

MECÁNICA CUÁNTICA

Las siguientes páginas pretenden ser unos apuntes para sustituir, o al menos complementar, a los "apuntes oficiales".

Hay dos razones que me han animado a hacerlo: la primera es la notación, que es la que he seguido en clase, y la segunda es el "estilo", que es un poquito menos informal que en los apuntes oficiales. También en esto se parecen más al modo en que he contado las cosas en clase. Ambos cambios (notación y forma) los he adoptado porque pienso que facilitan la comprensión de la materia.

Las primeras páginas no pretendían ser nada. Las escribí sólo para prepararme las clases. Pero al poco decidí que redactando con un poco más de cuidado podrían ser útiles para los alumnos. Si resulta ser así, pues estupendo. Y si no, pues cualquier crítica o comentario será bienvenido (pepin@esi.us.es).

Sistema: Cualquier sistema se puede considerar constituido por N partículas. Esto es igual que en la mecánica clásica.

Nosotros, en la mayoría (por no decir en todas) de las ocasiones trataremos el ejemplo más simple: 1 sola partícula.

Estado: El estado de un sistema físico queda definido por un vector abstracto que "vive" en cierto espacio vectorial, denominado espacio de estados. Matemáticamente este espacio se denomina espacio de Hilbert.

En la mecánica clásica conocer el estado se conoce todo del sistema. En concreto el valor de cualquier magnitud física.

En mecánica cuántica conocer el estado implica conocer lo que más se puede conocer del sistema. Pero en la mecánica cuántica conocer el estado no significa conocer los valores de las magnitudes físicas del sistema (al menos no de todas). De hecho, se puede decir que en algunos estados ciertas magnitudes no tienen valores.

Magnitudes físicas: En mecánica cuántica las magnitudes se representan mediante operadores. Es decir, a cada magnitud física se le asocia un operador.

Ahora debemos definir lo que es un operador. Matemáticamente es una aplicación, es decir una regla que asocia a cada elemento de un conjunto un elemento de ese mismo conjunto o de otro.

En nuestro caso el operador aplica a cada elemento del espacio de estados (un vector) otro elemento del mismo espacio.

Lo representaremos con las mismas letras con que ~~se~~ representamos a la magnitud física asociada, pero con un circumflexo (por ejemplo: magnitud $A \rightarrow \hat{A}$).

12

Los operadores que representan a las magnitudes físicas en la mecánica cuántica se denominan observables. Si el operador $\hat{A}$ aplica al vector $\vec{v}$ el vector $\vec{w}$ escribimos $\hat{A}\vec{v} = \vec{w}$.

Probablemente el mejor ejemplo de operadores en que debemos pensar sean las matrices: $\hat{A}$ sería una matriz cuadrada, $\vec{v}$ una matriz columna, y $\vec{w}$ otra matriz columna. De modo que $\hat{A}\vec{v}$ sería el producto matricial.

En mecánica cuántica juegan un papel superimportante los autovalores y los autovectores de los observables. Las definiciones de estos objetos matemáticos son las mismas que os han enseñado en las asignaturas de matemáticas. El vector $\vec{v}$ será un autovector del operador $\hat{A}$ si el vector $\hat{A}\vec{v}$ es proporcional a $\vec{v}$. Es decir, $\hat{A}\vec{v} = \lambda\vec{v}$. En este caso λ es el autovalor asociado a $\vec{v}$.

Es evidente que si $\vec{v}$ es un autovector de $\hat{A}$, entonces $\alpha\vec{v}$ también lo es, y con el mismo autovalor, cualquiera que sea el valor α . Entonces, eligiendo adecuadamente el valor de α podemos conseguir que $\vec{v} \equiv \alpha\vec{v}$ sea unitario. De ahora en adelante, siempre que no se diga lo contrario, vamos a suponer que los autovectores que nos encontremos son unitarios.

Por cierto, que en mecánica cuántica se emplea una terminología y una notación peculiar para referirse a estas cosas. Se dice, por ejemplo, que un vector está normalizado, queriendo significar que es unitario. Así mismo se habla de norma en lugar de módulo, y se emplea una notación distinta: si en otras partes de la física el módulo del vector $\vec{v}$ se representa así: $|\vec{v}|$, en mecánica cuántica se representa así: $\|\vec{v}\|$.

Y ya que estamos con la terminología digamos algo más. Al vector de estado se le denomina función de onda, y en el caso de una partícula que se mueva en una dimensión (eje x) se suele representar así: $\psi(x)$. Es decir, como una función de x . Pero nosotros debemos pensar que no es más que una representación

extravagante de un vector.

