

Introducción a la Física Cuántica

Víctor Romero Rochín
Facultad de Ciencias, Semestre 2019-I

1 La función de onda en términos de probabilidad de la posición \hat{x} ó del momento \hat{p}

Sin profundizar mucho en la interpretación de los diferentes aspectos de la mecánica cuántica, discutimos en clase que el estado de un sistema está dado por la función de onda $\psi(x)$ a un tiempo dado t . Supongamos, sin pérdida de generalidad, que el sistema es una sólo partícula en 1 dimensión.

Entonces, si el estado del sistema es $\psi(x)$, podemos concluir que, si medimos la posición de la partícula, entonces $|\psi(x)|^2 dx$ es la probabilidad de hallarla entre x y $x + dx$. Una pregunta importante es: cómo obtuvimos la información de que el estado de la partícula es $\psi(x)$. Discutiremos más adelante que lo podemos saber ya sea porque medimos una cierta cantidad física en esos instante o en un instante previo, es decir, saber que el estado es $\psi(x)$ es consecuencia de haber realizado otra medición. En este escrito partiremos del hecho que $\psi(x)$ es conocida.

La función de onda satisface las siguientes propiedades:

(I) $\psi(x) \in \mathbb{C}$, es decir, es una función compleja en general.

(II) $\psi(x)$ es continua para todo valor de $x \in \mathbb{R}$.

(III) $\psi(x)$ es normalizable. Esto quiere decir la integral de $|\psi(x)|^2$ existe y es diferente de cero,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx < \infty \quad (1)$$

Es decir,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \mathcal{N} \quad (2)$$

con $0 < \mathcal{N} < \infty$. De esta manera, siempre podemos redefinir a la función de onda como

$$\psi'(x) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}}\psi(x) \quad (3)$$

tal que,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi'(x)|^2 dx = 1. \quad (4)$$

El concepto de “normalizable”, por un lado, es en realidad más amplio y, por el otro, es muy restrictivo. Notamos primero que para que la integral (2) exista, es necesario que

$$|\psi(x)|^2 \rightarrow 0 \text{ para } x \rightarrow -\infty \text{ y } x \rightarrow +\infty. \quad (5)$$

Sin embargo, como señalaremos adelante, se requiere que $\psi(x)$ se haga cero más rápido que cualquier potencia de x , es decir, que x^n para toda n . Es evidente, sin embargo, que las condiciones de continuidad y de normalizabilidad son esenciales para que $\psi(x)|^2$ pueda ser interpretada como una probabilidad.

Espacio de Hilbert, operadores, producto interno.

El conjunto de todas las funciones de onda $\psi(x)$ que obedecen las condiciones (I), (II) y (III) arriba mencionadas, es un espacio de Hilbert que denotamos como \mathcal{H} . Además de las funciones de onda existen también otros objetos en el espacio de Hilbert que se llaman operadores, debido a que “operan” o hacen una acción sobre las funciones. Los operadores básicos de este espacio de Hilbert son los operadores de posición \hat{x} y de momento \hat{p} (denotaremos a los operadores siempre con un circunflejo o “gorro”). La acción de estos operadores sobre cualquier elemento $\psi(x)$ del espacio de Hilbert es,

$$\hat{x} \psi(x) = x \psi(x) \quad (6)$$

$$\hat{p} \psi(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) \quad (7)$$

En palabras, la acción de \hat{x} es multiplicar a la función de onda por el valor de x en el que está siendo evaluada, mientras que la acción de \hat{p} es derivar a la función de onda, también en el punto donde se evalúa.

Veremos más adelante que cualquier función de \hat{x} y \hat{p} es también un operador y lo podemos denotar como $\hat{f} = f(\hat{p}, \hat{x})$. Lo importante de estos

operadores es que si $\psi(x)$ es un elemento de espacio del Hilbert \mathcal{H} , entonces la acción del operador \hat{f} sobre $\psi(x)$ es también un elemento de \mathcal{H} . Es decir, si $\psi(x) \in \mathcal{H}$ y

$$\hat{f}\psi(x) = \phi(x) \quad (8)$$

entonces $\phi(x) \in \mathcal{H}$. Note que esto implica inmediatamente que la función de onda debe hacerse cero más rápido que cualquier potencia, ya que podríamos escoger $\hat{f} = \hat{x}^\alpha$ con $\alpha > 0$ arbitrario. Esto obliga a que la función se haga cero exponencialmente o idénticamente para $|x| \rightarrow \infty$.

