1

Origen de los operadores en la mecánica cuántica

Ana María Cetto, IFUNAM

Seminario del Departamento de Física de Altas Energías, ICN
16 de agosto de 2023

Itinerario

- El campo de punto cero
- Formulación hamiltoniana
- C $\Rightarrow$ Q, una transición irreversible
- Respuesta de la partícula al campo
- Emergencia de los operadores
- Efecto recíproco campo - materia
- Bibliografía

1 El campo de punto cero (CPC)

El campo de vacío -cero fotones, en lenguaje cuántico- es maxwelliano, real y fluctuante, con energía media por modo $\hbar\omega/2$ y densidad espectral de energía (Planck, 1911)

$$\rho(\omega) = \frac{\hbar\omega^3}{2\pi^2 c^3}. \tag{1}$$

La función de correlación temporal es

$$\langle E_k(s)E_j(t)\rangle = \delta_{kj}\varphi(t-s), \tag{2}$$

con función espectral de energía (¡ruido coloreado!)

$$\varphi_o(t-s) = \frac{2\hbar}{3\pi c^3}\int_0^\infty d\omega\, \omega^3 \cos\omega(t-s). \tag{3}$$

A tomarse en cuenta:

Einstein y Hopf (1910): la fuerza del campo sobre un cuerpo polarizable con velocidad $\boldsymbol{v}$ es (por efecto Doppler)

$$\boldsymbol{F} \sim \left(\rho - \tfrac{1}{3}\omega \frac{\partial \rho}{\partial \omega}\right) \boldsymbol{v},$$

$\Rightarrow \rho \sim \omega^3$ es la única coherente con el principio de equivalencia del vacío para todos los observadores inerciales.

Nernst (1916): el CPC es responsable de la estabilidad atómica (para ciertas órbitas), al evitar que el electrón colapse hacia el núcleo.

2 Formulación hamiltoniana

Se trata de un problema típico de la electrodinámica:

$$H_T = \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 + V(\boldsymbol{r}) + H_R, \tag{4}$$

salvo que $\boldsymbol{A}$ es estocástico.
Con acoplamiento minimal,

$$H_I = -\frac{e}{mc}\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{p} + \frac{\boldsymbol{e^2}}{\boldsymbol{2mc^2}}\boldsymbol{A^2}. \tag{5}$$

Usamos norma de Coulomb, $\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A} = 0$.

Desarrollo en ondas planas:

$$\boldsymbol{A} = \sum_{n,\sigma} \left(\frac{\pi \hbar c^2}{V \omega_n} \right)^{1/2} \boldsymbol{\epsilon}_{n\sigma} a_{n\sigma} \exp\left[-i(\omega_n t - \boldsymbol{k}_n \cdot \boldsymbol{r}) \right] + \text{c.c.} \tag{6}$$

$\omega_n = ck_n$ es la frecuencia y $\boldsymbol{\epsilon}_{n\sigma}$ $(\sigma = 1, 2)$ son los vectores de polarización,

$$\boldsymbol{\epsilon}_{n\sigma} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{n\sigma'} = \delta_{\sigma\sigma'}, \quad \boldsymbol{k}_n \cdot \boldsymbol{\epsilon}_{n\sigma} = 0, \tag{7}$$

$$\sum_{\sigma} \epsilon_{n\sigma i} \epsilon_{n\sigma j} = \delta_{ij} - (k_{ni} k_{nj} / k_n^2). \tag{8}$$

Las amplitudes $a_{n\sigma}$ son complejas, estocásticas, adimensionales y estadísticamente independientes:

$$\langle a_{n\sigma} \rangle = 0, \quad \langle a^*_{n\sigma} \rangle = 0, \tag{9}$$

$$\langle a_{n\sigma} a_{n'\sigma'} \rangle = 0, \quad \langle a^*_{n\sigma} a^*_{n'\sigma'} \rangle = 0, \tag{10}$$

$$\langle a_{n\sigma} a^*_{n'\sigma'} \rangle = \delta_{nn'} \delta_{\sigma\sigma'}. \tag{11}$$

Se obtiene así

$$H_R = \frac{1}{8\pi} \int \left(\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2 \right) d^3x = \tfrac{1}{2} \sum_{n,\sigma} \hbar\omega_n a^*_{n\sigma} a_{n\sigma}, \tag{12}$$

de donde

$$\langle H_R(\omega_n, \sigma) \rangle = \tfrac{1}{2} \hbar\omega_n \langle a^*_{n\sigma} a_{n\sigma} \rangle = \tfrac{1}{2} \hbar\omega_n.$$

