

Mecánica Cuántica I

Agosto 2022

1 Fundamentación (Clase 1)

Cuando intentamos aplicar la mecánica y electrodinámica clásicas (por decir algo lo que hemos aprendido en mecánica analítica y los cursos de electromagnetismo I y II) a los sistemas de dimensión atómica (10^{-8}cm) estas conducen a resultados contrarios a la experiencia.

Cronológicamente se han propuesto las siguientes soluciones:

- 1900 Planck propone la cuantización de la energía para explicar la radiación del cuerpo negro, es decir una onda electromagnética de frecuencia ν sólo puede tener energías que son múltiplos enteros de $h\nu$ siendo $h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ Joule}\cdot\text{seg}$ una nueva constante fundamental de la naturaleza.
- 1905 Einstein propone la vuelta a la vieja teoría corpuscular de Newton diciendo que la luz esta compuesta de partículas llamadas fotones cada una con energía $E = h\nu$, para poder explicar el efecto fotoeléctrico.
- 1914 Franck-Hertz confirman la hipótesis de Bohr de la cuantización de los niveles energéticos de un átomo que habia sido propuesta para explicar los espectros discretos de radiación atómica, y que los electrones sólo pueden tener determinadas trayectorias. Los electrones girando alrededor del núcleo atómico son partículas aceleradas que según la formula de Larmor deberían radiar continuamente ondas electromagnéticas perdiendo energía y caer en el núcleo siendo así un sistema inestable. Esto no es así, como es obvio, y de allí la necesidad de la hipótesis de Bohr donde el átomo solamente podrá radiar pasando de un nivel a otro de menor energía.
- 1922 Se realiza el experimento de Stern-Gerlach para estudiar el espín del electrón, un nuevo grado de libertad interno donde se pensaba al electrón como una partícula girando.
- 1923 de Broglie propone que las partículas materiales tiene un aspecto ondulatorio y una onda asociada $\lambda = h/|\mathbf{p}|$, la llamada onda piloto y con ello puede explicar el tamaño y energía de las orbitas atómicas.
- 1924 Compton confirma la hipótesis de existencia del fotón estudiando la dispersión de la luz por electrones .
- 1927 Davidson-Germer miden patrones de difracción de electrones por cristales similares a los encontrados con los rayos x. Este fenómeno contradice el concepto clásico de trayectoria, ya que cuando se recolectan los electrones salientes se observa una figura de difracción similar al obtenido por ondas electromagnéticas al atravesar una rendija.

La pregunta fundamental es como interpretamos toda esta evidencia experimental? Ya que para poder combinar la relatividad con la mecánica cuántica el escenario correcto es la teoría cuántica de campos que veran en postgrado, trabajaremos en este curso la mecánica cuántica no-relativista la cual puede explicar la mayoría de los fenómenos atómicos y moleculares.

Normalmente una teoría más general puede enunciarse sin apoyarse en una menos general que es el límite bajo ciertas condiciones de la primera, como por ejemplo la teoría relativista. Sin embargo, en mecánica cuántica el proceso de medición involucra la interacción de objetos cuánticos con objetos que obedecen "con cierta precisión" la mecánica clásica al que llamamos aparato de medida y que cambia su estado, cambio a partir del cual vamos a inferir los cambios en el sistema cuántico. Esto no hace referencia al observador sino a la interacción sistema cuántico-aparato. De esta manera, no podremos formular la mecánica cuántica sin hacer referencia a la clásica y además debe tener a ésta como límite.

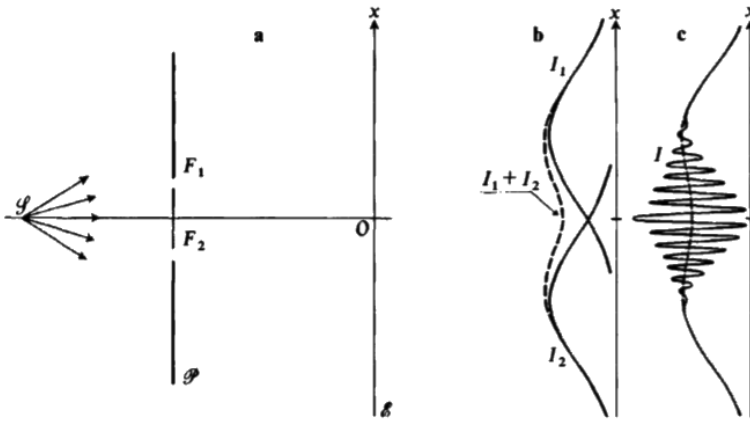


Figura 1: Experimento doble rendija Young

Vamos a ejemplificar todo esto con un experimento sobre interferencia y difracción de la luz ya que fue el escenario donde primero se manifestaron los problemas con la medición de la supuesta trayectoria de los fotones (lo cual se conoce como dualidad onda partícula) y además porque esos experimentos ya se podían realizar desde hace algún tiempo y había cierto control.

1.1 El experimento de Young de la doble rendija

Consideremos la siguiente experiencia bien estudiada en óptica física mostrado en la Fig.(1). Veamos como podemos interpretar este experimento si asumimos que la luz esta compuesta por partículas(fotones). Si Tapamos F_2 obtendremos la figura de intensidad (omitiendo el tiempo t pues pensamos en una fuente estacionaria) $I_1(x)$ que correspondería a la de difracción por una rendija, quizás esto lo podríamos explicar diciendo que los fotones colisionan con los bordes de la rendija desviandose, pero prestemos atención mejor al efecto de interferencia entre rendijas. De igual manera podríamos tapar F_1 y obtener $I_2(x)$. Si la luz son partículas que van a pasar por F_1 ó F_2 entonces cuando ambas estan abiertas deberíamos obtener por superposición, $I(x) = I_1(x) + I_2(x)$ sin embargo $I(x) \neq I_1(x) + I_2(x)$, y podríamos adjudicar esto a la interacción entre fotones (ya sabemos que no existe). Por otro lado si asumimos la naturaleza ondulatoria e introducimos los campos clásicos tendremos para el campo resultante en un punto de la pantalla $\mathbf{E}(x) = \mathbf{E}_1(x) + \mathbf{E}_2(x)$ y entonces la intensidad en un punto de la pantalla será

$$I(x) = |\mathbf{E}(x)|^2 = |\mathbf{E}_1(x)|^2 + |\mathbf{E}_2(x)|^2 + 2Re(\mathbf{E}_1(x) \cdot \mathbf{E}_2^*(x)) = I_1(x) + I_2(x) + Int(x).$$
 Ahora podríamos hacer algunas cosas que el experimento nos permite para analizar el resultado obtenido:

- Disminuir intensidad (número de fotones/seg) de \mathcal{S} hasta que los fotones impacten sobre la pantalla uno por uno, si esperamos suficiente tiempo los impactos se distribuyen en los lugares de las lineas de interferencia \Rightarrow la interacción entre fotones no puede explicar esto (van uno por uno) y sin embargo aparece el aspecto ondulatorio.
- Si pensamos que la luz son ondas aunque tenga baja intensidad las franjas no deberian desaparecer en ningún momento, sin embargo si hago una exposición de corto tiempo sólo se ven pocos impactos sobre la pantalla distribuidos en forma aleatoria \Rightarrow nos topamos con el aspecto corpuscular.
- Si esperamos suficiente tiempo de exposición, los impactos se distribuyen sobre la pantalla como las franjas.
- Pongamos fotomultiplicadores inmediatamente detras de F_1 que nos digan cuantos fotones del total alcanzaron esa rendija, pero al hacerlo no pasan hacia la pantalla. Igualmente podríamos hacerlo con la I_2 . Pero en estos casos la figura de interferencia no aparece y solo tenemos la de difracción por una rendija. Podríamos decir que al determinar por cuál rendija pasa el fotón, afecto de una forma fundamental el movimiento de mismo porque destruímos toda información que traía el haz antes de esa medida.
- Parece que no se puede asumir una hipótesis puramente corpuscular u ondulatoria.

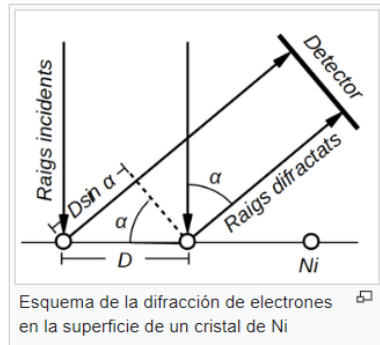
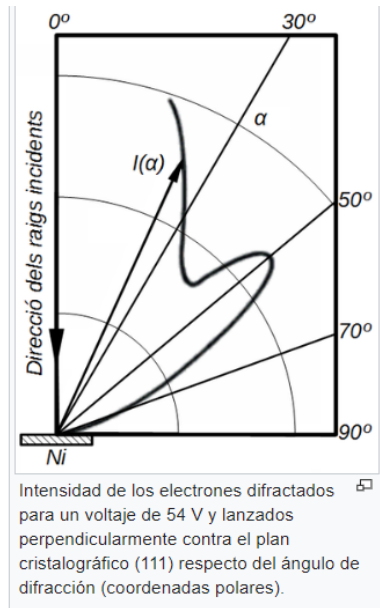


Figura 2: Difracción de electrones

- Como interpreta la mecánica cuántica este experimento?. Como sólo con un gran numero de fotones(eventos) aparece la figura de interferencia podemos pensar que estamos reproduciendo un mismo experimento un gran número de veces y dar una interpretación probabilística y como $I(\mathbf{r}, t) = |E(\mathbf{r}, t)|^2$ (estoy suponiendo que la luz no esta polarizada y que la pantalla esta lejos de las rendija para que la dirección de propagación del foton que proviene de cada rendija no sea muy diferente ($\mathbf{E}_1 \sim E_1 \parallel \mathbf{E}_2 \sim E_2 \epsilon \mathbf{C}$) decimos que $|E(\mathbf{r}, t)|^2$ es la probabilidad de que un foton alcance la pantalla en \mathbf{r} al tiempo t . Esto cualitativamente es cierto, pero no debemos ser estrictos con esta interpretación ya que en el caso del fotón la teoría relativista es imprescindible pues puede haber aniquilación de fotones.

Esto también podría realizarse con electrones y cristales ya que se ha observado la difracción electrónica (Davidson-Germer) Fig.(2). Cuando intentamos usar un cristal para difractar electrones, claramente aunque los hemos producido a todos ellos con las mismas condiciones iniciales aparece una figura de interferencia cuando los detectamos, indicando que no estan siguiendo una determinada trayectoria. Además, este fenomeno se da aunque disminuyamos al mínimo la intensidad de electrones incidentes. Aquí el cristal de Niquel, actua como una red de difracción. Sólo cuando un gran número de electrones son enviados podemos hablar, al igual que con los fotones, de probabilidad de que alcancen la pantalla de detección en determinado punto. Este experimento corroboró la hipótesis de de Broglie de asociar a una partícula un onda con longitud de onda $\lambda = h/|\mathbf{p}|$, de otra manera el maximo alrededor de $\alpha = 50^\circ$ no puede explicarse porque si pensamos en un comportamiento puramente corpuscular no se puede entender que haya un salto abrupto a ese ángulo.