Además de los operadores y su acción, podemos definir una operación entre los elementos del espacio de Hilbert. Este es el producto interno o “traslape” entre dos elementos $\psi(x)$ y $\phi(x)$, y se denota como,

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) \psi(x) dx. \quad (9)$$

Evidentemente, en general, el traslape es complejo, $\langle \phi | \psi \rangle \in \mathbb{C}$. Por supuesto el producto interno de un elemento consigo mismo es su “norma” y es su condición de normalizabilidad,

$$\langle \phi | \phi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) \phi(x) dx = \mathcal{M} \in \mathbb{R} > 0. \quad (10)$$

En analogía con el producto interno en otros espacios vectoriales, el producto interno en el espacio de Hilbert tiene también la interpretación de que $\langle \phi | \psi \rangle$ es la proyección de $\psi(x)$ sobre $\phi(x)$. En el caso extremo en que es cero decimos que son ortogonales y cuando es 1 es la norma del estado.

De la misma manera podemos calcular la siguiente cantidad,

$$\langle \phi | \hat{f} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) f(\hat{x}, \hat{p}) \psi(x) dx. \quad (11)$$

Esta cantidad es, en general, compleja. Si $\phi(x) \neq \psi(x)$ se le llama el “elemento de matriz” de \hat{f} entre ϕ y ψ (ya muy vulgar se le dice también el “sandwich” entre ϕ y ψ). Si $\phi(x) = \psi(x)$, entonces se le llama el “valor de expectación” de \hat{f} en $\psi(x)$.

Una base muy importante del espacio de Hilbert.

El espacio de Hilbert es un espacio *lineal*. Es decir, si $\psi(x)$ y $\phi(x)$ son elementos de \mathcal{H} , entonces la superposición lineal de ellos también lo es: si,

$$\chi(x) = a \psi(x) + b \phi(x), \quad (12)$$

con a y b números complejos, entonces $\chi(x)$ es un elemento de \mathcal{H} . Esta propiedad sugiere la existencia de *bases* del espacio de Hilbert: esto es, de conjuntos (infinitos) de funciones de onda ortonormales y completas, tales que cualquier $\phi(x) \in \mathcal{H}$ puede escribirse como una superposición lineal de los elementos de dichos conjuntos.

La *ortonormalidad* significa que los elementos de una base son ortogonales entre todos ellos bajo la operación del producto interno y que son normalizables.

La *completez* es que no sólo todo $\psi(x) \in \mathcal{H}$ es una combinación o superposición de la base, sino que cualquier combinación lineal de la base, que obedezca las condiciones (I), (II) y (III) de arriba, también es un elemento de \mathcal{H} .

Más adelante demostraremos que existe una clase de operadores, llamados *Hermitianos*, tales que sus estados propios o eigenestados forman una base. Por supuesto, tanto \hat{x} como \hat{p} son Hermitianos. Como discutiremos ahora, existe una base fundamental que es el conjunto de los estados propios del operador de momento \hat{p} . Veamos.

En clase se discutió que las siguientes funciones de onda son estados propios de \hat{p} :

$$\phi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad \forall p \in \mathbb{R}. \quad (13)$$

Este conjunto es evidentemente infinito. Decimos que son los estados propios o eigenfunciones de \hat{p} porque obedecen la siguiente ecuación,

$$\hat{p} \phi_p(x) = p \phi_p(x) \quad \forall p \in \mathbb{R}. \quad (14)$$

Esto se comprueba fácilmente reemplazando la acción de \hat{p} :

$$\hat{p} \phi_p(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\hbar}{i} \left(\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \right) \frac{ip}{\hbar} \\
&= p \phi_p(x).
\end{aligned} \tag{15}$$

Se dice entonces que $\phi_p(x)$ es eigenfunción de \hat{p} con valor propio o eigenvalor p . El eigenvalor debe ser una cantidad real. Note que para que sea eigenfunción, la acción del operador sobre la eigenfunción debe regresar la misma función sólo que multiplicada por un número real, para todo valor de x .

Aunque luego insitiremos en los aspectos de interpretación, adelantamos que si sabemos que el estado de la partícula es, digamos, $\phi_{p'}(x)$ entonces sabemos con *certeza* que el momento de la partícula es \hat{p}' , y esto sólo lo podríamos saber si hicimos una medición del momento \hat{p} en ese instante, o hicimos otra medición antes y la *evolución* del sistema lo llevó a ese estado. Veremos que el último caso se obtendría con la evolución temporal de la ecuación de Schrödinger.