3

A los autovectores del operador $\hat{A}$ los vamos a denominar $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3, \dots$ y a los correspondientes autovalores $a_1, a_2, a_3, \dots$. De acuerdo con su definición verifican la ecuación:

$$\hat{A} \vec{a}_k = a_k \cdot \vec{a}_k \quad k=1, 2, 3, \dots, n \quad (1)$$

Se demuestra⁽¹⁾ que el número de autovectores linealmente independientes coincide con la dimensión, n , del espacio en el que habitan. En el caso que nos interesa este espacio es el espacio de estados.

En los apuntes de la asignatura se sigue la notación de las funciones de onda, de modo que el autovector $\vec{a}_k$ se representa mediante la autofunción $f_k^A(x)$, y la ecuación (1), en esta notación, se escribe así:

$$\hat{A} f_k^A(x) = a_k \cdot f_k^A(x) \quad k=1, 2, 3, \dots, n \quad (1')$$

En mecánica cuántica los operadores que representan a las magnitudes físicas ($\leftrightarrow$ los observables) son de una naturaleza especial⁽²⁾ que garantiza que todos sus autovalores son reales, y los autovectores ortogonales. Como nosotros hemos adoptado el convenio de normalizarlos podemos afirmar que el conjunto de los autovectores de un observable cualquiera, $\hat{A}$, constituyen una base ortonormal. En lenguaje matemático esto se expresa así:

$$\vec{a}_k \cdot \vec{a}_j = \delta_{kj} \equiv \begin{cases} 0 & \text{si } k \neq j \\ 1 & \text{si } k = j \end{cases} \quad k, j = 1, 2, \dots, n \quad (2)$$

donde hemos introducido el símbolo δ_{kj} , conocido como delta de Kronecker, que resulta muy útil y lo emplearemos frecuentemente en el futuro.

Con la notación de funciones de onda se emplea un símbolo especial para el producto escalar (el $\odot$), y la ecuación (2) se escribiría así:

(1) Esta tarea se la dejamos a los matemáticos.

(2) En matemáticas se denominan operadores hermiticos.

$$f_k^A(x) \odot f_j^A(x) = \delta_{kj} \quad , \quad k, j = 1, 2, \dots, n \quad (2')$$

A partir de ahora, y siempre que lo considere necesario, las ecuaciones las escribiré repetidas: primero con la notación vectorial, e inmediatamente debajo con la de funciones de onda.

Antes de introducir los postulados fundamentales de la mecánica cuántica debo comentar algunas propiedades matemáticas de los observables y el producto escalar. Y aún antes debo decir que en adelante hay que suponer que el vector de estado es unitario ($\Leftrightarrow$ la función de onda está normalizada). Es decir, $|\vec{\Psi}| = 1$ ($\Leftrightarrow \| \Psi(x) \| = 1$).

Lo segundo que quiero comentar es que los observables son operadores lineales. Esto quiere decir que se verifica:

$$\begin{aligned} \hat{A}(\alpha \vec{v} + \beta \vec{w}) &= \alpha \hat{A} \vec{v} + \beta \hat{A} \vec{w} \quad \forall \alpha, \beta, \vec{v}, \vec{w} \\ \left(\hat{A}(\alpha f(x) + \beta g(x)) = \alpha \hat{A} f(x) + \beta \hat{A} g(x) \right) &\quad \forall \alpha, \beta, f(x), g(x) \end{aligned} \quad (3)$$

Lo último que quiero comentar es que los escalares, tales como α y β en la ecuación (3), son en general números complejos. Y en relación con ellos el producto escalar tiene la siguiente propiedad:

$$\begin{aligned} \vec{v} \cdot (\alpha \vec{w}) &= \alpha (\vec{v} \cdot \vec{w}) \\ (\alpha \vec{v}) \cdot \vec{w} &= \alpha^* (\vec{v} \cdot \vec{w}) \\ \vec{v} \cdot \vec{w} &= (\vec{w} \cdot \vec{v})^* \end{aligned} \quad \forall \alpha \quad (4)$$

$$\begin{aligned} f(x) \odot (\alpha g(x)) &= \alpha (f(x) \odot g(x)) \\ (\alpha f(x)) \odot g(x) &= \alpha^* (f(x) \odot g(x)) \\ f(x) \odot g(x) &= (g(x) \odot f(x))^* \end{aligned}$$

donde el $*$ como exponente significa complejo conjugado (α^* es el complejo conjugado de α).

