jacobi*.

Postulamos que las componentes del operador posición y del operador momento cumplen con las siguientes reglas de conmutación:

$$[x_i, x_j] = \mathbf{0}, \quad (1.30a)$$

$$[p_i, p_j] = \mathbf{0}, \quad (1.30b)$$

$$[x_j, p_k] = i\hbar\delta_{jk}, \quad (1.30c)$$

donde i es la unidad imaginaria, \hbar es la *constante de Planck normalizada* ($\hbar/2\pi$). Note el gran parecido entre el álgebra de los conmutadores y de los paréntesis de Poisson, esta analogía nos prevé una conexión entre la mecánica clásica y la cuántica. De hecho, para cantidades que poseen su análogo clásico, la ecuación clásica correcta se puede obtener de la ecuación correspondiente en mecánica cuántica empleando el *ansatz*⁷:

$$\frac{1}{i\hbar} [\cdot, \cdot] \longrightarrow \{\cdot, \cdot\}. \quad (1.31)$$

A continuación presentamos dos proposiciones importantes.

Proposición 1.2. *Si A y B son dos operadores que conmutan con $[A, B]$, entonces:*

$$e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A, B]} \quad (1.32)$$

Proposición 1.3. *Si A y B son dos operadores y λ una constante, entonces:*

$$e^{\lambda A} B e^{-\lambda A} = B + \lambda [A, B] + \frac{\lambda^2}{2!} [A, [A, B]] + \frac{\lambda^3}{3!} [A, [A, [A, B]]] + \dots \quad (1.33)$$

(Ver Ref. [4] Cap. 3, Sec. 4.)

⁶Donde $\mathbf{0}$ es el *operador nulo* el cual tiene la propiedad de ser neutro aditivo, es decir, $A + \mathbf{0} = A$.

⁷La palabra *ansatz* proviene del alemán y se emplea para referirnos a una consideración matemática empleada para describir un determinado fenómeno, postulada con el fin de ayudar provisionalmente a resolver una ecuación u otro problema.

Operadores hermiteanos

Sea el operador A , denotamos a su *adjunto hermiteano* por A^\dagger , que tiene como propiedad de que para cualesquiera dos kets, $|\psi\rangle$ y $|\phi\rangle$,

$$\langle \psi | A^\dagger | \phi \rangle = \langle \phi | A | \psi \rangle^* . \quad (1.34)$$

Por lo tanto, la correspondencia entre un ket al aplicarle un operador A y su dual es:

$$A |\alpha\rangle = |\beta\rangle \longleftrightarrow \langle \alpha | A^\dagger = \langle \beta | .$$

A partir de (1.34) se pueden demostrar las siguientes propiedades:

$$(aA)^\dagger = a^* A^\dagger \quad (1.35a)$$

$$(A^\dagger)^\dagger = A \quad (1.35b)$$

$$(A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger \quad (1.35c)$$

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger \quad (1.35d)$$

$$(A^n)^\dagger = (A^\dagger)^n \quad (1.35e)$$

Además, se dice que un operador, A , es *hermiteano* si $A^\dagger = A$, o bien:

$$\langle \psi | A | \phi \rangle = \langle \phi | A | \psi \rangle^* . \quad (1.36)$$

El resultado posible de una medición de la variable física \mathcal{A} , representada por el operador A , es uno de los *eigenvalores*⁸ de dicho operador. Por ello, una de las razones por la cual los operadores hermiteanos son empleados en la mecánica cuántica es debido a que sus eigenvalores son números reales, lo que significa que un operador hermiteano representa una cantidad física medible consistente.

Ejemplos de operadores hermiteanos que se emplean frecuentemente en la mecánica cuántica son el *operador de posición* r , el *operador de momento* p y sus respectivas componentes (para una demostración elemental de este hecho consulte Ref. [11] Sec. 2.9).

Operadores unitarios

Sea A un operador, el *operador inverso* (si este existe) A^{-1} , se caracteriza por:

$$AA^{-1} = A^{-1}A = \mathbf{1},$$

donde $\mathbf{1}$ es el *operador identidad*⁹.

Por otra parte, U es un *operador unitario* si:

$$U^\dagger U = UU^\dagger = \mathbf{1}, \quad (1.37)$$

es decir $U^\dagger = U^{-1}$.

⁸Decimos que $|\psi\rangle$ es un *eigenket* del operador A si ocurre:

$$A|\psi\rangle = a|\psi\rangle \text{ y } |\psi\rangle \neq 0,$$

al número $a \in \mathbb{C}$ se le denomina *eigenvalor*.

⁹El operador identidad $\mathbf{1}$, tiene como propiedades:

$$\mathbf{1}|\psi\rangle = |\psi\rangle \text{ y } \mathbf{1}A = A\mathbf{1} = A$$

note que de la segunda propiedad tenemos que cualquier operador conmuta con el operador identidad.

Los operadores unitarios son de gran importancia en la mecánica cuántica ya que describen operaciones de simetría y evolución temporal. Una de las formas más interesantes de expresar un operador unitario es a través de un operador hermiteano,

$$U = e^{-\frac{i}{\hbar} s A}, \quad (1.38)$$

donde s es un parámetro real y A un operador hermiteano. Para ver que U es un operador unitario note que:

$$U^\dagger = \left(e^{-\frac{i}{\hbar} s A} \right)^\dagger = \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} s \right)^n A^n \right)^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i}{\hbar} s \right)^n A^n = e^{\frac{i}{\hbar} s A},$$

así, empleando (1.32): $U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbf{1}$, lo cual muestra que en efecto se trata de un operador unitario.

Gracias a los operadores unitarios podemos considerar transformaciones unitarias de estados y operadores,

$$U |\psi\rangle = |\psi'\rangle, \quad (1.39)$$

$$U^\dagger A U = A'. \quad (1.40)$$

Estas transformaciones destacan en la mecánica cuántica debido a que dejan invariantes ciertas cantidades que son importantes, tales como el producto escalar o los eigenvalores de un operador. Una transformación unitaria es análoga a la rotación del cálculo vectorial elemental.

1.2.2. Operador de evolución y ecuación de Schrödinger

Postulamos que la evolución del estado de un sistema cuántico es a través de un operador unitario $U(t, t_0)$, conocido como *operador de evolución temporal*, de tal manera que:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \quad (1.41)$$

dicho operador debe cumplir:

$$U(t_0, t_0) = \mathbf{1}, \quad (1.42a)$$

$$U(t_2, t_1) U(t_1, t_0) = U(t_2, t_0). \quad (1.42b)$$

De dichas propiedades tenemos que:

$$U(t, t_0) U(t_0, t) = U(t_0, t) U(t, t_0) = \mathbf{1},$$

por lo que:

$$U^{-1}(t, t_0) = U(t_0, t). \quad (1.43)$$

Por otro lado, debido a que $U(t, t_0)$ es unitario se cumple que $U(t, t_0) U^\dagger(t, t_0) = \mathbf{1}$, si derivamos esta ecuación con respecto a t se tiene:

$$\frac{\partial U}{\partial t} U^\dagger = -U \frac{\partial U^\dagger}{\partial t}. \quad (1.44)$$

Ahora, halleemos la derivada con respecto al tiempo de $|\psi(t)\rangle$,

$$\begin{aligned} \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} &= \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} |\psi(t_0)\rangle \\ &= \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle \\ &= \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} U^\dagger(t, t_0) |\psi(t)\rangle. \end{aligned} \quad (1.45)$$

**CAPÍTULO 1. SIMETRÍAS EN LA MECÁNICA CLÁSICA HAMILTONIANA Y EN
LA MECÁNICA CUÁNTICA
1.2. MECÁNICA CUÁNTICA**

Definimos al operador hermiteano H^{10} como:

$$H(t) \equiv i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} U^\dagger(t, t_0), \quad (1.46)$$

note que H solamente depende de t^{11} .