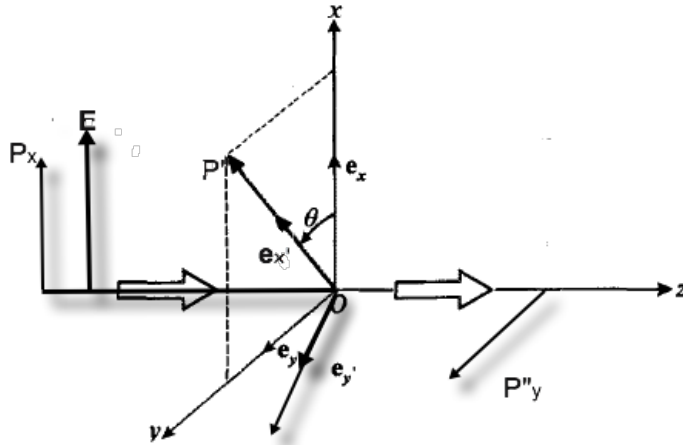


Figura 3: Experimento de polarización

1.2 Otro experimento Optico

Siguiendo con experiencias bien controladas y para seguir definiendo los nuevos conceptos en mecánica cuántica analicemos este experimento de polarización de la luz mostrado en la Fig.(3)

Supongamos que a la izquierda del polarizador P_x tenemos luz no polarizada y tenemos otros polarizadores $P'(\theta), P''_y$. Podemos hacer las siguientes observaciones:

- Una vez que pasamos P_x tendremos $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = E_0 \mathbf{e}_x e^{i(kz - \omega t)}$, o sea fue filtrada a un estado \mathbf{e}_x .
- Si $\theta = 0$ $\mathbf{e}_{x'} = \mathbf{e}_x$ obrendriamos nuevamente un estado con \mathbf{e}_x con certeza.
- Si $\theta = \pi/2$ $\mathbf{e}_{x'} = \mathbf{e}_y$ no pasaría luz, en el caso de polarizadores 100 % eficientes.
- Cuando tengo otro θ , $P'(\theta)$ polariza a un estado $\mathbf{e}_{x'}$, para ver que va a pasar podría descomponer \mathbf{E} en estados $\mathbf{e}_{x'}$ de $P'(\theta)$ y $\mathbf{e}_{y'}$ de $P'(\theta + \pi/2)$, teniendo en cuenta que puede escribirse $\mathbf{e}_x = \cos\theta \mathbf{e}_{x'} - \sin\theta \mathbf{e}_{y'}$, entonces ahora dejará pasar $\mathbf{E}'(\mathbf{r}, t) = \cos\theta E_0 \mathbf{e}_{x'} e^{i(kz - \omega t)}$.
- Para ver finalmente que pasa a la derecha de P''_y (ortogonal a P_x) podría descomponer $\mathbf{e}_{x'} = \cos\theta \mathbf{e}_x + \sin\theta \mathbf{e}_y$ y tendremos $\mathbf{E}'' = \sin\theta \cos\theta E_0 \mathbf{e}_y e^{i(kz - \omega t)}$ y aunque antes de P' la luz estaba totalmente polarizada según \mathbf{e}_x , aparece una contribución del estado \mathbf{e}_y después. Es decir al colocar P' destruyó la información que tenía al antes de P' de que la luz estaba polarizada según \mathbf{e}_x . Esto no es error de los polarizadores que son ciento por ciento eficientes. El aparato afecta la medida.
- Notemos que parece útil desarrollar en los posibles "autoestados" en que filtra un polarizador \mathbf{e}_x o \mathbf{e}_y en cada instancia, para ver cual será el resultado de la medida.
- La intensidad será después de P' será $I' = |E_0|^2 \cos^2\theta = I_0 \cos^2\theta$ (Ley de Malus).
- Hasta ahora no pensamos en fotones fue, todo clásico. Ahora si mandáramos fotones de a uno, un fotón pasa si $\theta = 0$ o es absorbido por P' si $\theta = \pi/2$, podemos agregar un fotomultiplicador o analizador A entre P' y P''_y que lo detecta o no. De antemano en general no sabemos cuantos fotones de $N \sim I_0$ pasaran sólo tendremos la probabilidad de $N \cos^2\theta$ fotones serán detectados.
- El polarizador puede dar dos resultados "pasa" o "no pasa" un fotón, podemos decir que sus resultados están cuantizados, en contraposición con la teoría electromagnética clásica donde I' varía continuamente con el ángulo con la intensidad inicial I_0 . A estos resultados los llamaremos "autovalores o valores propios".
- A cada valor propio le corresponde un autoestado del fotón digamos $\mathbf{e} = \mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$ para los cuales sabemos que pasará o no pasará con certeza.

- Si tengo un fotón con mezcla de dichos autoestados, es decir, $\mathbf{e} = \cos\theta\mathbf{e}_x + \sin\theta\mathbf{e}_y$ entonces hay una probabilidad $\cos^2\theta$ de que pase y una $\sin^2\theta = 1 - \cos^2\theta$ de que no lo haga. Esto se conoce como principio de descomposición espectral.
- Si después de que un fotón cualquiera pasa por P vuelve a ser medido inmediatamente con otro P' igualmente orientado, con certeza pasará, o sea el aparato de medida P afecta en forma fundamental al fotón porque lo hace "saltar" según Dirac, en un autoestado determinado.

1.3 El experimento de Stern y Gerlach (SG)

Veamos ahora un experimento análogo al anterior pero con partículas. Átomos de plata calentados en un horno emergen colimados e introducidos en un campo magnético inhomogéneo en la dirección Z como muestra la Fig.(4). Dada la estructura electrónica del átomo de plata el momento angular del mismo puede adjudicarse al electrón 47vo que orbita en la capa más externa. Si adjudicamos un momento angular intrínseco \mathbf{S} al electrón y un momento magnético $\boldsymbol{\mu} = g\mathbf{S}$, aparecerá un potencial magnético $-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$ y una fuerza en el eje Z $F_z = -\frac{\partial(-\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B})}{\partial z} = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$. Esto genera una fuerza cuyo sentido depende del signo de μ_z , si los átomos al salir del horno están con su espín orientado en forma aleatoria, deberíamos tener tantos con μ_z positivo o negativo variando entre $\mp|\boldsymbol{\mu}|$ y detectar un "mancha" continua en la pantalla. Sin embargo sólo aparecieron dos valores como si estuviera cuantizado $S_z = \pm\hbar/2$ múltiplos de una nueva cantidad fundamental $\hbar = h/2\pi$, la ya conocida constante de Planck reducida.