2.1 Dinámica en la aproximación dipolar

De (4) se derivan las ecuaciones de Hamilton de la partícula,

$$\dot{x}_i = \{x_i, H_T\}, \tag{13}$$

$$\dot{p}_i = \{p_i, H_T\}, \tag{14}$$

donde los PP se calculan con respecto a todas las variables canónicas (partícula y campo). En la aproximación dipolar se obtiene la ecuación de Braffort-Marshall,

$$m\ddot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) + m\tau\dddot{\boldsymbol{x}} + e\boldsymbol{E}(t), \tag{15}$$

donde $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = -\nabla V(\boldsymbol{x})$ y $\tau = 2e^2/3mc^3$; para un electrón, $\tau \approx 10^{-23}$ s.

$\hbar$ entra a través de E, como la medida de la escala de las fluctuaciones cuánticas.

Un tratamiento estadístico conduce a una ecuación para la densidad de probabilidad de las partículas, que en la aproximación markofiana (válida en el régimen cuántico) se reduce a una ecuación de Fokker-Planck.

3 C $\Rightarrow$ Q: una transición irreversible

¿Qué hay detrás de la sustitución de las variables cinemáticas por matrices?

Supongamos que la partícula se conecta al CPC en t_o. Para discutir el efecto de las distintas fuerzas en (15), introducimos

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{(0)} + \boldsymbol{x}^{(1)} + \boldsymbol{x}^{(2)} + \ldots = \boldsymbol{x}^{(0)} + \sum_{s=1} \boldsymbol{x}^{(s)}, \tag{16}$$

donde e es el factor de acoplamiento al campo. Se obtiene así una jerarquía

$$m\ddot{x}_i^{(0)} = f_i(x^{(0)}) + m\tau \dddot{x}_i^{(0)}, \tag{17}$$

$$m\ddot{x}_i^{(1)} = \left.\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right|_{x^{(0)}} x_j^{(1)} + m\tau \dddot{x}_i^{(1)} + eE_i(t), \tag{18}$$

$$m\ddot{x}_i^{(2)} - \left.\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right|_{x^{(0)}} x_j^{(2)} = \frac{1}{2} \left.\frac{\partial^2 f_i}{\partial x_j \partial x_k}\right|_{x^{(0)}} x_j^{(1)} x_k^{(1)} + m\tau \dddot{x}_i^{(2)}, \tag{19}$$

......

En (17) puede tomarse $m\tau\dddot{x}_i^{(0)} \approx \tau(df_i/dt)$. La solución decae en un tiempo τ_d determinado por $|df_i/dt|$ ($\tau_d \approx 10^{-11}s$ para un sistema del tamaño de un átomo) y se pierde así la información sobre las condiciones iniciales. Lo mismo sucede con la parte homogénea de (18).

La solución inhomogénea es puramente estocástica y no decreciente,

$$x_i^{(1)} = e\int_{-\infty}^{t} ds\mathcal{G}_{ik}(t,s)E_k(s), \tag{20}$$

con la función de Green

$$\mathcal{G}_{ik}(t,s) = \left.\frac{\partial x_i(t)}{\partial p_k(s)}\right|_{x^{(0)}}, \tag{21}$$

y $\partial x_i(t)/\partial p_k(s)$calculada a orden cero en e. Se obtiene

$$x_i^{(1)} = e \int_{-\infty}^{t} ds \left. \frac{\partial x_i(t)}{\partial p_k(s)} \right|_{x^{(0)}} E_k(s), \tag{22}$$

$$p_i^{(1)} = e \int_{-\infty}^{t} ds \left. \frac{\partial p_i(t)}{\partial p_k(s)} \right|_{x^{(0)}} E_k(s). \tag{23}$$

$\Rightarrow$ Al cabo de un tiempo τ_d, $x_i^{(1)}(t)$ and $p_i^{(1)}(t)$ evol*ucionan en respuesta al* CPC, a una tasa determinada por $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$. Algo similar sucede con los órdenes superiores.

La dinámica ha sufrido un cambio cualitativo irreversible: de ser determinista en t_0 bajo la acción de $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$ se convierte en estocástica bajo el control del CPC.

Detrás de la mecánica de esta evolución se esconde una extraordinaria evolución de la cinemática.