Así, podemos reescribir (1.45) como:

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H(t)|\psi(t)\rangle, \quad (1.47)$$

a dicha ecuación se le conoce como *ecuación de Schrödinger*. El operador H es análogo a la función hamiltoniana por lo que se le conoce como *operador hamiltoniano*; este operador es característico de cada sistema, usualmente se construye guiándose a través de alguna expresión clásica.

De la ecuación (1.41) se puede ver claramente que la ecuación de Schrödinger es determinista, ya que especificando una condición inicial ($|\psi(t_0)\rangle$) se determina una única solución ($|\psi(t)\rangle$) para tiempos posteriores.

Debido a que generalmente se conoce H y no U podemos preguntarnos ¿cómo podemos hallar U dado H ? Para responder esto note que de (1.46) se obtiene la siguiente ecuación diferencial:

$$\frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} H(t) U(t, t_0), \quad (1.48)$$

con la condición inicial $U(t_0, t_0) = \mathbf{1}$.

Si H no depende explícitamente de t se puede verificar que la solución de (1.48) está dada por:

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)H} \quad (1.49)$$

Por otra parte, si H depende explícitamente de t existen dos casos (ver Ref. [6]):

- El operador H conmuta para diferentes valores de t . En este caso la solución de (1.48) es:

$$U(t, t_0) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H(t')\right]. \quad (1.50)$$

- El operador H no conmuta para valores distintos de t . La solución de (1.48) es:

$$U(t, t_0) = \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n H(t_1) H(t_2) \cdots H(t_n), \quad (1.51)$$

la cual se conoce como *serie de Dyson*.

¹⁰Note que:

$$H^\dagger = -i\hbar \left(\frac{\partial U}{\partial t} U^\dagger\right)^\dagger = -i\hbar U \frac{\partial U^\dagger}{\partial t} = i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} U^\dagger = H,$$

por lo que H es hermiteano.

¹¹De (1.42b) se tiene $U(t, t_0) = U(t, t_1) U(t_1, t_0)$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} &= \frac{\partial U(t, t_1)}{\partial t} U(t_1, t_0) \\ \Rightarrow i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} U^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) &= i\hbar \frac{\partial U(t, t_1)}{\partial t} U^\dagger(t, t_1) U(t, t_0) \\ \Rightarrow i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} U^\dagger(t, t_0) &= i\hbar \frac{\partial U(t, t_1)}{\partial t} U^\dagger(t, t_1), \end{aligned}$$

por tanto H no depende del segundo argumento de U , es decir, H es solo función de t .

1.2.3. Imagen de Schrödinger e imagen de Heisenberg

En la mecánica cuántica existen diferentes representaciones, estas están relacionadas a través de transformaciones unitarias, y difieren una de otra por la manera en que se trata la evolución temporal del sistema. Dentro de las representaciones más trascendentes se encuentran la de Schrödinger y la de Heisenberg.

En la subsección anterior postulamos que la evolución de un estado está dada por un operador unitario, a esta formulación se le conoce como *imagen de Schrödinger*. Así, un ket en esta representación es,

$$|\psi(t)\rangle_S = U(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle, \quad (1.52)$$

donde el subíndice S indica Schrödinger.

Existe una representación distinta conocida como *imagen de Heisenberg*, en esta representación los estados son fijos en el tiempo,

$$|\psi(t)\rangle_H = |\psi(t_0)\rangle \quad (1.53)$$

donde H denota Heisenberg.

En la mayoría de los textos se menciona que otra diferencia entre ambas representaciones está en considerar operadores constantes en la imagen de Schrödinger y operadores que varían con el tiempo para el caso de la imagen de Heisenberg; lo cual es falso, ya que un operador $A^{(S)}$ ¹² dado en la imagen de Schrödinger puede depender explícitamente del tiempo. Entonces, la verdadera diferencia es que en la imagen de Heisenberg la evolución únicamente se refleja en los operadores, es decir, la transformación unitaria ahora se le aplica a los operadores. Una vez aclarado esto, definimos a los operadores en la imagen de Heisenberg como,

$$A^{(H)}(t) \equiv U^\dagger(t, t_0) A^{(S)}(t) U(t, t_0). \quad (1.54)$$

Como caso especial tenemos al operador H , si éste no depende explícitamente de t entonces el operador en ambas imágenes coincide, esto es, $H^{(H)} = H$.

A pesar de que las imágenes de Schrödinger y de Heisenberg son equivalentes, ya que podemos usar cualquiera de estas para describir un sistema cuántico, la formulación de Heisenberg resulta más adecuada para tratar temas relacionados con simetrías y leyes de conservación.

Cabe destacar que el *valor esperado*¹³ en ambas imágenes es el mismo, en efecto:

$${}_S \langle \psi(t) | A^{(S)} | \psi(t) \rangle_S = \langle \psi(t_0) | U^\dagger(t, t_0) A^{(S)} U(t, t_0) | \psi(t_0) \rangle = {}_H \langle \psi(t) | A^{(H)} | \psi(t) \rangle_H$$

Ecuación de movimiento de Heisenberg

Hallemos la evolución temporal de un operador en la imagen de Heisenberg,

$$\begin{aligned} \frac{dA^{(H)}}{dt} &= \frac{\partial U^\dagger}{\partial t} A^{(S)} U + U^\dagger \frac{\partial A^{(S)}}{\partial t} U + U^\dagger A^{(S)} \frac{\partial U}{\partial t} \\ &= -\frac{1}{i\hbar} U^\dagger H U U^\dagger A^{(S)} U + \frac{\partial A^{(H)}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} U^\dagger A^{(S)} U U^\dagger H U \\ &= -\frac{1}{i\hbar} H^{(H)} A^{(H)} + \frac{\partial A^{(H)}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} A^{(H)} H^{(H)} \\ &= \frac{\partial A^{(H)}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [A^{(H)}, H^{(H)}] \end{aligned} \quad (1.55)$$

¹²Aunque a lo largo de esta subsección emplearemos esta notación para enfatizar que el operador se encuentra en la imagen de Schrödinger, fuera de la subsección omitiremos el superíndice.