• *Ortonormalización.* Calculemos el traslape o producto interno entre dos eigenfunciones arbitrarias,

$$\begin{aligned}
\langle \phi_{p'} | \phi_p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{p'}^*(x) \phi_p(x) dx \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ip'x/\hbar} e^{ipx/\hbar} dx \\
&= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ix(p-p')/\hbar} dx.
\end{aligned} \tag{16}$$

Ahora hacemos el cambio de variable $y = x/\hbar$ y obtenemos

$$\langle \phi_{p'} | \phi_p \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iy(p-p')} dx. \tag{17}$$

Usamos la expresión fundamental de la Delta de Dirac,

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{iy(p-p')} dx = 2\pi \delta(p-p') \tag{18}$$

lo que finalmente nos da,

$$\begin{aligned}
\langle \phi_{p'} | \phi_p \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi_{p'}^*(x) \phi_p(x) dx \\
&= \delta(p-p') \quad \forall p \text{ y } p'.
\end{aligned} \tag{19}$$

Esta es la condición de ortonormalización del conjunto de eigenfunciones $\phi_p(x)$ de \hat{p} . Esta expresión nos dice que si $p \neq p'$ el traslape es cero, es decir $\phi_p(x)$ y $\phi_{p'}(x)$ son ortogonales. La normalización no es igual a la unidad, sin embargo, los elementos de matriz $\langle \phi_{p'} | \hat{f} | \phi_p \rangle$ están perfectamente definidos para todo \hat{f} que, como veremos más adelante, es lo que realmente necesitamos para hacer uso de la teoría. Con respecto a la interpretación de probabilidad tampoco hay problema porque $|\phi_p(x)|^2 dx = (1/2\pi\hbar) dx$ nos indica que la probabilidad de hallar a la partícula en cualquier posición x es la misma, si el estado es $\phi_p(x)$.

- *Completez.* No es obvio en este momento, aunque se verá un poco más adelante, la relación de completez es la propiedad de la base de descomponer el operador unidad en términos de una suma de todos elementos de la base. Se puede mostrar que si una base es completa debe obedecer,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_p(x) \phi_p^*(x') dp = \delta(x - x'). \quad (20)$$

Note que es una suma (integral) sobre todos los valores de p . El lado derecho es el operador unidad $\hat{1}$ en el siguiente sentido

$$\begin{aligned} \hat{1} \phi(x) &\equiv \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x') \phi(x') dx' \\ &= \phi(x). \end{aligned} \quad (21)$$

Con las siguientes manipulaciones matemáticas, y un cambio apropiado de variables, podemos demostrar la relación (20),

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_p(x) \phi_p^*(x') dp &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ipx/\hbar} e^{-ipx'/\hbar} dp \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ip(x-x')/\hbar} dp \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{iy(x-x')/\hbar} dy \\ &= \delta(x - x'). \end{aligned} \quad (22)$$

Descomposición de cualquier $\psi(x)$ en la base de \hat{p} y su interpretación.

Sea $\psi(x)$ una función de onda arbitraria, elemento del espacio de Hilbert \mathcal{H} . Usando la relación de completitud (20), escribimos,

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x - x')\psi(x')dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \phi_p(x)\phi_p^*(x') dp \right) \psi(x')dx'.\end{aligned}\quad (23)$$

Rearreglando los integrandos, podemos reescribir

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \phi_p^*(x')\psi(x') dx' \right) \phi_p(x)dp. \quad (24)$$

Notamos que al realizar la integral sobre x' obtenemos una cantidad que sólo depende de p . Definimos a esta cantidad de la siguiente manera,

$$\tilde{\psi}(p) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_p^*(x')\psi(x') dx', \quad (25)$$

tal que, la función de onda original se expresa finalmente como:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p)\phi_p(x)dp. \quad (26)$$

Es decir, desde el punto de vista estrictamente formal logramos mostrar que la función de onda $\psi(x)$, elemento del espacio de Hilbert por suposición, es una superposición o combinación lineal de los elementos de la base de \hat{p} . La función $\tilde{\psi}(p)$, para toda p , representa los “coeficientes” del desarrollo en dicha base. Esto último se comprueba mejor notando que $\tilde{\psi}(p)$, por la definición del traslape (9), se puede expresar como

$$\tilde{\psi}(p) = \langle \phi_p | \psi \rangle. \quad (27)$$

En otras palabras $\tilde{\psi}(p)$ es la proyección de $\psi(x)$ sobre $\phi_p(x)$.

Observe ahora con detenimiento las expresiones (25) y (26). Note que aparecen como “análogas”: la primera es el desarrollo de $\tilde{\psi}(p)$ en el espacio