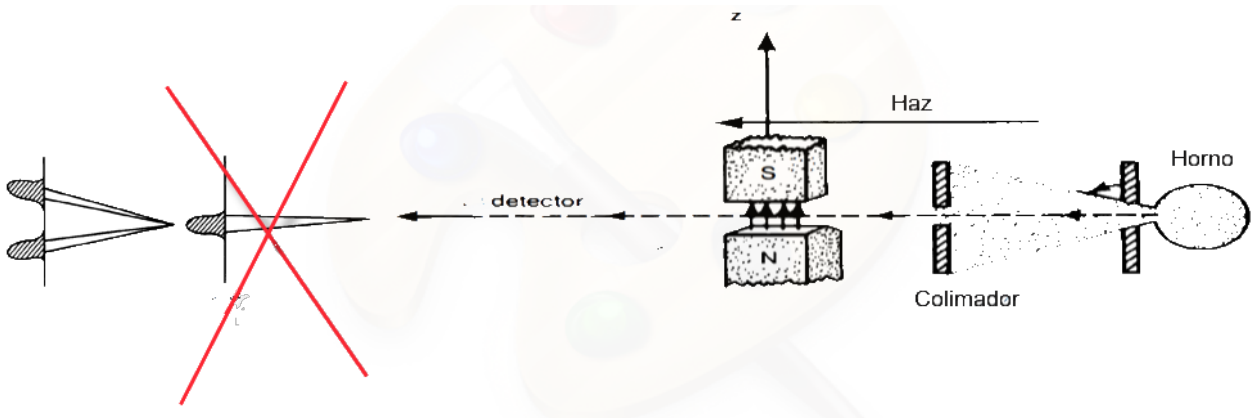


Figura 4: Experimento de Stern-Gerlach

Ahora podríamos hacer un análisis similar al de la luz polarizada pero para el caso $\theta = \pi/4$ que da igualdad de los coeficientes para la descomposición en los diferentes estados, pues uno supone igual cantidad de átomos de plata orientados en un sentido y su opuesto ($\theta = \pi/4 + \pi$) donde seno y coseno invierten ambos sus signos. Se podrían colocar aparatos secuenciales de SG_i donde i da indica la dirección de inhomogeneidad del campo magnético y así la de separación de las componentes de espín como muestra la Fig.(5) a lo largo del eje Z y X , más algo para detener una componente.

- Aquí también vemos en el caso (c) que a pesar de haber filtrado al comienzo sólo la componente S_{z+} vuelve a aparecer la S_{z-} , y así el aparato de medida intermedio destruye o afecta la información que teníamos.
- Así como hemos asociado a los fotones autoestados $\mathbf{e}_{x,y}$ podríamos asociar autoestados $|S_{z\pm}\rangle$, notación que la vamos a aclarar más adelante.
- Así como vimos que $\mathbf{e}_{x',y'} = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{e}_{x,y} \pm \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{e}_{y,x}$ podríamos postular que $|S_{x\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|S_{z+}\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}}|S_{z-}\rangle$
- Si cambiamos los papeles de los eje X e Y y ahora ponemos aparatos $SG_{\hat{y}}$ por simetría las conclusiones no deberían cambiar pero si ahora quiero escribir los estados de $SG_{\hat{y}}$ en términos de los de $SG_{\hat{z}}$ no podré hacerlo como antes porque no habría diferencia en la descripción matemática. Entonces recordemos que la luz circularmente polarizada cumple con $\mathbf{e}_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{e}_{x,y} \pm i\frac{1}{\sqrt{2}}\mathbf{e}_{y,x}$ con $+$ para polarización derecha y $-$ izquierda. Podríamos postular ahora $|S_{y\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|S_{z+}\rangle \pm i\frac{1}{\sqrt{2}}|S_{z-}\rangle$. Lo cual nos dice que el espacio donde vamos a desarrollar nuestra teoría debe ser sobre los complejos.

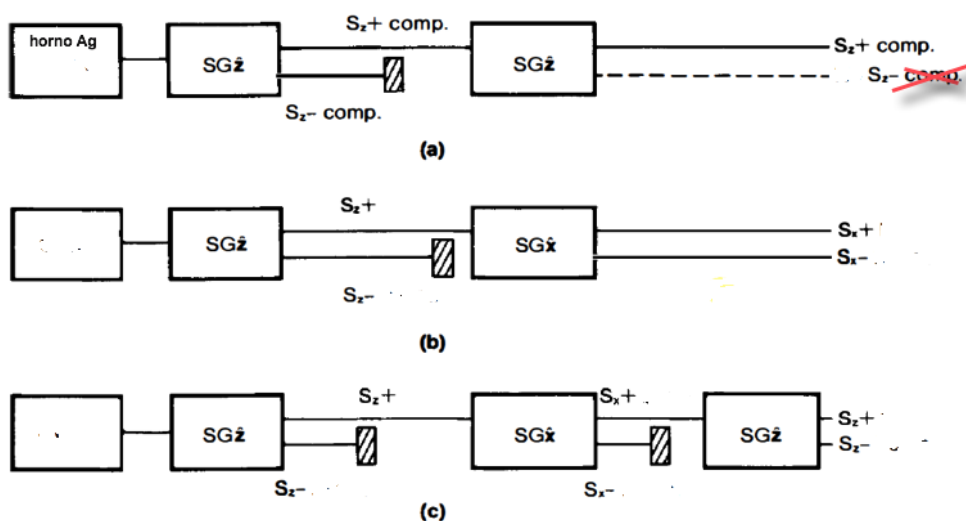


Figura 5: Experimentos de Stern-Gerlach sucesivos

- Como antes dijimos, el hecho de que al final aparezcan estados que filtramos al comienzo no es un problema de los aparatos de medida o del observador, es que los sistemas microscópicos se ven afectados de una forma fundamental por el aparato de medida.