¹³El valor esperado de un operador A se define como:

$$\langle A \rangle \equiv \langle \phi | A | \phi \rangle$$

donde $|\phi\rangle$ es un ket arbitrario. Observe que el valor esperado depende de la elección de este ket.

**CAPÍTULO 1. SIMETRÍAS EN LA MECÁNICA CLÁSICA HAMILTONIANA Y EN
LA MECÁNICA CUÁNTICA
1.2. MECÁNICA CUÁNTICA**

donde hicimos uso de (1.48) y su adjunto hermiteano y $\frac{\partial A^{(H)}}{\partial t} \equiv U^\dagger \frac{\partial A^{(S)}}{\partial t} U$. A (1.55) se le conoce como *ecuación de movimiento de Heisenberg*.

El parecido que tiene la ecuación de Heisenberg con (1.11) obtenida en el contexto de la mecánica hamiltoniana, nuevamente nos habla del vínculo entre la mecánica hamiltoniana y la mecánica cuántica. Así, podemos emplear el ansatz (1.31) para obtener (1.11) a partir de (1.55) teniendo las consideraciones pertinentes.

Por otra parte, $A^{(S)}$ se conserva (es una constante de movimiento) si:

$$\frac{dA^{(H)}}{dt} = \mathbf{0}. \quad (1.56)$$

La ecuación anterior equivale a:

$$\frac{\partial A^{(S)}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [A^{(S)}, H] = \mathbf{0}, \quad (1.57)$$

es decir, no importa en qué imagen se encuentren los operadores para poder determinar si se conservan o no, lo cual, como se verá después, resulta conveniente.

1.2.4. Simetrías en la mecánica cuántica

El estudio de las simetrías continuas resulta imprescindible, pues además ser una herramienta eficaz para obtener la solución de algunos problemas, están relacionadas con cantidades conservadas.

Las cantidades medibles del sistema (eigenvalores, valor medio, etc.) son cruciales en el marco de la mecánica cuántica ya que gracias a ellas podemos tener información del sistema; por ello, el hecho de que no cambien bajo una operación de simetría es fundamental. Lo que significa que tales operaciones pueden ser descritas por transformaciones unitarias.

Dicho lo anterior, sea U_s un operador unitario,

$$U_s = e^{-\frac{i}{\hbar} s A}, \quad (1.58)$$

donde s es un parámetro real y A un operador hermiteano. Consideremos que A no depende explícitamente del tiempo y por lo tanto tampoco U_s ¹⁴.

Las transformaciones unitarias dadas por (1.58), cumplen con las siguientes propiedades,

- i) Sean U_r y U_s con $r, s \in \mathbb{R}$, entonces $U_{r+s} = U_r U_s$ también es una transformación unitaria.
- ii) Sean U_r , U_s y U_t con $r, s, t \in \mathbb{R}$, entonces $U_{r+s} U_t = U_r U_{s+t}$. Así, las transformaciones unitarias son asociativas.
- iii) Para $U_0 = \mathbf{1}$ se cumple que $U_0 U_s = U_s U_0 = U_s$ con $s \in \mathbb{R}$.
- iv) Dado $s \in \mathbb{R}$ existe $-s \in \mathbb{R}$ tal que $U_s U_{-s} = U_{-s} U_s = U_0$.

Por lo tanto las transformaciones (1.58) forman un grupo y al operador A se le conoce como el *generador del grupo de transformaciones unitarias*.

Por otro lado, decimos que H es invariante bajo el grupo de transformaciones unitarias (1.58) si:

$$U_s^\dagger H U_s = H. \quad (1.59)$$

De manera similar a lo que ocurre en la mecánica clásica, la invariancia en el hamiltoniano está relacionada con una cantidad conservada, como se verá a continuación.

Proposición 1.4. *Si H es invariante bajo el grupo de transformaciones unitarias generado por A , entonces A es una constante de movimiento.*

¹⁴El caso en el que A depende explícitamente del tiempo será tratado en el siguiente capítulo.

Prueba: Empleando (1.33) se tiene que:

$$e^{\frac{i}{\hbar}sA} H e^{-\frac{i}{\hbar}sA} = H + \frac{is}{\hbar} [A, H] + \frac{1}{2!} \left(\frac{is}{\hbar}\right)^2 [A, [A, H]] + \frac{1}{3!} \left(\frac{is}{\hbar}\right)^3 [A, [A, [A, H]]] + \dots$$

Por otra parte, como H es invariante bajo el grupo de transformaciones generado por A entonces:

$$e^{\frac{i}{\hbar}sA} H e^{-\frac{i}{\hbar}sA} = H,$$

por tanto, $[A, H] = \mathbf{0}$, $[A, [A, H]] = \mathbf{0}$, $[A, [A, [A, H]]] = \mathbf{0}$, etc. En particular $[A, H] = \mathbf{0}$ y como A no depende explícitamente del tiempo, se tiene que:

$$\frac{dA}{dt} = \mathbf{0}$$

$\therefore A$ es una constante de movimiento.

Similarmente, si A es un operador hermiteano que no depende explícitamente del tiempo y además se conserva, entonces H es invariante bajo el grupo de transformaciones unitarias generado por A ¹⁵.

Con el fin de entender mejor los conceptos anteriores veamos el siguiente ejemplo.

Ejemplo

Consideremos el operador,

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2),$$

que corresponde al oscilador armónico cuántico bidimensional.

Además, consideremos la componente en z del *operador momento angular orbital*,

$$L_z = xp_y - yp_x$$

que es una constante de movimiento para H , en efecto,

$$\begin{aligned} [H, L_z] &= \left[\frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2) + \frac{m\omega^2}{2} (x^2 + y^2), xp_y - yp_x \right] \\ &= \frac{1}{2m} \{ [p_x^2, xp_y] - [p_y^2, yp_x] \} + \frac{m\omega^2}{2} \{ [y^2, xp_y] - [x^2, yp_x] \} \\ &= \frac{1}{2m} \{ p_x [p_x, x] p_y + [p_x, x] p_x p_y - [p_y, y] p_x p_y - p_y [p_y, y] p_x \} \\ &\quad + \frac{m\omega^2}{2} \{ x [y, p_y] y + xy [y, p_y] - y [x, p_x] x - xy [x, p_x] \} \\ &= \frac{1}{2m} \{ -i\hbar p_x p_y - i\hbar p_x p_y + i\hbar p_x p_y + i\hbar p_x p_y \} + \frac{m\omega^2}{2} \{ i\hbar xy + i\hbar xy - i\hbar xy - i\hbar xy \} \\ &= \mathbf{0}. \end{aligned}$$

Ahora, hallemos los conmutadores de L_z con x , y , p_x y p_y ,

$$[L_z, x] = [xp_y - yp_x, x] = -y [p_x, x] = i\hbar y,$$

$$[L_z, y] = [xp_y - yp_x, y] = x [p_y, y] = -i\hbar x,$$

$$[L_z, p_x] = [xp_y - yp_x, p_x] = p_y [x, p_x] = i\hbar p_y,$$

$$[L_z, p_y] = [xp_y - yp_x, p_y] = -p_x [y, p_y] = -i\hbar p_x.$$

¹⁵La prueba es similar a la proposición 1.4.