de las x 's, mientras que la segunda es el desarrollo de $\psi(x)$ en el espacio de las p 's. No sólo eso, matemáticamente podemos transformar de una a la otra. Para mostrarlo haga el siguiente ejercicio, multiplique (25) por $\phi_p(x)$ e integre sobre p , obtendrá $\psi(x)$. Luego, multiplique (26) por $\phi_p^*(x)$ e integre sobre x , obtendrá $\tilde{\psi}(p)$... Lo interesante desde el punto de vista de la física y su interpretación es que tanto $\psi(x)$ como $\tilde{\psi}(p)$ representan al *mismo* estado, sólo que una lo hace en el espacio de las posiciones x y la otra en el espacio de los momentos p . Así como $|\psi(x)|^2 dx$ es la probabilidad de hallar a la partícula en la posición entre x y $x + dx$, veremos abajo que $|\tilde{\psi}(p)|^2 dp$ es la probabilidad de hallar a la partícula con momento entre p y $p + dp$. Esto nos hará ver que las dos descripciones son completamente equivalentes, ninguna es más fundamental que la otra. Eso sí, una nos da las probabilidades de mediciones de x , la otra de probabilidades de mediciones de p . Sin embargo, dichas cantidades son diferentes y no pueden medirse simultáneamente: o medimos \hat{x} o medimos \hat{p} . En palabras de Bohr, la información de $\psi(x)$ y $\tilde{\psi}(p)$ es entonces *complementaria*.

Probabilidades de mediciones de \hat{x} ó de \hat{p}

Una vez más, sea $\psi(x)$ un estado *arbitrario* del sistema. ¿Cómo sabemos que *ese* es el estado del sistema? Esa es una buena pregunta y la respuesta es que o medimos alguna cantidad conocida en ese instante u otra antes y ahora sabemos el estado. Por el momento despreocupémonos de este “detalle” y supongamos que existe un procedimiento experimental que nos da *certeza* de que el sistema está en ese estado. No sólo eso, podemos suponer también que podemos repetir ese experimento tantas veces como deseemos tal que podemos “colocar” al sistema en el estado $\psi(x)$ tantas veces como queramos.

El estado $\psi(x)$, dado que es arbitrario, no es una eigenfunción del momento \hat{p} . Por lo tanto, no tiene ni posición x ni momento p bien definidos, sólo podemos hablar de las probabilidades de mediciones de \hat{x} y de \hat{p} . Veamos.

Recordemos primero la hipótesis inicial: $|\psi(x)|^2 dx$ es la probabilidad de que, si medimos la posición \hat{x} de la partícula, la hallaremos entre x y $x + dx$. Para que esto sea cierto, se deben obedecer las siguientes propiedades:

1) $\psi(x)$ es continua y $|\psi(x)|^2$ es normalizable. Esto se cumple por suposición, es decir $\psi(x)$ es un elemento del espacio de Hilbert \mathcal{H} .

2) Si $|\psi(x)|^2$ es una probabilidad, entonces el *promedio* de las mediciones de la posición, estando siempre la partícula en el estado $\psi(x)$, debe ser igual a $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 x dx$, o reescribiendo, a $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx$. Esto es por la *definición* de promedio. Notamos que esta segunda forma de escribirlo es, por nuestra identificación, el valor de expectación de \hat{x} en $\psi(x)$. Es decir, el promedio de las mediciones de la posición es el valor de expectación de \hat{x} ,

$$\langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx. \quad (28)$$

Que esto sea el promedio, no son ni palabras ni formalismo matemático. Esto quiere decir que esta expresión debe estar de acuerdo con la realización de un gran conjunto de experimentos. Es decir, debemos ser capaces de “colocar” al sistema, cuantas veces deseemos, en el estado $\psi(x)$ (por medio de un procedimiento experimental repetible). Luego, estando el sistema en $\psi(x)$, medimos la posición. Es claro que no siempre obtendremos el mismo valor de x , sin embargo, después de un número enorme de repeticiones obtendremos muchos valores de la posición x y los promediamos simplemente sumando todos los valores y luego promediando sobre ellos. Por supuesto, si realizamos un número gigantesco de mediciones podríamos hacer un histograma de los valores de x : este deberá ser $|\psi(x)|^2$. El punto es que existe un procedimiento objetivo que nos permite concluir y verificar que, efectivamente, $|\psi(x)|^2$ es la probabilidad mencionada.

Lo interesante es que como $\psi(x)$, por suposición, no es una eigenfunción de \hat{p} , tampoco tenemos certeza en el valor de \hat{p} y, por lo tanto, podemos preguntarnos: dado que el estado es $\psi(x)$, cuál es la probabilidad de que, si medimos el momento \hat{p} de la partícula, lo hallemos con valores entre p y $p + dp$? La sugerencia es, así como el valor de expectación de \hat{x} , $\langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle$, dado por (28), es el promedio de las mediciones de la posición, entonces, el promedio de las mediciones del momento debe ser el valor de expectación del momento \hat{p} en el estado $\psi(x)$, $\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{p} \psi(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x) dx \end{aligned} \quad (29)$$