3.1 Respuesta de la partícula al campo

Calculemos el PP

$$\{x_j, p_i\}_{qp} = \delta_{ij}, \tag{24}$$

with $i, j = 1, 2, 3$. El conjunto completo de variables canónicas es (usamos modos discretos para el campo)

$$(q; p) = (x_i, q_\alpha; p_i, p_\alpha)\,. \tag{25}$$

A t_o,

$$(q_o; p_o) = (x_{io}, q_{\alpha o}; p_{io}, p_{\alpha o})\,, \tag{26}$$

con x_{io},p_{io} los valores iniciales de la partícula y $q_{\alpha o}, p_{\alpha o}$ los del CPC.

El sistema completo es hamiltoniano, por lo tanto

$$\{x, p\}_{qp} = \{x, p\}_{q_o p_o} \tag{27}$$

$$= \{x, p\}_{x_o p_o} + \{x, p\}_{q_{\alpha o} p_{\alpha o}}$$

y de acuerdo con (24),

$$\{x_i(t), p_j(t)\}_{x_o p_o} + \{x_i(t), p_j(t)\}_{q_{\alpha o} p_{\alpha o}} = \delta_{ij}. \tag{28}$$

Para $t > \tau_d$, la partícula pierde memoria de sus condiciones iniciales $\boldsymbol{x}_o, \boldsymbol{p}_o$,

$$\Rightarrow \quad \{x_i(t), p_j(t)\}_{q_o p_o} \xrightarrow[t>\tau_d]{} \{x_i(t), p_j(t)\}_{q_{\alpha o} p_{\alpha o}}. \tag{29}$$

La cinemática queda entonces definida por las variables del campo:

$$\{x_i(t), p_j(t)\}_{q_{\alpha o} p_{\alpha o}} = \delta_{ij} \qquad (t > \tau_d). \tag{30}$$

Pasando a las variables normales a_α, a_α^*, introducidas en (6),

$$\omega_\alpha q_\alpha^o = \sqrt{\hbar\omega_\alpha/2}(a_\alpha + a_\alpha^*), \; p_\alpha^o = -i\sqrt{\hbar\omega_\alpha/2}(a_\alpha - a_\alpha^*), \tag{31}$$

obtenemos el PP transformado

$$[f, g] \equiv \sum_\alpha \left(\frac{\partial f}{\partial a_\alpha} \frac{\partial g}{\partial a_\alpha^*} - \frac{\partial g}{\partial a_\alpha} \frac{\partial f}{\partial a_\alpha^*} \right) = i\hbar \{f, g\}_{q_{\alpha o} p_{\alpha o}}. \tag{32}$$

En particular para x_i, p_j,

$$[x_i, p_j] = i\hbar \{x_i, p_j\}_{q_{\alpha o} p_{\alpha o}} . \tag{33}$$

De acuerdo con (30), a $t > \tau_d$ el PP transformado debe cumplir

$$[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \qquad (t > \tau_d) \tag{34}$$

La relación simpléctica entre x_i y p_j queda determinada por su dependencia de las variables de los modos normales del CPC, con la escala dada por $\hbar$.

La estructura simpléctica se hereda de la MC, pero las cantidades involucradas tienen ahora un significado diferente: expresan la respuesta de la partícula al campo.

3.2 Emergencia de los operadores: desentrañando el enigma

Como (34) es independiente del estado n, podemos escribir, usando (32) (en 1D, de ahora en adelante)

$$[x, p]_{nn} = \sum_{\alpha} \left(\frac{\partial x_n}{\partial a_\alpha} \frac{\partial p_n}{\partial a_\alpha^*} - \frac{\partial p_n}{\partial a_\alpha} \frac{\partial x_n}{\partial a_\alpha^*} \right) = i\hbar. \tag{35}$$

Las variables x_n y $p_n =| m\dot{x}_n$ son necesariamente lineales en (a_α, a_α^*) y los modos del campo son aquellos a los que la partícula responde, o sea que la pueden llevar de n a k,

$$x_n(t) = \sum_k x_{nk} a_{nk} e^{-i\omega_{kn}t} + \text{c.c.}, \qquad p_n(t) = \sum_k p_{nk} a_{nk} e^{-i\omega_{kn}t} + \text{c.c.}, \tag{36}$$

con x_{nk}, $p_{nk} = -im\omega_{kn}x_{nk}$ los coeficientes de respuesta. Introduciendo estas expresiones en Eq. (35) obtenemos

$$[x, p]_{nn} = 2im \sum_k \omega_{kn} \left| x_{nk} \right|^2 = i\hbar. \tag{37}$$