Por otro lado, podemos hallar la acción de $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\alpha L_z\right)$ sobre el operador x con la ayuda de (1.33),

$$e^{\frac{i}{\hbar}\alpha L_z} x e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha L_z} = x + \frac{i\alpha}{\hbar} [L_z, x] + \frac{1}{2!} \left(\frac{i\alpha}{\hbar}\right)^2 [L_z, [L_z, x]] + \frac{1}{3!} \left(\frac{i\alpha}{\hbar}\right)^3 [L_z, [L_z, [L_z, x]]] + \dots$$

Ahora, calculemos algunos conmutadores de la expresión anterior.

$$[L_z, [L_z, x]] = [L_z, i\hbar y] = -(i\hbar)^2 x,$$

$$[L_z, [L_z, [L_z, x]]] = [L_z, -(i\hbar)^2 x] = -(i\hbar)^3 y,$$

$$[L_z, [L_z, [L_z, [L_z, x]]]] = [L_z, -(i\hbar)^3 y] = (i\hbar)^4 x,$$

etc., entonces,

$$\begin{aligned} e^{\frac{i}{\hbar}\alpha L_z} x e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha L_z} &= x + \frac{i\alpha}{\hbar} i\hbar y - \frac{1}{2!} \left(\frac{i\alpha}{\hbar}\right)^2 (i\hbar)^2 x - \frac{1}{3!} \left(\frac{i\alpha}{\hbar}\right)^3 (i\hbar)^3 y + \frac{1}{4!} \left(\frac{i\alpha}{\hbar}\right)^4 (i\hbar)^4 x + \dots \\ &= x - \alpha y - \frac{\alpha^2}{2!} x + \frac{\alpha^3}{3!} y + \frac{\alpha^4}{4!} x - \frac{\alpha^5}{5!} y + \dots \\ &= \left(1 - \frac{\alpha^2}{2!} + \frac{\alpha^4}{4!} + \dots\right) x - \left(\alpha - \frac{\alpha^3}{3!} + \frac{\alpha^5}{5!} + \dots\right) y \\ &= \cos(\alpha) x - \sin(\alpha) y \end{aligned}$$

Similarmente,

$$e^{\frac{i}{\hbar}\alpha L_z} y e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha L_z} = \cos(\alpha) y + \sin(\alpha) x,$$

$$e^{\frac{i}{\hbar}\alpha L_z} p_x e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha L_z} = \cos(\alpha) p_x - \sin(\alpha) p_y,$$

$$e^{\frac{i}{\hbar}\alpha L_z} p_y e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha L_z} = \cos(\alpha) p_y + \sin(\alpha) p_x.$$

Empleando los resultados anteriores es fácil hallar la aplicación de $\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\alpha L_z\right)$ al operador H que, de acuerdo a la proposición 1.4, debe permanecer invariante. Además, la conservación de L_z nos dice que el sistema es invariante ante rotaciones espaciales alrededor del eje z .

Capítulo 2

Simetrías del hamiltoniano y operadores conservados

Tradicionalmente en los textos de mecánica cuántica se consideran solo constantes de movimiento que no dependen explícitamente del tiempo. Para este caso vimos que si el operador H permanece invariante ante un grupo de transformaciones unitarias entonces el generador se conserva. Sin embargo, existen transformaciones que dependen explícitamente del tiempo, como las transformaciones de Galileo (ver Refs. [2,5,10]), para las que, evidentemente, la definición de invariancia tradicional no es adecuada (ya que no conmutan con el operador hamiltoniano).

Sea U un operador unitario, decimos que H es invariante bajo U si,

$$U^\dagger H U = H + i\hbar U^\dagger \frac{\partial U}{\partial t}, \quad (2.1)$$

note que si U no depende del tiempo (2.1) se reduce a (1.59).

Además, de (2.1) se deduce que si $|\psi(t)\rangle$ es solución de la ecuación de Schrödinger (ecuación (1.45)) entonces $U|\psi(t)\rangle$ también lo es; en efecto,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} (U|\psi(t)\rangle) &= i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} |\psi(t)\rangle + i\hbar U \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle \\ &= i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} |\psi(t)\rangle + U H |\psi(t)\rangle \\ &= \left\{ i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} + U H \right\} |\psi(t)\rangle \\ &= H (U|\psi(t)\rangle) \end{aligned}$$

A continuación se muestran dos resultados importantes que relacionan simetrías con cantidades conservadas, similar a lo que vimos en la mecánica hamiltoniana. (Ver Ref. [9].)

Proposición 2.1. *Si el operador hamiltoniano es invariante bajo una familia uniparamétrica de transformaciones unitarias, U_s , entonces,*

$$A \equiv i\hbar \left(U_s^\dagger \frac{\partial U_s}{\partial s} \right) \Big|_{s=0}, \quad (2.2)$$

se conserva. (Considerando que U_0 es el operador identidad.)

Prueba: Puesto que H es invariante bajo U_s se tiene que,

$$U_s^\dagger H U_s = H + i\hbar U_s^\dagger \frac{\partial U_s}{\partial t}$$

derivando dicha ecuación con respecto a s y evaluando en $s = 0$ se obtiene,

$$-\frac{1}{i\hbar}AH + \frac{1}{i\hbar}HA = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{i\hbar}A \right)$$

o bien,

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [A, H] = \mathbf{0}.$$

\therefore A es una constante de movimiento.

Proposición 2.2. *Si A es un operador hermiteano que se conserva, entonces H es invariante bajo el grupo uniparamétrico de transformaciones unitarias $U = e^{-\frac{i}{\hbar}sA}$, donde s es un parámetro real.*

Prueba: Calculemos la parcial de U con respecto al tiempo,

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar}sA} \\ &= \frac{\partial}{\partial t} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}s \right)^n A^n \right\} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}s \right)^n \frac{\partial A^n}{\partial t} \end{aligned}$$

Por otro lado, como A se conserva entonces A^n también se conserva¹, así:

$$\frac{\partial A^n}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} [A^n, H].$$

Luego,

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial t} &= -\frac{1}{i\hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}s \right)^n [A^n, H] \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}s \right)^n A^n H - H \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar}s \right)^n A^n \right\} \\ &= -\frac{1}{i\hbar} \{UH - HU\}, \end{aligned}$$

entonces:

$$-i\hbar \frac{\partial U}{\partial t} = UH - HU,$$

o bien,

$$U^\dagger HU = H + i\hbar U^\dagger \frac{\partial U}{\partial t}.$$

\therefore H es invariante bajo la transformación $U = e^{-\frac{i}{\hbar}sA}$.

Es importante notar que en la proposición 2.1 solo basta con que H sea invariante bajo una familia de transformaciones unitarias y no necesariamente bajo un grupo, tal y como ocurre en el caso clásico.