2 Función de onda y la mecánica ondulatoria

Cuando hablamos de objeto clásico podríamos pensar en un cuerpo de masa suficientemente grande para ser considerado macroscópico, sin embargo por ejemplo una partícula cargada que deja una traza en una cámara de Wilson (Fig.(6)) de grosor grande con respecto a las dimensiones atómicas tiene una trayectoria y podría ser considerada clásica.

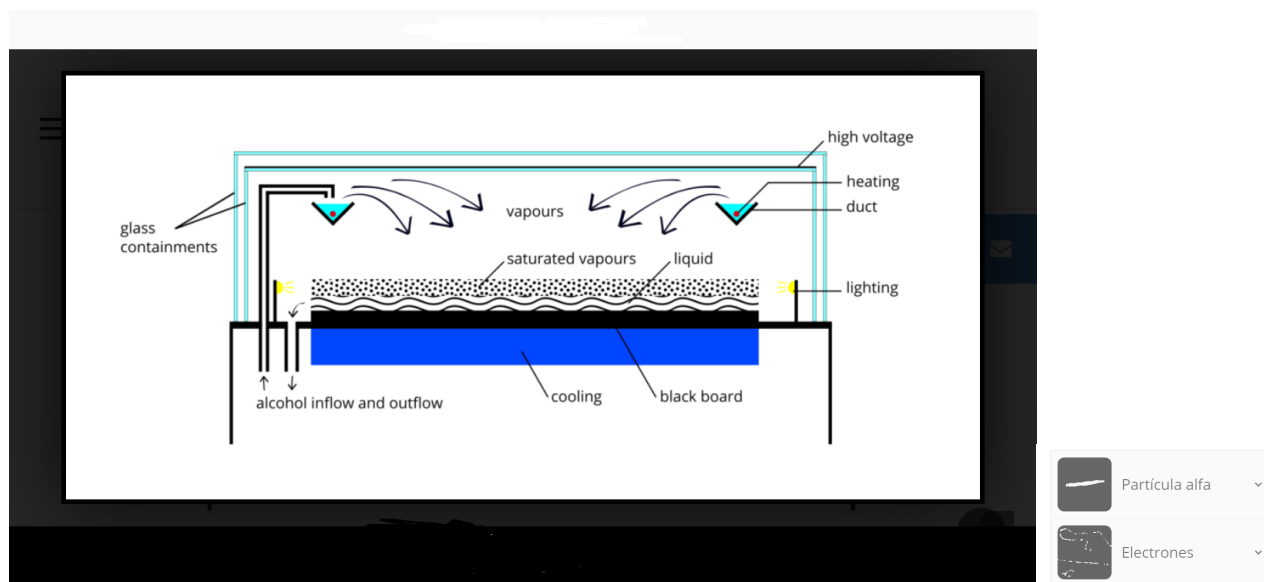


Figura 6: Cámara de Wilson

Hemos presentado algunos experimentos con luz y espines, pero también podríamos imaginar que sucede con una partícula como un electrón cuando interactúa con un aparato que mide su trayectoria, por ejemplo la mencionada Cámara de Wilson. En mecánica clásica, realizada una medición en un tiempo t_0 podríamos predecir el resultado de una medición posterior, por ejemplo si medimos $\mathbf{r}(t_0), \mathbf{v}(t_0)$ mediante las ecuaciones de movimiento podemos determinar $\mathbf{r}(t), \mathbf{v}(t)$ y es lo que mediríamos en t . En esta aseveración estamos suponiendo que de ninguna manera el proceso de medición

afecta el movimiento de la partícula, y que los valores que medimos "existen" independientemente de la medición. Sin embargo cuando realizamos una medición sobre una partícula microscópica, esta acción no puede hacerse tan débil como se quiera para una precisión dada. Cuanto más precisa es la medición más se afecta a la partícula y entonces podríamos preguntarnos si lo supuesto sobre la existencia de una magnitud física independientemente del proceso de medición es correcto o no. Porque sino mido algo no puedo decir que ese algo exista, esta sería la idea. Por ejemplo, cuando intento ver por donde pasa el foton impido que pase y no observo el fenómeno de interferencia, y no tengo la menor idea de donde impactaría el foton. Es decir afecto en una forma "fundamental" el movimiento de la partícula. Este experimento nos obliga a abandonar el concepto de "trayectoria" de la mecánica clásica porque no podemos decir que el fotón la tiene si no podemos medirla. Además, si bien todos los fotones fueron creados bajo las mismas condiciones iniciales, cuando van golpeando uno a uno sobre la pantalla caen en distintos lugares en forma impredecible, de esta manera otra idea a abandonar es la de que las condiciones iniciales permiten predecir el movimiento subsecuente. Podríamos comparar esta situación con los conceptos clásico de posición y velocidad.