La segunda línea nos permitiría calcular el valor del promedio de \hat{p} si conociéramos la función de onda $\psi(x)$. Lo que queremos ahora, sin embargo, es ver su relación con la función $\tilde{\psi}(p)$. Para esto, reemplacemos tanto $\psi(x)$ como $\psi^*(x)$ por sus expresiones en términos de $\tilde{\psi}(p)$, expresión (26):

$$\begin{aligned}\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{p} \psi(x) dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}^*(p') \phi_{p'}^*(x) dp' \right) \hat{p} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p'') \phi_{p''}(x) dp'' \right) dx\end{aligned}$$

Notamos, de manera crucial, que \hat{p} sólo actúa sobre la función $\phi_{p''}(x)$ que está a su derecha (ya que es una derivada sobre x) dando $\hat{p}\phi_{p''}(x) = p''\phi_{p''}(x)$,

$$\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}^*(p') \phi_{p'}^*(x) dp' \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(p'') p'' \phi_{p''}(x) dp'' \right) dx \quad (30)$$

Agrupamos la integral sobre x ,

$$\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}^*(p') \tilde{\psi}(p'') p'' \left(\int_{-\infty}^{\infty} \phi_{p'}^*(x) \phi_{p''}(x) dx \right) dp' dp''. \quad (31)$$

Usamos la relación de ortonormalización (19),

$$\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}^*(p') \tilde{\psi}(p'') p'' \delta(p' - p'') dp' dp'', \quad (32)$$

y aplicamos la función Delta (quitando las “primas”)

$$\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}^*(p) \tilde{\psi}(p) p dp. \quad (33)$$

Es decir, el valor de expectación de \hat{p} es

$$\langle \psi | \hat{p} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} p |\tilde{\psi}(p)|^2 dp, \quad (34)$$

lo que indica que a $|\tilde{\psi}(p)|^2 dp$ se le puede adjudicar la interpretación de que, si se mide \hat{p} , es la probabilidad de hallar al momento con valor entre p y $p + dp$. Es fácil checar que si cambiamos \hat{p} por la unidad $\hat{1}$, obtenemos

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |\tilde{\psi}(p)|^2 dp = 1 \quad (35)$$

que es igual a 1 porque $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ es la norma del estado $\psi(x)$... la comparación con el experimento corroborará que el promedio de momento está de acuerdo con las expresiones anteriores. Por lo tanto, $|\tilde{\psi}(p)|^2$ es la probabilidad del momento. Debido a que medir la posición o el momento es una prerrogativa del experimentador, llegamos a la conclusión que para calcular las propiedades estadísticas de las mediciones podemos usar indistintamente $\psi(x)$ o $\tilde{\psi}(p)$.

Dejamos al lector el siguiente ejercicio: Calcule el valor de expectación de \hat{x} usando $\tilde{\psi}(p)$, es decir, tiene que calcular

$$\langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}^*(p) \hat{x} \tilde{\psi}(p) dp. \quad (36)$$

Pregunta: cuál es la *forma* del operador \hat{x} actuando sobre $\tilde{\psi}(p)$?

2 De dónde “obtenemos” las funciones de onda $\psi(x)$?

Esta sección pretende dar un resumen de los elementos de la mecánica cuántica de una partícula en 1 dimensión espacial, de tal forma que podamos interpretarla de forma coherente y cerrada. Se usarán varios “teoremas” útiles e importantes, la mayoría de ellos sin demostrar, con el afán de no distraernos en las matemáticas y poder llegar a nuestro objetivo. Debido a que en clase se analizó con detalle el problema de una partícula en una caja, usaremos con libertad los conceptos de espacio de Hilbert y sus bases ortonormales y completas.

Fijemos ideas primero. Supongamos un sistema de una partícula de masa m en 1 dimensión, tal que su Hamiltoniano está dado por,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}), \quad (37)$$

con $V(x)$ un potencial “decente”. Los operadores \hat{p} y \hat{x} denotan las cantidades físicas del momento y la posición. Un problema típico es el siguiente: Sea $\psi(x)$ el estado del sistema al tiempo $t = 0$. Entonces, al tiempo t , el estado es,

$$\psi(x, t) = e^{-i\hat{H}t/\hbar} \psi(x), \quad (38)$$

que es la solución formal a la ecuación de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t) \quad (39)$$

con condición inicial $\psi(x, 0) = \psi(x)$. Una condición adicional es que exigimos que la función de onda esté normalizada para todo tiempo,

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1. \quad (40)$$

Haciendo tecnicismos a un lado, la pregunta es ¿cuál es el significado de $\psi(x)$? es decir, ¿cómo la relacionamos con posibles experimentos que hagamos? ¿cómo “obtenemos” $\psi(x)$ o, en otras palabras, cómo podemos saber que el sistema está en el estado dado por $\psi(x)$? Esto es lo que quisiéramos contestar.

Lo que sí sabemos es que, *si* el estado del sistema está dado por $\psi(x)$, entonces:

- $|\psi(x)|^2 dx$ es la probabilidad de hallar el valor x de la posición, si medimos \hat{x} .