2.1. Ejemplos

A continuación se muestran varios ejemplos en los que se aplican los resultados obtenidos en el apartado anterior.

¹Ver Apéndice A.

2.1.1. Transformaciones de Galileo

Las transformaciones de Galileo se caracterizan por,

$$U_v^\dagger x U_v = x - vt \quad (2.3a)$$

$$U_v^\dagger p U_v = p - mv \quad (2.3b)$$

donde v es el parámetro real que representa la velocidad relativa entre dos sistemas de referencia inerciales y m la masa de la partícula.

Por otra parte, derivando las ecuaciones (2.3) con respecto a v y evaluando en cero (considerando (2.2)), obtenemos:

$$-\frac{1}{i\hbar} [A, x] = -t,$$

$$-\frac{1}{i\hbar} [A, p] = -m,$$

de las cuales se deduce que:

$$A = mx - pt + f(t), \quad (2.4)$$

donde f es una función de valores reales. Note que f no puede ser determinada a través de las ecuaciones (2.3). El valor de la función puede ser elegido exigiendo que A sea una constante de movimiento para determinado operador H ; por ejemplo, en el caso de una partícula libre basta que $f = 0$ para que A sea una constante de movimiento.

Ahora, hallemos un caso más general en el que f no es cero; para ello, consideremos que H es de la forma,

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + V(x, t)$$

Para que A se conserve se debe cumplir:

$$\frac{df}{dt} + \frac{t}{i\hbar} [V(x, t), p] = 0$$

lo que conduce a:

$$V(x, t) = -\frac{1}{t} \frac{df}{dt} x.$$

Si elegimos $f(t) = \frac{1}{2} mgt^2$ con g constante, tenemos que $V(x, t) = -mgx$, que corresponde a un campo uniforme.

2.1.2. Transformaciones de simetría generadas por una constante de movimiento determinada

Sea el operador hermiteano A :

$$A = \frac{p^2}{2m} e^{-2\gamma t} + \frac{\gamma}{2} (xp + px) + \frac{m\omega_0^2}{2} x^2 e^{2\gamma t}, \quad (2.5)$$

éste operador es una constante de movimiento si elegimos al operador hamiltoniano como:

$$H = \frac{p^2}{2m} e^{-2\gamma t} + \frac{m\omega_0^2}{2} x^2 e^{2\gamma t}.$$

En efecto, primero note que la parcial de A con respecto a t es:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = -\frac{\gamma}{m} p^2 e^{-2\gamma t} + \gamma m \omega_0^2 x^2 e^{2\gamma t}.$$

**CAPÍTULO 2. SIMETRÍAS DEL HAMILTONIANO Y OPERADORES
CONSERVADOS**
2.1. EJEMPLOS

Por otro lado, el conmutador entre A y H es:

$$\begin{aligned}
 [A, H] &= \left[\frac{p^2}{2m} e^{-2\gamma t} + \frac{\gamma}{2} (xp + px) + \frac{m\omega_0^2}{2} x^2 e^{2\gamma t}, \frac{p^2}{2m} e^{-2\gamma t} + \frac{m\omega_0^2}{2} x^2 e^{2\gamma t} \right] \\
 &= \left[\frac{\gamma}{2} (xp + px), \frac{p^2}{2m} e^{-2\gamma t} + \frac{m\omega_0^2}{2} x^2 e^{2\gamma t} \right] \\
 &= \frac{\gamma}{2} \frac{1}{2m} e^{-2\gamma t} [xp + px, p^2] + \frac{\gamma}{2} \frac{m\omega_0^2}{2} e^{2\gamma t} [xp + px, x^2] \\
 &= \frac{\gamma}{4m} e^{-2\gamma t} (4i\hbar p^2) + \frac{\gamma m\omega_0^2}{4} e^{2\gamma t} (-4i\hbar x^2) \\
 &= i\hbar \frac{\gamma}{m} p^2 e^{-2\gamma t} - i\hbar \gamma m\omega_0^2 x^2 e^{2\gamma t}.
 \end{aligned}$$

Entonces:

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [A, H] = -\frac{\gamma}{m} p^2 e^{-2\gamma t} + \gamma m\omega_0^2 x^2 e^{2\gamma t} + \frac{1}{i\hbar} \left(i\hbar \frac{\gamma}{m} p^2 e^{-2\gamma t} - i\hbar \gamma m\omega_0^2 x^2 e^{2\gamma t} \right) = \mathbf{0}.$$

Calculemos la acción de $U_s = \exp(-\frac{i}{\hbar} sA)$ en los operadores x y p con la ayuda de (1.33). Para p se tiene que:

$$U_s^\dagger p U_s = p + \frac{is}{\hbar} [A, p] + \frac{1}{2!} \left(\frac{is}{\hbar} \right)^2 [A, [A, p]] + \frac{1}{3!} \left(\frac{is}{\hbar} \right)^3 [A, [A, [A, p]]] + \dots \quad (2.6)$$

Calculemos algunos de los conmutadores:

$$\begin{aligned}
 [A, p] &= \left[\frac{p^2}{2m} e^{-2\gamma t} + \frac{\gamma}{2} (xp + px) + \frac{m\omega_0^2}{2} x^2 e^{2\gamma t}, p \right] \\
 &= \frac{\gamma}{2} [xp + px, p] + \frac{m\omega_0^2}{2} e^{2\gamma t} [x^2, p] \\
 &= \frac{\gamma}{2} (2i\hbar p) + \frac{m\omega_0^2}{2} e^{2\gamma t} (2i\hbar x) \\
 &= i\hbar (\gamma p + m\omega_0^2 e^{2\gamma t} x),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [A, [A, p]] &= [A, i\hbar (\gamma p + m\omega_0^2 e^{2\gamma t} x)] \\
 &= i\hbar \{ \gamma [A, p] + m\omega_0^2 e^{2\gamma t} [A, x] \} \\
 &= i\hbar \left\{ \gamma i\hbar (\gamma p + m\omega_0^2 e^{2\gamma t} x) + m\omega_0^2 e^{2\gamma t} i\hbar \left(-\frac{p}{m} e^{-2\gamma t} - \gamma x \right) \right\} \\
 &= (i\hbar)^2 (\gamma^2 - \omega_0^2) p,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [A, [A, [A, p]]] &= [A, (i\hbar)^2 (\gamma^2 - \omega_0^2) p] \\
 &= (i\hbar)^2 (\gamma^2 - \omega_0^2) [A, p] \\
 &= (i\hbar)^2 (\gamma^2 - \omega_0^2) i\hbar (\gamma p + m\omega_0^2 e^{2\gamma t} x) \\
 &= (i\hbar)^3 (\gamma^2 - \omega_0^2) (\gamma p + m\omega_0^2 e^{2\gamma t} x),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [A, [A, [A, [A, p]]]] &= [A, (i\hbar)^3 (\gamma^2 - \omega_0^2) (\gamma p + m\omega_0^2 e^{2\gamma t} x)] \\
 &= (i\hbar)^3 (\gamma^2 - \omega_0^2) [A, \gamma p + m\omega_0^2 e^{2\gamma t} x] \\
 &= (i\hbar)^3 (\gamma^2 - \omega_0^2) i\hbar (\gamma^2 - \omega_0^2) p \\
 &= (i\hbar)^4 (\gamma^2 - \omega_0^2)^2 p.
 \end{aligned}$$