Sobre una partícula clásica podíamos medir con una precisión deseada $\mathbf{r}(t), \mathbf{r}(t + \Delta t)$, y luego calcular su velocidad instantánea $\mathbf{v}(t) = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} (\mathbf{r}(t + \Delta t) - \mathbf{r}(t)) / \Delta t$, y si esto lo hacemos para cada t tenemos una trayectoria tangente a la velocidad. Sobre una partícula cuántica, si hacemos una medida de $\mathbf{r}(t)$ y luego queremos medir $\mathbf{r}(t + \Delta t)$ veríamos que no obtendríamos lo mismo si lo repitiéramos varias veces, que obtendríamos resultados diferentes si usáramos diferentes precisiones y que si $\Delta t \rightarrow 0$ las medidas dan totalmente desordenadas, cabe decir que la posición y velocidad de dicha partícula "no existen a la vez", esto se conoce como principio de incerteza. Es parecido a lo sucedido en los experimentos de SG donde no se pueden medir a la vez estados con $S_{z,x}$ dados. En la camara de wilson claro que afectamos el paso de un electrón que va ionizando el vapor, y sólo estamos pudiendo determinar las posiciones sucesivas del mismo con una precisión no menor al ancho de la traza que deja, no podemos saber por donde exactamente paso un electrón y como lo afecta el proceso de medición.

Por lo tanto tomando en cuenta los experimento analizados con fotones, átomos, y la hipótesis de de Broglie, que primeramente encontró confirmación en la explicación de el tamaño y energías atómicas, y más tarde en la difracción de electrones, debemos concluir que:

- *La mecánica cuántica no puede hacer predicciones rigurosamente determinadas sobre el comportamiento futuro de una partícula, ya que para un estado inicial del mismo una medición ulterior puede dar diferentes resultados.*

El problema reside en determinar la probabilidad de obtener un resultado de dicha medición. En algunos casos, como sucede con los polarizadores P alineados del ejemplo anterior, podemos tener probabilidad 1 o certeza. Podemos ver que hay *dos tipos de mediciones*: aquellas que cualquiera sea el estado donde se realicen no conducen con certeza a un único resultado, como la medición de la posición del fotón sobre el estado que sale después de la doble rendija, y otras para las que para cada resultado obtenido existe un estado para el cual una medición daría con certeza ese resultado, por ejemplo el estado del fotón después del polarizador P. Entonces:

- *Llamaremos magnitud física a las que tienen asociadas estados donde la medición conduce con certeza a un valor de ella. Un conjunto "completo de magnitudes físicas" son para las que existen estados sobre los cuales estas pueden medirse simultaneamente dando valores determinados.*
- *Los estados de una sistema cuántico completamente determinados son aquellos donde se miden un conjunto completo de magnitudes. A partir de una medición tal se puede predecir la probabilidad de cualquier resultado posterior independientemente de la historia del estado "antes" de la primera medición.*

Podríamos comenzar enunciando los postulados fundamentales de la mecánica cuántica introduciendo un espacio matemático abstracto donde describir los estados del sistema e introducir los conceptos de observables y probabilidad. Pero mejor comenzaremos con la mecánica ondulatoria, antecesora y menos general que la mecánica cuántica y resolver algunos problemas concretos, cuando tengamos cierta experiencia abordaremos los postulados generales.

2.1 Mecánica ondulatoria

Enunciamos ahora las hipótesis de la llamada "mecánica ondulatoria"

- Cambiamos el concepto clásico de trayectoria por el de un "estado que varía en el tiempo" definido por una "función de onda" en general compleja $\psi(q, t)$ donde con q indicamos las coordenadas generalizadas del sistema cuántico (para una partícula $q \equiv \mathbf{r}$). Así para una partícula cambiamos la descripción clásica de un estado en el tiempo t mediante seis coordenadas $\mathbf{r}(t), \mathbf{v}(t)$ por una descripción cuántica de infinitas coordenadas $\psi(\mathbf{r}, t)$ (el valor de la función de onda en cada punto) y el concepto de trayectoria como sucesión de las posiciones en el tiempo, por evolución de la función de onda en el tiempo. A medida que transcurre el tiempo, el estado de un sistema y su función de onda cambian en general y si conocemos ésta en un cierto instante inicial para un estado completamente determinado esta puede ser determinada en instantes posteriores. Ya veremos que ecuación maneja dicha evolución temporal.
- Supongamos un sistema bipartito, cada parte con coordenadas q_1, q_2 y esta descrita en forma completa la función de onda de cada subsistema, será entonces $\psi_{1,2}(q_1, q_2, t_0) = \psi_1(q_1, t_0)\psi_2(q_2, t_0)$, y si no hay interacción $\psi_{1,2}(q_1, q_2, t > t_0) = \psi_1(q_1, t)\psi_2(q_2, t)$.
- $|\psi(q, t)|^2 dq$ da la probabilidad de que al realizar una medición sobre las coordenadas del sistema obtengamos un valor dentro del volumen dq del espacio de configuraciones ubicado en q ($dq \equiv dx dy dz$ para una partícula), es decir para el caso de una partícula la probabilidad de encontrarla en el elemento dr^3 en \mathbf{r} . También se llama a ψ amplitud de probabilidad. Debe cumplirse

$$\int |\psi(q, t)|^2 dq = 1, \quad (1)$$

pues la probabilidad de ubicar al sistema en cualquier lugar del espacio de configuraciones debe ser certeza o sea 1 (mecánica cuántica no relativista). Esta se llama condición de normalización y para aplicarla (1) debe converger o sea ψ debe ser de módulo cuadrado integrable. A veces no podemos normalizar según esa condición pero puede pedirse que el cociente de $|\psi(q, t)|^2$ entre dos puntos distintos determine la probabilidad relativa de medir los valores de las coordenadas. El conocimiento de la función de onda a su vez permite la determinación de otras mediciones diferentes a la de las coordenadas como lo veremos a continuación.

- Vale el principio de superposición de los estados o principio de descomposición espectral: si tenemos un conjunto de estados caracterizados por $\{\psi_i(q)\}$ sobre los cuales se determinan con certeza las magnitudes $\{\lambda_i\}$ entonces se admite que

$$\psi(q, t) = \sum_i c_i(t) \psi_i(q) \quad (2)$$

es un estado donde la medición puede dar alguno de los λ_i en t . Esto implica que las ecuaciones que determinan la evolución de la función de onda deben ser lineales, ya que una combinación lineal de soluciones es solución.