- $|\tilde{\psi}(p)|^2 dp$ es la probabilidad de hallar el valor p del momento, si medimos \hat{p} , con

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(p) &= \langle \phi_p | \psi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \phi_p^*(x) \psi(x) dx \end{aligned} \quad (41)$$

donde

$$\phi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad (42)$$

es el elemento p de la base del momento,

$$\hat{p}\phi_p(x) = p\phi_p(x) \quad \forall p \in \mathbb{R} \quad (43)$$

El conjunto de las $\phi_p(x) \quad \forall p \in \mathbb{R}$ es una base del espacio de Hilbert \mathcal{H} de las funciones de onda.

• $|a_n|^2$ es la probabilidad de hallar el valor E_n de la energía, si medimos \hat{H} , con

$$\begin{aligned} a_n &= \langle \Phi_n | \psi \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_n^*(x) \psi(x) dx \end{aligned} \quad (44)$$

y $\Phi_n(x)$ es el elemento n de la base de la energía,

$$\hat{H}\Phi_n(x) = E_n\Phi_n(x) \quad \forall n = 0, 1, 2, \dots \infty. \quad (45)$$

El conjunto de las $\Phi_n(x) \quad \forall n = 0, 1, 2, \dots \infty$, es una base del espacio de Hilbert \mathcal{H} de las funciones de onda. Un ejemplo es la partícula en una caja o el oscilador armónico.

Un detalle crucial es que, si el estado es $\psi(x)$ y medimos \hat{p} y hallamos, digamos, p_0 , entonces adquirimos *certeza* de que el valor del momento es p_0 y, por lo tanto, el estado del sistema ya no es $\psi(x)$ sino $\phi_{p_0}(x)$. De manera análoga, si el estado es $\psi(x)$ y medimos \hat{H} y hallamos E_m , entonces la *certeza* ahora es que el valor de la energía es E_m y, entonces, el estado del sistema otra vez ya no es $\psi(x)$ sino $\Phi_m(x)$. Es claro que hay algo más general detrás de esto, no sólo aplicable a \hat{p} o \hat{H} . Es decir, concluiremos que *cualquier* estado $\psi(x)$ es consecuencia de que tenemos certeza de *algo* que medimos, no necesariamente \hat{x} , ni \hat{p} , ni \hat{H} . Veamos, paso a paso.

El Principio de Incertidumbre. Primera Parte. Esta es la piedra angular de la mecánica cuántica. El enunciado matemático es que si \hat{x} y \hat{p} son los operadores de posición y momento en el espacio de Hilbert \mathcal{H} , deben obedecer que su conmutador es,

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (46)$$

Este es un postulado o “principio” no deducible de nada previo, es el Principio de Incertidumbre.

Teorema 1 Si postulamos que la acción de \hat{x} sobre cualquier función de onda $\psi(x)$ en \mathcal{H} es

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x) \quad (47)$$

entonces, por la relación (46), la base de \hat{p} ,

$$\hat{p}\phi_p(x) = p\phi_p(x) \quad \forall p \in \mathbb{R} \quad (48)$$

está dada por

$$\phi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \quad \forall p \in \mathbb{R}. \quad (49)$$

Corolario 1.1 De lo anterior se sigue que la acción de \hat{p} sobre cualquier función de onda $\psi(x)$ en \mathcal{H} es

$$\hat{p}\psi(x) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(x). \quad (50)$$

Note que esta secuencia de resultados parece estar “al revés” de como lo introdujimos en el curso. No es así. La forma en que lo hicimos fue *motivada* por el trabajo de de Broglie, pero a sabiendas de que estaba matemáticamente fundamentada.

Corolario 1.2 Si $\psi(x)$ es el estado del sistema, función de onda en \mathcal{H} , entonces la relación (46) implica que

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (51)$$

donde $\Delta x = (\langle \psi | \hat{x}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{x} | \psi \rangle^2)^{1/2}$ es la fluctuación de \hat{x} en el estado $\psi(x)$ y análogamente para Δp . Note que este enunciado no se refiere a *un* experimento o a nuestra inhabilidad de medir de manera precisa \hat{x} o \hat{p} . Es un enunciado sobre resultados estadísticos de mediciones de \hat{x} ó de \hat{p} de un sistema estando siempre en el estado $\psi(x)$. Regresaremos a este punto en la Segunda Parte del Principio de Incertidumbre.