5

Medidas. Las medidas son la manera que tiene la física de conectar sus teorías con la realidad. En la física clásica esta conexión es sencilla: se comparan los valores de las magnitudes físicas predichos por la teoría con los valores medidos de dichas magnitudes. Pero en la física cuántica las magnitudes físicas no toman valores, sino que se representan por ciertos operadores (observables). Pues bien, los siguientes postulados establecen la conexión:

Postulado 1 de la medida (valores): Los únicos resultados posibles de la medida de una magnitud física A son los autovalores a_k del observable $\hat{A}$ que la representa.

Ahora que ya sabemos los resultados posibles podemos preguntarnos por el autovalor concreto que se obtendrá al medir A en una situación concreta. Aquí, al igual que en la física clásica, el resultado dependerá del estado en que se encuentre el sistema. Pero, a diferencia de la física clásica, esa dependencia no es determinista. ¿Qué quiere decir esto? Quiere decir que, conocido el estado $\vec{\psi}$ del sistema, la mecánica cuántica no predice el valor a_k del autovalor de $\hat{A}$ que se obtendrá al medir A . Sólo predice la probabilidad de obtener cada uno de estos autovalores.

Debo aclarar que este indeterminismo cuántico no es consecuencia de no haber considerado en la definición de $\vec{\psi}$ el valor de ciertos parámetros que, en caso de incorporarse a $\vec{\psi}$ convertirían la medición en determinista. Las probabilidades en la física clásica tienen que poder eliminarse por este procedimiento, pero en la física cuántica el indeterminismo se supone esencial, irreducible⁽³⁾.

Bueno vale, pues aunque sólo sea la probabilidad de a_k , ¿cuál es su valor? El siguiente postulado lo establece.

(3) Desde que se inventó la mecánica cuántica, allá por los años veinte del siglo pasado, hubo gente que intentó "completar" la teoría, convirtiéndola en determinista, mediante la introducción de parámetros adicionales para fijar el estado (las denominadas variables ocultas, porque se supone que no se pueden ver/medir sus valores). Y aunque se han con-

Postulado 2 de la medida (probabilidades): La probabilidad de obtener el autovector a_k al medir la magnitud física A estando el sistema en el estado $\vec{\Psi}$ viene dada por:

$$\text{Prob}[A=a_k]_{\Psi} = |\vec{a}_k \cdot \vec{\Psi}|^2 = |c_k|^2 \quad (5)$$

$$\left(= \left| f_k^A(x) \odot \Psi(x) \right|^2 = |c_k|^2 \right)$$

Aquí c_k es la k -ésima componente de $\vec{\Psi}$ en la base $\{\vec{a}_1, \vec{a}_2, \dots, \vec{a}_n\}$ de autovectores de $\hat{A}$. Es decir:

$$\vec{\Psi} = \sum_{j=1}^n c_j \cdot \vec{a}_j \quad (6)$$

$$\left(\Psi(x) = \sum_{j=1}^n c_j \cdot f_j^A(x) \right)$$

Vamos a demostrar que $\vec{a}_k \cdot \vec{\Psi} = c_k$, con lo que habremos demostrado la segunda igualdad en (5). Para ello multiplicamos (6) escalarmente por $\vec{a}_k$:

$$\begin{aligned} \vec{a}_k \cdot \vec{\Psi} &= \vec{a}_k \cdot \left(\sum_j c_j \vec{a}_j \right) = \sum_j \vec{a}_k \cdot (c_j \vec{a}_j) = \sum_j c_j (\vec{a}_k \cdot \vec{a}_j) = \\ &= \sum_j c_j \cdot \delta_{kj} = c_k \quad \text{ya está} \end{aligned}$$

En los problemas, cuando conozcamos $\vec{\Psi}$ en la forma (6) y nos pidan $\text{Prob}[A=a_k]_{\Psi}$ usaremos $|c_k|^2$ para obtenerla. En otro caso usaremos la expresión $|\vec{a}_k \cdot \vec{\Psi}|^2$.

Aún nos queda por ver un tercer postulado con relación a la medida, que pone de manifiesto un nuevo aspecto en el que la física cuántica difiere de la clásica. En esta última siempre se puede suponer que al hacer una medida el aparato perturba mínimamente

seguido resultados interesantes (una teoría no relativista), no se ha llegado a una teoría totalmente satisfactoria, a pesar de que aún hay gente que lo sigue intentando, mereciendo todo mi respeto y admiración.