- La evolución de los estados (o de la función de onda) la indica la Ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H} \psi, \quad (3)$$

donde \hat{H} es el "operador" hamiltoniano. Este postulado lo vamos a fundamentar en el próximo capítulo.

2.2 Consecuencias de las hipótesis en mecánica ondulatoria

Veamos que consecuencias tienen los tres primeros postulados previos. Consideremos un conjunto completo de magnitudes físicas λ que caracterizan cierto estado y para simplificar asumimos que se trata de sólo una magnitud. Los valores (reales)

que pueden medirse para esta magnitud pueden recorrer *un continuo o formar un conjunto discreto, hablamos de espectro continuo (ejemplo coordenadas) y discreto (estados de polarización del fotón o espines)* y se denominan autovalores o valores propios de esa magnitud. Supongamos tener un espectro discreto $\lambda \equiv \{\lambda_i\}$ y sea $\{\psi_i\}$ el conjunto de funciones de onda correspondientes a los estados donde se mide con certeza λ en un dado t_0 es decir $\psi(\mathbf{r}, t_0) = \psi_i(\mathbf{r})$, las cuales se conocen como funciones propias cumpliendo cada una de ellas cuando están normalizadas, $\int |\psi_i(q)|^2 dq = 1$. En virtud del *pio.* de superposición sobre un estado cualquiera $\psi(q, t_0)$ donde se mide la magnitud λ deberemos obtener alguno de los valores $\{\lambda_i\}$ y por lo tanto deberá ser

$$\psi(q, t_0) = \sum_i c_i(t_0) \psi_i(q) \quad (4)$$

donde la suma es sobre "todos" los valores de i siendo los coeficientes números complejos $c_i(t_0)$. Ahora matemáticamente para que la función de onda *de cualquier estado en un dado tiempo* pueda desarrollarse en funciones propias de la magnitud λ , estas deben formar *un conjunto "cerrado" o "completo" de funciones.*

Por otro lado podemos expresar a (1) como $\int \psi(q, t_0) \psi(q, t_0)^* dq = \sum_{ij} c_i c_j^* \int \psi_i(q) \psi_j^*(q) dq = 1$ que :

$$\begin{aligned} \text{Cuando } \psi(q, t_0) = \psi_i(q) &\Rightarrow \text{probabilidad } P_i \text{ de medir } \lambda_i = 1 \\ \text{si } \psi(q, t_0) \text{ no contiene a } \psi_i(q) &\Rightarrow \text{probabilidad } P_i \text{ de medir } \lambda_i = 0 \end{aligned}$$

Como la probabilidad es un número real, nos encontramos que quien cumple esto es $P_i = |c_i|^2$, siendo la probabilidad de medir *alguna* de los valores $\sum_i |c_i|^2 = 1$. Si la función de onda está normalizada entonces

$$\int \psi(q, t_0) \psi^*(q, t_0) dq = 1 = \sum_i |c_i|^2 \int |\psi_i(q)|^2 + \sum_{i \neq j} c_i c_j^* \int \psi_i(q) \psi_j^*(q) dq,$$

de donde podría inferirse de acuerdo con $\int |\psi_i(q)|^2 dq = 1, \sum_i |c_i|^2 = 1$ y a que el estado $\psi(q, t_0)$ (y c_i) es arbitrario

$$\sum_{i \neq j} c_i c_j^* \int \psi_i(q) \psi_j^*(q) dq = 0 \Rightarrow \int \psi_i(q) \psi_j^*(q) dq = 0, i \neq j$$

y por lo tanto tenemos además que *ese conjunto cerrado es ortonormal*

$$\forall \psi(q, t_0) \Rightarrow \psi(q, t_0) = \sum c_i(t_0) \psi_i(q), \int \psi_i(q) \psi_j^*(q) dq = \delta_{ij}, \quad (5)$$

y que la norma puede expresarse como

$$\int \psi(q, t_0) \psi(q, t_0)^* dq = \sum_i c_i c_i^*. \quad (6)$$

Ahora, si la función no estuviese normalizada siempre se puede normalizar multiplicando por una constante adecuada la cual es $\frac{1}{\sqrt{\int dq \psi(q, t_0) \psi(q, t_0)^*}}$. Si en esta expresión anterior reemplazamos $\psi(q, t_0)^*$ usando (4) obtendremos

$$\sum_i c_i c_i^* = \sum_i c_i^* \int \psi_i^*(q) \psi(q, t_0) dq$$

de donde concluimos que

$$c_i = \int \psi_i^*(q) \psi(q, t_0) dq, \quad (7)$$

que sería la *proyección* de ψ sobre ψ_i como lo es para un vector complejo $V_i = \hat{e}_i^* \cdot \mathbf{V}, \mathbf{V} = \sum_i V_i \hat{e}_i$ con el producto escalar sobre un espacio de vectores con componentes complejas.

Ahora veamos como aparecen los operadores en mecánica ondulatoria. Como en toda distribución de probabilidad tendremos un valor medio donde introduciremos $\hat{\lambda}(q, \partial q)$,

$$\bar{\lambda} = \sum_i |c_i|^2 \lambda_i \equiv \int \psi(q, t_0)^* (\hat{\lambda} \psi(q, t_0)) dq \quad (8)$$

que es un operador lineal (se cumple pto. de superposición) actuando sobre ψ que como veremos más adelante su forma dependerá de la magnitud a medir y puede ser determinado por criterios físicos. Sin embargo, independientemente de su forma particular, veremos que está íntimamente relacionado a $\{\psi_i\}$ y $\{\lambda_i\}$. A partir de su definición en (8) y de lo obtenido arriba

$$\sum_i c_i^* c_i \lambda_i = \sum_i c_i \lambda_i \int \psi_i(q) \psi^*(q, t_0) dq = \int \psi^*(q, t_0) \left(\sum_i c_i \lambda_i \psi_i(q) \right) dq$$

que comparada con (8) nos dice que

$$\hat{\lambda} \psi(q, t_0) = \sum_i c_i \lambda_i \psi_i(q) \Rightarrow \text{si } \psi(q, t_0) = \psi_i(q) \Rightarrow \hat{\lambda} \psi_i(q) = \lambda_i \psi_i(q),$$

y por lo tanto los valores de la magnitud serán autovalores del operador lineal $\hat{\lambda}$.