Operadores arbitrarios en el espacio de Hilbert \mathcal{H}

Dados \hat{x} y \hat{p} , con su regla de conmutación (46) y con sus acciones sobre cualquier estado $\psi(x)$, podemos construir un operador arbitrario \hat{f} de la siguiente manera,

$$\hat{f} = f(\hat{x}, \hat{p}), \quad (52)$$

donde $f(x, p)$ es una función “decente” en el sentido que puede expresarse como una serie de potencias, por ejemplo,

$$\hat{f} = \sum_{mn} c_{mn} \hat{x}^n \hat{p}^m \quad (53)$$

donde la suma puede ser finita o infinita y los coeficientes c_{mn} pueden ser complejos en general. La operación de \hat{f} sobre $\psi(x)$ puede escribirse como

$$\hat{f}\psi(x) = f(x, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x})\psi(x). \quad (54)$$

Es evidente que como \hat{x} y \hat{p} no conmutan, el orden en que aparezcan en la serie (53) es importante. Como ejemplos adicionales considere

$$\hat{g}_1 = \hat{x}\hat{p} \quad \hat{g}_2 = \hat{p}\hat{x}. \quad (55)$$

Estos operadores no son iguales, como puede corroborarse viendo como actúan sobre una función de onda $\psi(x)$.

Dado un operador \hat{f} definimos su operador **Hermitiano conjugado** \hat{f}^\dagger (que se lee “f-daga”), de la siguiente manera: Sean $\psi(x)$ y $\phi(x)$ dos funciones de onda arbitrarias. El elemento de matriz de \hat{f} entre ϕ y ψ se define como

$$\langle \phi | \hat{f} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) \hat{f}\psi(x) dx. \quad (56)$$

Esta cantidad, en general, es un número complejo. Dado este número, el operador Hermitiano conjugado a \hat{f} es

$$\begin{aligned} \langle \phi | \hat{f}^\dagger | \psi \rangle &= \left(\langle \psi | \hat{f} | \phi \rangle \right)^* \\ \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) \hat{f}^\dagger \psi(x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \hat{f} \phi(x) dx \end{aligned} \quad (57)$$

La operación de hallar el Hermitiano conjugado de un operador es el análogo, en operadores, de hallar el complejo conjugado de un número complejo.

Operadores Hermitianos

Se dice que un operador \hat{f} es Hermitiano si es igual a su Hermitiano conjugado \hat{f}^\dagger ,

$$\hat{f}^\dagger = \hat{f}. \quad (58)$$

Esto puede escribirse como,

$$\langle \phi | \hat{f}^\dagger | \psi \rangle = \langle \phi | \hat{f} | \psi \rangle \quad (59)$$

sin embargo, usando la definición de Hermitiano conjugado, obtenemos una propiedad que obedece \hat{f} :

$$\left(\langle \psi | \hat{f} | \phi \rangle\right)^* = \langle \phi | \hat{f} | \psi \rangle. \quad (60)$$

En palabras: un operador es Hermitiano si sus elementos de matriz son iguales a sus elementos transpuestos conjugados.

Teorema 2. FUNDAMENTAL sobre los operadores Hermitianos

A toda base completa y ortonormal del espacio de Hilbert \mathcal{H} , le corresponde un operador Hermitiano, y viceversa, tal que sus eigenvalores correspondientes son reales.

Esto se expresa de la siguiente manera: Sea el conjunto de funciones de onda $\zeta_n(x)$, para $n = 0, 1, 2, \dots$, una base completa y ortonormal. Es decir, obedecen,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \zeta_m^*(x) \zeta_n(x) dx = \delta_{mn} \quad \text{ortonormalidad} \quad (61)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} \zeta_n(x) \zeta_n^*(x') = \delta(x - x') \quad \text{completez} \quad (62)$$

Revise que las dos condiciones anteriores garantizan que cualquier estado $\psi(x)$ en el espacio de Hilbert puede escribirse como una combinación lineal de los elementos de la base $\zeta_n(x)$.

Ahora, el teorema garantiza que existe un operador Hermitiano $\hat{g} = \hat{g}^\dagger$, tal que los elementos de la base son eigenfunciones de \hat{g} con eigenvalores reales:

$$\hat{g} \zeta_n(x) = g_n \zeta_n(x) \quad g_n \in \mathbb{R} \quad \forall n. \quad (63)$$

El teorema funciona al revés también: para todo operador Hermitiano sus eigenfunciones forman una base completa y ortonormal, y sus eigenvalores son reales.

Por definición, todas las eigenfunciones son diferentes, $\zeta_n(x) \neq \zeta_m$ si $n \neq m$. Sin embargo, no existe ninguna condición sobre los eigenvalores,

excepto que son reales. Esto deja abierto que los eigenvalores puedan o no ser diferentes entre ellos. Es decir, puede ocurrir que para dos eigenfunciones $\zeta_n(x)$, $\zeta_m(x)$, $n \neq m$, sus eigenvalores sean iguales, $g_n = g_m$. A esto se le llama *degeneración* de los eigenvalores. El Teorema 3 abajo permite remover esta ambigüedad, crucial para la interpretación de la teoría.