Consideremos solo los términos con potencias impares en s :

$$\begin{aligned}
 S_I &= \left\{ \frac{is}{\hbar} i\hbar + \frac{1}{3!} \left(\frac{is}{\hbar} \right)^3 (i\hbar)^3 (\gamma^2 - \omega_0^2) + \frac{1}{5!} \left(\frac{is}{\hbar} \right)^5 (i\hbar)^5 (\gamma^2 - \omega_0^2)^2 + \dots \right\} (\gamma p + m\omega_0^2 e^{2\gamma t} x) \\
 &= \left\{ -s - \frac{s^3}{3!} (\gamma^2 - \omega_0^2) - \frac{s^5}{5!} (\gamma^2 - \omega_0^2)^2 + \dots \right\} (\gamma p + m\omega_0^2 e^{2\gamma t} x) \\
 &= \left\{ -s + \frac{s^3}{3!} (\omega_0^2 - \gamma^2) - \frac{s^5}{5!} (\omega_0^2 - \gamma^2)^2 + \dots \right\} (\gamma p + m\omega_0^2 e^{2\gamma t} x) \\
 &= \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{s^{2n+1}}{(2n+1)!} (\omega_0^2 - \gamma^2)^n \right\} (\gamma p + m\omega_0^2 e^{2\gamma t} x) \\
 &= \left\{ -\frac{1}{\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}} \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{s^{2n+1}}{(2n+1)!} \left(\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2} \right)^{2n+1} \right\} (\gamma p + m\omega_0^2 e^{2\gamma t} x) \\
 &= -\frac{1}{\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}} \sin \left(\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2} s \right) (\gamma p + m\omega_0^2 e^{2\gamma t} x).
 \end{aligned}$$

Ahora, consideremos los términos con potencias pares en s :

$$\begin{aligned}
 S_P &= \left\{ 1 + \frac{1}{2!} \left(\frac{is}{\hbar} \right)^2 (i\hbar)^2 (\gamma^2 - \omega_0^2) + \frac{1}{4!} \left(\frac{is}{\hbar} \right)^4 (i\hbar)^4 (\gamma^2 - \omega_0^2)^2 + \dots \right\} p \\
 &= \left\{ 1 - \frac{s^2}{2!} (\omega_0^2 - \gamma^2) + \frac{s^4}{4!} (\omega_0^2 - \gamma^2)^2 + \dots \right\} p \\
 &= \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{s^{2n}}{(2n)!} (\omega_0^2 - \gamma^2)^n \right\} p \\
 &= \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{s^{2n}}{(2n)!} \left(\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2} \right)^{2n} \right\} p \\
 &= \cos \left(\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2} s \right) p.
 \end{aligned}$$

Por tanto:

$$U_s^\dagger p U_s = \cos \left(\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2} s \right) p - \frac{1}{\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}} \sin \left(\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2} s \right) (\gamma p + m\omega_0^2 e^{2\gamma t} x).$$

Seguindo la idea que se tuvo para hallar $U_s^\dagger p U_s$, para el operador x se tiene que:

$$U_s^\dagger x U_s = \cos \left(\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2} s \right) x + \frac{1}{\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}} \sin \left(\sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2} s \right) \left(\frac{p}{m} e^{-2\gamma t} + \gamma x \right).$$

Finalmente, de acuerdo a la proposición 2.2 estas transformaciones deben ser una simetría para el operador H .

2.1.3. Un sistema tridimensional

Sea el operador Hamiltoniano:

$$H = \frac{1}{2m} \left[\left(p_x + \frac{eB}{2c} y \right)^2 + \left(p_y - \frac{eB}{2c} x \right)^2 + p_z^2 \right],$$

el cual corresponde a una partícula cargada de masa m y carga eléctrica e en un campo magnético uniforme B en la dirección z .

**CAPÍTULO 2. SIMETRÍAS DEL HAMILTONIANO Y OPERADORES
CONSERVADOS**

2.1. EJEMPLOS

Además, consideremos el operador hermiteano:

$$A = \left(\frac{1}{2}x - \frac{c}{eB}p_y \right) \cos(\omega t) - \left(\frac{1}{2}y + \frac{c}{eB}p_x \right) \sin(\omega t),$$

donde $\omega \equiv eB/mc$. Dicho operador es una constante de movimiento para el operador H , en efecto:

$$\begin{aligned} [A, H] &= \frac{\cos(\omega t)}{2m} \left\{ \frac{1}{2} \left[x, \left(p_x + \frac{eB}{2c}y \right)^2 \right] - \frac{c}{eB} \left[p_y, \left(p_x + \frac{eB}{2c}y \right)^2 \right] \right\} \\ &\quad - \frac{\sin(\omega t)}{2m} \left\{ \frac{1}{2} \left[y, \left(p_y - \frac{eB}{2c}x \right)^2 \right] + \frac{c}{eB} \left[p_x, \left(p_y - \frac{eB}{2c}x \right)^2 \right] \right\} \\ &= \frac{\cos(\omega t)}{2m} \left\{ \frac{1}{2} \left(2i\hbar p_x + \frac{eB}{c}i\hbar y \right) - \frac{c}{eB} \left(-\frac{eB}{c}i\hbar p_x - \frac{1}{4} \left(\frac{eB}{c} \right)^2 2i\hbar y \right) \right\} \\ &\quad - \frac{\sin(\omega t)}{2m} \left\{ \frac{1}{2} \left(2i\hbar p_y - \frac{eB}{c}i\hbar x \right) + \frac{c}{eB} \left(\frac{eB}{c}i\hbar p_y - \frac{1}{4} \left(\frac{eB}{c} \right)^2 2i\hbar x \right) \right\} \\ &= -i\hbar \left\{ -\omega \cos(\omega t) \left(\frac{1}{2}y + \frac{c}{eB}p_x \right) - \omega \sin(\omega t) \left(\frac{1}{2}x - \frac{c}{eB}p_y \right) \right\} \\ &= -i\hbar \frac{\partial A}{\partial t}, \end{aligned}$$

o bien:

$$i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} + [A, H] = \mathbf{0}.$$