(4) La primera igualdad de (5) no la podemos demostrar, pues es la expresión matemática del teorema 2. Si fuéramos capaces de demostrarla el postulado dejaría de ser un postulado. Nuestra demostración lo hubiera dejado reducido a un teorema.

al sistema. Idealmente se puede suponer que la perturbación es nula, de modo que el estado inmediatamente anterior a la medida coincide con el estado inmediatamente posterior a la misma.

En mecánica cuántica ocurre justamente lo contrario. En general, salvo una excepción que comentaremos luego, como resultado de una medida, el estado del sistema cambia abruptamente, de un modo súbito y discontinuo. Este cambio se conoce como el colapso de la función de onda, y el siguiente postulado lo especifica en función del resultado de la medida.

Postulado 3 de la medida (colapso)

Si el resultado de la medida de una magnitud física A es $a_k^{(S)}$, entonces el estado del sistema inmediatamente posterior a la medida es el autoestado $\vec{a}_k$ correspondiente al valor a_k obtenido.

Antes de introducir nuevos postulados añadiremos algunas cosas. El postulado 2 de la medida se expresa en términos de probabilidades. Yo voy a suponer que los lectores tenéis una idea intuitiva de lo que es la probabilidad, pero ¿cómo se mide experimentalmente? Esto no es específico de la mecánica cuántica. Vale para cualquier cosa que tenga probabilidades. Dicho en lenguaje matemático, vale para cualquier variable aleatoria. Por ejemplo, el resultado de tirar una moneda al aire. Si la moneda no está trucada la probabilidad teórica de salir cara es la misma que la de salir cruz. Y como la suma de las probabilidades de todos los casos posibles debe ser 1 ($\Leftrightarrow$ la certeza), concluimos que la probabilidad teórica de obtener cara es $1/2$. ¿Cómo vamos a tratar esto? Del siguiente modo: Tiramos la moneda N veces y anotamos el número de veces que sale cara, que denominaremos n_c . Al cociente n_c/N se le denomina frecuencia relativa de las caras, y cuando N es muy grande

(S) El resultado a_k de la medida debe ser uno de los autovalores del observable $\hat{A}$ que representa a la magnitud física A . Esto es lo que dice el postulado 1 de la medida.

(en teoría tendiendo a infinito) es la medida experimental de la probabilidad.

Ahora ya sabemos cómo medir las probabilidades postuladas por la mecánica cuántica: tenemos que medir muchas veces la misma magnitud y anotar las frecuencias relativas de los distintos resultados. Pero ahora surge una dificultad: no podemos medir la magnitud que sea sobre el mismo sistema repetidamente, consecutivamente. ¿Por qué no? Porque las probabilidades que queremos medir son relativas a los valores de una cierta magnitud en un mismo estado del sistema. Ahora bien, en cuanto hacemos la primera medida colapsamos a la función de onda. Es decir, de acuerdo con el postulado 3 de la medida, el estado del sistema inmediatamente posterior a la medida causado abruptamente, discontinuamente, convirtiéndose en el autovector $\vec{a}_k$ correspondiente al autovalor a_k obtenido en la medida. Por tanto, antes de hacer la segunda medida tendríamos que "preparar" el estado del sistema al valor $\vec{\psi}$ que tenía antes de hacer la primera medida. Esto es un rollo. Lo que se suele hacer es preparar N sistemas idénticos en el mismo estado $\vec{\psi}$, y medir A en todos ellos.⁽⁶⁾

Lo anterior nos puede llevar a pensar en qué sucede cuando realizamos un conjunto de medidas inmediatamente consecutivas (es decir, sin dejar pasar tiempo entre una medida y la siguiente). Sea $\vec{\psi}$ el estado previo a la primera medida, y sea a_j el resultado obtenido en dicha primera medida. Entonces, de ~~acuerdo~~ acuerdo con el postulado 3 de la medida, el nuevo estado del sistema es $\vec{a}_j$. Ahora hacemos la segunda medida. ¿Qué probabilidad hay de obtener el resultado a_k ? De acuerdo con (5) tendremos:

$$\text{Prob}[A=a_k]_{\vec{a}_j} = |\vec{a}_k \cdot \vec{a}_j|^2 = \{\text{ver } (2)\} = |\delta_{kj}|^2 = \delta_{kj}$$

(6) En este caso nos es indiferente que las medidas se hayan realizado simultáneamente o en sucesión, ya que al realizarse en sistemas distintos son independientes unas de otras, no interfiriéndose.

No he terminado, pero como el examen parcial es esta semana, cuelgo lo que tengo. Para antes (suficientemente antes, espero) del examen final - espero colgar lo que falta.