Ahora, las magnitudes físicas son números reales es decir $\lambda_i \in \mathbb{R}$. Si definimos $\hat{\lambda}^*$ de manera que si $\hat{\lambda} \psi = \phi$ entonces $\hat{\lambda}^* \phi = \psi$ y lo llamamos su operador conjugado, el cual no existe para todo operador, tendremos

$$\bar{\lambda} = \int \psi(q)^* (\hat{\lambda} \psi(q)) dq = \bar{\lambda}^* = \int \psi(q) (\hat{\lambda} \psi(q))^* dq = \int \psi(q) (\hat{\lambda}^* \psi^*(q)) dq. \quad (9)$$

También podríamos encontrar el transpuesto de un operador lineal cualquiera (siempre se puede) que cumpla

$$\int \psi(q) (\hat{\lambda} \phi(q)) dq = \int \phi(q) (\hat{\lambda}^t \psi(q)) dq$$

y así combinando con un operador que tenga el conjugado tendremos aplicando a la (8)

$$\bar{\lambda} = \bar{\lambda}^* = \int \psi(q) (\hat{\lambda}^* \psi^*(q)) dq = \int \psi(q) (\hat{\lambda}^t \psi^*(q)) dq \Rightarrow \hat{\lambda}^* = \hat{\lambda}^t \Rightarrow \hat{\lambda} = \hat{\lambda}^{t*} \equiv \hat{\lambda}^\dagger, \quad (10)$$

y que tiene como consecuencia que

$$\int \psi^*(q) (\hat{\lambda} \phi(q)) dq = \left[\int \phi^*(q) (\hat{\lambda}^t \psi^*(q))^* dq \right]^* = \left[\int \phi^*(q) (\hat{\lambda}^{t*} = \hat{\lambda}^\dagger \psi(q)) dq \right]^* = \left[\int \phi^*(q) (\hat{\lambda} \psi(q)) dq \right]^*,$$

$$\int \psi^*(q) (\hat{\lambda} \phi(q)) dq = \left[\int \phi^*(q) (\hat{\lambda}^\dagger \psi(q)) dq \right]^* \\ \hat{\lambda} = \hat{\lambda}^\dagger \Rightarrow \int \psi^*(q) (\hat{\lambda} \phi(q)) dq = \left[\int \phi^*(q) (\hat{\lambda} \psi(q)) dq \right]^*.$$

Por lo tanto buscamos los operadores de las magnitudes físicas reales dentro de los llamados hermíticos (o autoadjuntos) que cumplen $\hat{\lambda} = \hat{\lambda}^{t*} \equiv \hat{\lambda}^\dagger$. Notemos que el hecho de usar necesariamente operadores hermíticos conduce a la antes demostrada en general ortogonalidad entre autofunciones

$$\hat{\lambda} \psi_n = \lambda_n \psi_n, \hat{\lambda}^* \psi_m^* = \lambda_m \psi_m^*, \\ \psi_m^* \hat{\lambda} \psi_n - \psi_n \hat{\lambda}^* \psi_m^* = (\lambda_n - \lambda_m) \psi_n \psi_m^*$$

pero como $\hat{\lambda}^* = \hat{\lambda}^\dagger \Rightarrow (\lambda_n - \lambda_m) \int \psi_n \psi_m^* dq = \int \psi_n (\lambda_n - \lambda_m) \psi_m^* dq = 0 \Rightarrow \lambda_n \neq \lambda_m \int \psi_n \psi_m^* dq = 0$.

$$\begin{aligned} \hat{\lambda} \psi_n &= \lambda_n \psi_n, \\ \hat{\lambda} = \hat{\lambda}^\dagger \Rightarrow \lambda_n \neq \lambda_m &, \quad \int \psi_n \psi_m^* dq = 0 \end{aligned}$$

Como tendremos un conjunto completos de magnitudes cada una tendra asociada un operador hermítico.

Finalmente consideremos dos magnitudes simultaneamente medibles A y B que tienen asociadas operadores \hat{A} y \hat{B} , esto significa que existiran autofunciones ψ_n donde dichos operadores tendran valores propios es decir $\hat{A} \psi_n = A_n \psi_n, \hat{B} \psi_n = B_n \psi_n$. Ahora podriamos aplicar sucesivamente y en distinto orden dichos operadores obteniendose

$$\hat{A} \hat{B} \psi_n = \hat{A} B_n \psi_n = A_n B_n \psi_n = B_n A_n \psi_n = \psi_n = \hat{B} A_n \psi_n = \hat{B} \hat{A} \psi_n$$

y como toda función de onda ψ puede desarrollarse en terminos de $\{\psi_n\}$ tendremos

$$(\hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A}) \psi = 0 \Rightarrow \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A} \equiv [\hat{A}, \hat{B}] = 0. \quad (11)$$

o sea los operadores deberán conmutar

$$\hat{A} \hat{B} \psi_n = A_n B_n \psi_n \Rightarrow [\hat{A}, \hat{B}] = 0$$

Por ejemplo en el ejemplo de los espines si asociamos operadores \hat{S}_z, \hat{S}_x cuyos autovalores son $\pm \hbar/2$, como ya vimos que no podiamos determinar estados con valores dados de ambos a la vez pues la medición de uno destruia la información del otro, estos no pueden conmutar. Por el momento no hablaremos más de los operadores y estudiaremos la ecuación que determina la evolución de la función de onda