Ahora, calculemos los conmutadores del operador A con los operadores x , y , p_x y p_y (para los operadores z y p_z son evidentemente iguales a cero):

$$\begin{aligned} [A, x] &= \left[\left(\frac{1}{2}x - \frac{c}{eB}p_y \right) \cos(\omega t) - \left(\frac{1}{2}y + \frac{c}{eB}p_x \right) \sin(\omega t), x \right] \\ &= -\sin(\omega t) \frac{c}{eB} [p_x, x] \\ &= -\sin(\omega t) \frac{c}{eB} (-i\hbar) \\ &= i\hbar \sin(\omega t) \frac{c}{eB}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [A, y] &= \left[\left(\frac{1}{2}x - \frac{c}{eB}p_y \right) \cos(\omega t) - \left(\frac{1}{2}y + \frac{c}{eB}p_x \right) \sin(\omega t), y \right] \\ &= -\cos(\omega t) \frac{c}{eB} [p_y, y] \\ &= -\cos(\omega t) \frac{c}{eB} (-i\hbar) \\ &= i\hbar \cos(\omega t) \frac{c}{eB}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} [A, p_x] &= \left[\left(\frac{1}{2}x - \frac{c}{eB}p_y \right) \cos(\omega t) - \left(\frac{1}{2}y + \frac{c}{eB}p_x \right) \sin(\omega t), p_x \right] \\ &= \frac{\cos(\omega t)}{2} [x, p_x] \\ &= i\hbar \frac{\cos(\omega t)}{2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [A, p_y] &= \left[\left(\frac{1}{2}x - \frac{c}{eB}p_y \right) \cos(\omega t) - \left(\frac{1}{2}y + \frac{c}{eB}p_x \right) \sin(\omega t), p_y \right] \\
 &= -\frac{\sin(\omega t)}{2} [y, p_y] \\
 &= -i\hbar \frac{\sin(\omega t)}{2}.
 \end{aligned}$$

Empleando la ecuación (1.33) se tiene que la acción de $U_s = \exp\left(-\frac{is}{\hbar}A\right)$ en los operadores x , y , p_x y p_y es:

$$U_s^\dagger x U_s = x - \frac{sc}{eB} \sin(\omega t) = x - \frac{s}{m\omega} \sin(\omega t),$$

$$U_s^\dagger y U_s = y - \frac{sc}{eB} \cos(\omega t) = y - \frac{s}{m\omega} \cos(\omega t),$$

$$U_s^\dagger p_x U_s = p_x - \frac{s}{2} \cos(\omega t),$$

$$U_s^\dagger p_y U_s = p_y + \frac{s}{2} \sin(\omega t).$$

De acuerdo con la proposición 2.2 estas transformaciones deben ser una simetría para el operador H .

2.1.4. Invariancia de un operador hamiltoniano

Consideremos el siguiente operador hermiteano,

$$A = x - \frac{t}{m}p + \frac{kt^3}{3m} \quad (2.7)$$

dicho operador es una constante de movimiento si elegimos H como

$$H = \frac{1}{2m}p^2 - ktx, \quad (2.8)$$

donde k es una constante.

Empleando (1.33) es fácil verificar que la acción de $U_\varphi = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi A}$ en los operadores x y p es:

$$U_\varphi^\dagger x U_\varphi = x - \frac{t\varphi}{m} \quad (2.9a)$$

$$U_\varphi^\dagger p U_\varphi = p - \varphi \quad (2.9b)$$

Por otro lado, hallemos el segundo término de (2.1). Primero simplifiquemos el operador $e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi(-x+A)}$ mediante el uso de (1.32) y de

$$\left[\frac{i}{\hbar}\varphi x, -\frac{i}{\hbar}\varphi A \right] = \frac{\varphi^2}{\hbar^2} \left[x, x - \frac{t}{m}p + \frac{kt^3}{3m} \right] = -\frac{i}{\hbar} \frac{t\varphi^2}{m}$$

por tanto,

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi(-x+A)} = e^{\frac{i}{\hbar}\varphi x} e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi A} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{t\varphi^2}{2m}}$$

o bien,

$$U_\varphi = e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi A} = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{t\varphi^2}{2m}} e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi x} e^{-\frac{i}{\hbar}\varphi(-x+A)}. \quad (2.10)$$

Luego, derivando U_φ con respecto a t ,

**CAPÍTULO 2. SIMETRÍAS DEL HAMILTONIANO Y OPERADORES
CONSERVADOS**

2.1. EJEMPLOS

$$\frac{\partial U_\varphi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \frac{\varphi^2}{2m} U_\varphi + e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{t\varphi^2}{2m}} e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi x} \frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi(-x+A)}. \quad (2.11)$$

Ahora, hallemos $\frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi(-x+A)}$ teniendo en cuenta que,

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} (-x+A), -x+A \right] = \left[-\frac{1}{m} p + \frac{kt^2}{m}, -\frac{t}{m} p + \frac{kt^3}{3m} \right] = \mathbf{0}$$

por lo que²,

$$\frac{\partial}{\partial t} (-x+A)^n = n (-x+A)^{n-1} \frac{\partial}{\partial t} (-x+A) \quad (2.12)$$

entonces,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi(-x+A)} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \varphi \right)^n \frac{\partial}{\partial t} (-x+A)^n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\frac{i}{\hbar} \varphi \right)^n n (-x+A)^{n-1} \frac{\partial}{\partial t} (-x+A) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \varphi e^{-\frac{i}{\hbar} \varphi(-x+A)} \frac{\partial}{\partial t} (-x+A) \end{aligned}$$

sustituyendo en (2.11),

$$\frac{\partial U_\varphi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \frac{\varphi^2}{2m} U_\varphi - \frac{i}{\hbar} \varphi U_\varphi \frac{\partial}{\partial t} (-x+A) \quad (2.13)$$

por tanto,

$$i\hbar U_\varphi^\dagger \frac{\partial U_\varphi}{\partial t} = \frac{\varphi^2}{2m} + \varphi \frac{\partial}{\partial t} (-x+A) = \frac{\varphi^2}{2m} - \frac{\varphi}{m} p + \frac{kt^2 \varphi}{m}. \quad (2.14)$$

Finalmente, calculemos la acción de U_φ sobre H empleando las ecuaciones (2.3),

$$\begin{aligned} U_\varphi^\dagger H U_\varphi &= \frac{1}{2m} U_\varphi^\dagger p U_\varphi U_\varphi^\dagger p U_\varphi - kt U_\varphi^\dagger x U_\varphi \\ &= \frac{1}{2m} (p - \varphi)(p - \varphi) - ktx + \frac{kt^2 \varphi}{m} \\ &= \frac{1}{2m} p^2 - \frac{\varphi}{m} p + \frac{\varphi^2}{2m} - ktx + \frac{kt^2 \varphi}{m} \\ &= \left(\frac{1}{2m} p^2 - ktx \right) + \left(\frac{\varphi^2}{2m} - \frac{\varphi}{m} p + \frac{kt^2 \varphi}{m} \right) \\ &= H + i\hbar U_\varphi^\dagger \frac{\partial U_\varphi}{\partial t}. \end{aligned}$$

Es decir, H es invariante bajo el grupo uniparamétrico de transformaciones unitarias U_φ .

Cabe señalar que el segundo término de la ecuación (2.1) en general no siempre se puede calcular de forma directa, sin embargo, en ciertas ocasiones se pueden emplear otras herramientas para poder hallarlo tal y como se hizo en este ejemplo.

²Ver Apéndice B.