Como $a_{nk}, a_{n'k}$ son independientes, de (32) y (36) tenemos que

$$[x, p]_{nn'} = i\hbar\delta_{nn'}. \tag{38}$$

x_{nk} y a_{nk} se refieren a la transición $n \to k$ con ω_{kn}, y x_{kn}, a_{kn} se refieren a la transición inversa, con $\omega_{nk} = -\omega_{kn}$; por lo tanto, de (36), $x^*_{nk}(\omega_{nk}) = x_{kn}(\omega_{kn})$, $p^*_{nk}(\omega_{nk}) = p_{kn}(\omega_{kn})$, $a^*_{nk}(\omega_{nk}) = a_{kn}(\omega_{kn})$, y (38) toma la forma

$$\sum_k (x_{nk}p_{kn'} - p_{n'k}x_{kn}) = i\hbar\delta_{nn'}. \tag{39}$$

Tal como observó Born en 1925, x_{nk} y p_{nk} son los elementos de las matrices $\hat{x}$ y $\hat{p}$, con tantas filas y columnas como estados diferentes haya, de modo que (39) se convierte en

$$[\hat{x}, \hat{p}]_{nn'} = i\hbar\delta_{nn'}, \tag{40}$$

o sea

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \tag{41}$$

Como resultado de la evolución de la cinemática, el PP original de x, p se ha convertido en el conmutador cuántico.

- La relación entre PP y conmutadores establecida por Dirac encuentra una explicación física: *el conmutador ya no es un postulado, sino una expresión de la respuesta lineal de la partícula al campo.*
- Los operadores $\hat{x}, \hat{p}$ no describen trayectorias, por lo que no hay una descripción espacio-fase asociada a ellos.
- A expensas de una descripción espacio-temporal de la dinámica detallada, el formalismo del espacio de Hilbert proporciona una descripción compacta y elegante de la evolución del sistema basada en los elementos que conectan los estados cuánticos.
- Estos resultados ofrecen respuesta a una vieja e intrigante cuestión: ¿cómo es que la descripción de los estados estacionarios atómicos se hace en términos de las transiciones entre estos estados?

4 Efecto recíproco campo - materia

4.1 Descripción de una componente de campo en interacción con la materia

La descripción debe servir para expresar cualquier componente eléctrica o magnética del campo, ya sea el CPC solo o en combinación con un campo externo.

Sean $\mathrm{q_n}(t)$, $\mathrm{p_n}(t)$ las variables canónicas del campo de frecuencia ω en el estado n,

$$\mathrm{q_n}(t) = \sum_{\mathrm{n'}} \mathrm{q_{nn'}} a_{\mathrm{nn'}} e^{-i\omega_{\mathrm{n'n}} t} + \mathrm{c.c.}, \;\; \mathrm{p_n}(t) = \sum_{\mathrm{n'}} \mathrm{p_{nn'}} a_{\mathrm{nn'}} e^{-i\omega_{\mathrm{n'n}} t} + \mathrm{c.c.}, \tag{42}$$

con

$$\mathrm{p_{nn'}} = -i\omega_{\mathrm{n'n}} \mathrm{q_{nn'}}. \tag{43}$$

Dado que esta componente del campo corresponde a una única frecuencia ω, sólo contiene términos con $|\omega_{\mathrm{n'n}}| = \omega$, o $\omega_{\mathrm{n'n}} = \pm\omega$:

$$\mathrm{q_n}(t) = \mathrm{q_{nn+1}} a_{\mathrm{nn+1}} e^{-i\omega t} + \mathrm{q_{nn-1}} a_{\mathrm{nn-1}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega \mathrm{t}} + \mathrm{c.c.} \tag{44}$$

$$\mathrm{p_n}(t) = -i\omega \mathrm{q_{nn+1}} a_{\mathrm{nn+1}} e^{-i\omega t} + i\omega \mathrm{q_{nn-1}} a_{\mathrm{nn-1}} e^{i\omega t} + c.c, \tag{45}$$

con

$$\omega \mathrm{q_{nn+1}} - i\mathrm{p_{nn+1}} = 0, \qquad \omega \mathrm{q_{nn-1}} + i\mathrm{p_{nn-1}} = 0. \tag{46}$$

En analogía con el caso de la partícula, identificamos $\mathrm{q_{nn+1}}, \mathrm{q_{nn-1}}$ con los *coeficientes de respuesta* que determinan el cambio de estado del campo en interacción con la materia, de n a $\mathrm{n} \pm 1$.