Capítulo 3

Conclusiones

El estudio de las simetrías en la física merece atención especial, ya que las leyes fundamentales resultan de ellas, además de ayudarnos a comprender mejor ciertos aspectos del sistema con el que se esté trabajando. Otra característica importante es que nos provee herramientas que nos facilitan la solución de ciertos problemas, como resolver una ecuación de manera sencilla. Existen simetrías discretas (inversión temporal, espacial, etc.) y continuas (rotaciones, traslaciones, etc), pero estas últimas son las que resultan más interesantes pues están relacionadas con cantidades conservadas.

En el caso de la mecánica clásica si la hamiltoniana es invariante ante una familia uniparamétrica de transformaciones canónicas entonces el generador de dichas transformaciones se conserva, y de manera equivalente toda cantidad conservada genera un grupo uniparamétrico de transformaciones canónicas que dejan invariante a la hamiltoniana. En contraste, en la mecánica cuántica el estudio de las simetrías (en la mayoría de los textos tradicionales) solo se restringe a aquellas que son generadas por cantidades conservadas no dependientes del tiempo, en este caso basta con que esta cantidad conmute con el operador hamiltoniano para que la condición de invariancia se cumpla. No obstante, este no es el caso más general.

Precisamente, el objetivo principal de este trabajo fue dar una definición de invariancia en el hamiltoniano bajo una transformación unitaria que pudiese depender del tiempo (ver (2.1)). Como vimos dicha definición se reduce al caso en el que las transformaciones no dependen del tiempo. Análogamente al caso clásico, cualquier invariancia del operador hamiltoniano está relacionada con una cantidad conservada (ecuación (2.2)); además, para garantizar la existencia de esta cantidad conservada basta con que el operador hamiltoniano sea invariante bajo una *familia uniparamétrica de transformaciones unitarias* y no necesariamente bajo un grupo. Similarmente, todo operador que satisface (1.56) genera un grupo uniparamétrico de transformaciones unitarias que son una simetría para H . Como puede observarse, las pruebas de estos resultados fundamentales son más sencillas que en el caso clásico, lo cual se debe en parte a que tanto las cantidades conservadas como las transformaciones corresponden a operadores. Por otra parte, hallar explícitamente el operador $i\hbar U_s^\dagger \frac{\partial U_s}{\partial t}$ para verificar si el operador hamiltoniano es invariante bajo una transformación dada no siempre es posible; sin embargo, existen casos en los que empleando ciertos métodos el cálculo puede resultar sencillo, tal y como ocurrió con el ejemplo 2.1.4.

Apéndice A

Proposición A.1. Si A es una constante de movimiento, entonces A^n ($n \in \mathbb{N} \setminus \{1\}$) también lo es.

Prueba: Probémoslo por inducción.

i) Para $n = 2$:

$$\begin{aligned}\frac{\partial A^2}{\partial t} &= A \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial A}{\partial t} A \\ &= -\frac{1}{i\hbar} A [A, H] - \frac{1}{i\hbar} [A, H] A \\ &= -\frac{1}{i\hbar} [A^2, H]\end{aligned}$$

o bien:

$$\frac{\partial A^2}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [A^2, H] = 0$$

Por tanto, se cumple para $n = 2$.

ii) Supongamos que se cumple para $n - 1$, es decir:

$$\frac{\partial A^{n-1}}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [A^{n-1}, H] = 0.$$

Probémoslo para n :

$$\begin{aligned}\frac{\partial A^n}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} (AA^{n-1}) \\ &= \frac{\partial A}{\partial t} A^{n-1} + A \frac{\partial A^{n-1}}{\partial t} \\ &= -\frac{1}{i\hbar} [A, H] A^{n-1} - \frac{1}{i\hbar} A [A^{n-1}, H] \\ &= -\frac{1}{i\hbar} [AA^{n-1}, H] \\ &= -\frac{1}{i\hbar} [A^n, H]\end{aligned}$$

o bien:

$$\frac{\partial A^n}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar} [A^n, H] = 0$$

Así, se cumple para n .

$\therefore A^n$ es una constante de movimiento.

Apéndice B

Proposición B.1. Si $[\frac{\partial B}{\partial t}, B] = \mathbf{0}$, entonces:

$$\frac{\partial B^n}{\partial t} = nB^{n-1} \frac{\partial B}{\partial t}$$

Prueba: Podemos demostrar la proposición por inducción.

i) Para $n = 2$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial B^2}{\partial t} &= B \frac{\partial B}{\partial t} + \frac{\partial B}{\partial t} B \\ &= 2B \frac{\partial B}{\partial t}. \end{aligned}$$

Por tanto, se cumple para $n = 2$.

ii) Supongamos que se cumple para $n - 1$, es decir:

$$\frac{\partial B^{n-1}}{\partial t} = (n-1) B^{(n-1)-1} \frac{\partial B}{\partial t}$$

Probémoslo para n :

$$\begin{aligned} \frac{\partial B^n}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} (B^{n-1} B) \\ &= \frac{\partial B^{n-1}}{\partial t} B + B^{n-1} \frac{\partial B}{\partial t} \\ &= (n-1) B^{n-1} \frac{\partial B}{\partial t} + B^{n-1} \frac{\partial B}{\partial t} \\ &= nB^{n-1} \frac{\partial B}{\partial t}. \end{aligned}$$

Así, se cumple para n .

Bibliografía

- [1] M.G. CALKIN, *Lagrangian and Hamiltonian mechanics*, (World Scientific, Singapore, 1996).
- [2] K. GOTTFRIED and T.-M. YAN, *Quantum Mechanics: Fundamentals*, 2nd ed. (Springer-Verlag, New York, 2003).
- [3] D.T. GREENWOOD, *Classical Dynamics*, 2nd ed. (Dover, New York, 1997).
- [4] E. MERZBACHER, *Quantum Mechanics*, 3rd ed. (Wiley, New York, 1998).
- [5] J. PADE, *Quantum Mechanics for Pedestrians 2: Applications and Extensions*, (Springer, New York, 2014).
- [6] J.J. SAKURAI and J. NAPOLITANO, *Modern Quantum Mechanics*, 2nd ed. (Addison-Wesley, San Francisco, 2011).
- [7] G.F. TORRES DEL CASTILLO, *The generating function of a canonical transformation*, *Rev. Mex. Fís. E* **57** (2011) 158.
- [8] G.F. TORRES DEL CASTILLO, *Solutions of the Schrödinger equation making use of time-dependent constant of motion*, *Rev. Mex. Fís.* **61** (2015) 376.
- [9] G.F. TORRES DEL CASTILLO and J.E. HERRERA FLORES, *Symmetries of the Hamiltonian operator and constants of motion*, *Rev. Mex. Fís.* **62** (2016) (por aparecer).
- [10] S. WEINBERG, *Lectures on Quantum Mechanics*, (Cambridge University Press, Cambridge, 2013).
- [11] N. ZETTILI, *Quantum Mechanics, Concepts and Applications*, 2nd ed. (Wiley, New York, 2002).