4.2 Los operadores del campo

Como las componentes de distintas frecuencias son independientes entre sí, el PP de las variables (canónicas) de la componente de frecuencia ω se toma sólo con respecto a las cuadraturas (q, p) del campo de esa frecuencia,

$$\{\mathrm{q_n}(t), \mathrm{p_n}(t)\}_{qp} = 1. \tag{47}$$

Pasando de (q, p) a (a, a^*), el PP se transforma en

$$[\mathrm{q_n}(t), \mathrm{p_n}(t)] = i\hbar, \tag{48}$$

o sea, de (44) y (45),

$$\mathrm{q_{nn'}}\mathrm{p^*}_{\mathrm{nn'}} - \mathrm{p_{nn'}}\mathrm{q^*}_{\mathrm{nn'}} = i\hbar. \tag{49}$$

De (44) aplicada a n y n', observamos que

$$\mathrm{q^*}_{\mathrm{nn'}}(\omega_{\mathrm{n'n}}) = \mathrm{q_{n'n}}(\omega_{\mathrm{nn'}}),\ \mathrm{p^*}_{\mathrm{nn'}}(\omega_{\mathrm{n'n}}) = \mathrm{p_{n'n}}(\omega_{\mathrm{nn'}}),$$

$$a^*_{\mathrm{nn'}}(\omega_{\mathrm{n'n}}) = a_{\mathrm{n'n}}(\omega_{\mathrm{nn'}}), \tag{50}$$

por lo que (49) se reescribe

$$\mathrm{q}_{\mathrm{nn}'}\mathrm{p}_{\mathrm{n}'\mathrm{n}} - \mathrm{p}_{\mathrm{nn}'}\mathrm{q}_{\mathrm{n}'\mathrm{n}} = i\hbar. \tag{51}$$

O con $\mathrm{q}_{\mathrm{nn}'}$, $\mathrm{p}_{\mathrm{n}'\mathrm{n}}$ los elementos de matrices $\hat{\mathrm{q}}$, $\hat{\mathrm{p}}$,

$$[\hat{\mathrm{q}}, \hat{\mathrm{p}}] = i\hbar, \tag{52}$$

para cualquier estado n del campo.

El conmutador es el PP de las variables $\mathrm{q}_{\mathrm{n}}(t), \mathrm{p}_{\mathrm{n}}(t)$, *con respecto a las variables normales* $a; a^*$ *de los modos que pueden llevarlo a un estado* $\mathrm{n}' = \mathrm{n} \pm 1$.

Nuevamente se preserva la estructura simpléctica.

De (43) tenemos que $\mathrm{p}_{\mathrm{nn}'} + i\omega_{\mathrm{n}'\mathrm{n}}\mathrm{q}_{\mathrm{nn}'} = 0$, por lo tanto la matriz normalizada $\hat{a}$ y su adjunta

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\omega\hat{\mathrm{q}} + i\hat{\mathrm{p}}),\ \hat{a}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega}}(\omega\hat{\mathrm{q}} - i\hat{\mathrm{p}}), \tag{53}$$

tienen elementos diagonales inmediatamente arriba y abajo de la diagonal principal, o sea son operadores de aniquilación y creación. De (52) se obtiene

$$\left[\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}\right] = 1, \tag{54}$$

la piedra angular de la teoría cuántica de la radiación. *El conmutador ya no es un postulado, es el PP de las variables del campo en interacción con la materia cuantizada.*

Como los resultados se refieren al campo que intercambia energía como resultado de su interacción con la materia cuantizada, no nos dicen nada sobre la naturaleza (cuántica o no) del campo de radiación libre.

Bibliografía

- On the physical origin of the quantum operator formalism. A M Cetto, L de la Peña y A Valdés-Hernández, *Quantum Stud. Math. Found.* Doi:10.1007/s40509-020-00241-7 (2021)
- Relevance of stochasticity for the emergence of quantization LP, AMC y AVH, *EPJ-ST* 230(4), 923-929, 10.1140/epjs/ s11734-021-00066-4 (2021)
- Role of the electromagnetic vacuum in the transition from classical to quantum mechanics. AMC, LP, *Found. Phys.* 52:84 (2022) https://doi.org/10.1007/s10701-022-00605-6
- Revisiting canonical quantization of radiation: The role of the vacuum field AMC, LP y J.F. Pérez-Barragán, *EPS*, aceptado para su publicación (2023)
- *The Emerging Quantum. The physics behind quantum mechanics.* LP, AMC y AVH, Springer Verlag, Berlin, 2015