Corolario 2.1 Sean $\hat{f} = \hat{f}^\dagger$ y $\hat{g} = \hat{g}^\dagger$ dos operadores Hermitianos. La base de \hat{g} son las funciones $\zeta_n(x)$ y sean $\phi_m(x)$ las eigenfunciones de \hat{f} ,

$$\hat{g} \phi_m(x) = f_n \phi_m(x) \quad f_n \in \mathbb{R} \quad \forall n. \quad (64)$$

a) Si $[\hat{f}, \hat{g}] \neq 0$ (no conmutan) entonces las bases de \hat{f} y \hat{g} son diferentes. Es decir, las eigenfunciones de \hat{g} son combinaciones lineales de las de \hat{f} y viceversa:

$$\zeta_n(x) = \sum_{m=0}^{\infty} c_{nm} \phi_m(x) \quad \forall n \quad (65)$$

donde los coeficientes $c_{nm} \neq \delta_{nm}$ y están dados por,

$$c_{nm} = \langle \phi_m | \zeta_n \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x) \hat{f}^\dagger \zeta_n(x) dx \quad (66)$$

b) Si $[\hat{f}, \hat{g}] = 0$ (conmutan) entonces las bases de \hat{f} y \hat{g} son la misma. Es decir, $c_{nm} = \delta_{nm}$ para toda n , o sea $\zeta_n(x) = \phi_n(x)$.

Teorema 3 Si dos operadores Hermitianos conmutan $[\hat{f}, \hat{g}] = 0$, entonces, ó $\hat{f} = \hat{f}(\hat{g})$ ó $\hat{g} = \hat{g}(\hat{f})$. Como ambos tienen la misma base con eigenvalores g_n y f_n , entonces $g_n = g_n(f_n)$ ó $f_n = f_n(g_n)$.

Corolario 3.1 Dada una base completa y ortonormal del espacio de Hilbert \mathcal{H} , siempre existe un operador \hat{h} Hermitiano tal que sus eigenvalores son todos diferentes,

$$\hat{h} \phi_m(x) = h_n \phi_m(x) \quad h_n \in \mathbb{R} \quad \forall n, \quad (67)$$

con $h_n \neq h_m$ para toda $n \neq m$. Esto quiere decir que todos los operadores que conmutan entre sí (que es un número infinito de ellos), todos tienen la misma base y todos son funciones de \hat{h} (o, los eigenvalores de todos ellos son funciones de los eigenvalores de \hat{h}). Este teorema sólo es válido para sistemas de una partícula en 1 dimensión. Este teorema permite *remover*

las degeneraciones que, como veremos abajo es de suma importancia para la interpretación de la teoría. Desafortunadamente, para sistemas con más de una partícula o de una en más de una dimensión, la situación es mucho más complicada.

Principio de Incertidumbre. Segunda Parte

Teorema 4. Sea $\psi(x)$ un estado arbitrario de un sistema. Sean $\hat{f} = \hat{f}^\dagger$ y $\hat{g} = \hat{g}^\dagger$ dos operadores arbitrarios Hermitianos. Definimos las fluctuaciones de \hat{f} y \hat{g} en $\psi(x)$ como

$$\begin{aligned}\Delta f &= \left(\langle \psi | \hat{f}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{f} | \psi \rangle^2 \right)^{1/2} \\ \Delta g &= \left(\langle \psi | \hat{g}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{g} | \psi \rangle^2 \right)^{1/2}.\end{aligned}\quad (68)$$

Se puede mostrar que las fluctuaciones obedecen la siguiente desigualdad,

$$\Delta f \Delta g \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | [\hat{f}, \hat{g}] | \psi \rangle|. \quad (69)$$

El teorema implica dos obvios casos: a) Si el conmutador es cero, $[\hat{f}, \hat{g}] = 0$, podemos hallar un estado $\psi(x)$ en que ambas fluctuaciones sean cero simultáneamente. b) Si el conmutador no es cero, $[\hat{f}, \hat{g}] \neq 0$, entonces en cualquier estado las fluctuaciones no pueden hacerse cero simultáneamente

Interpretación de la teoría

En su forma más sencilla, el Principio de Incertidumbre nos dice que si el estado del sistema es $\psi(x)$ las incertidumbres de la posición y el momento obedecen

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (70)$$

Esta expresión, como ya lo indicamos antes, no corresponde a una sólo medición de \hat{x} o de \hat{p} . Es una expresión estadística de un gran número de mediciones de \hat{x} o de \hat{p} , habiendo preparado al sistema al sistema en el estado $\psi(x)$ antes de cada una de dichas mediciones. Las incertidumbres Δx y Δp son una medida del ancho de las distribuciones $|\psi(x)|^2$ y $|\tilde{\psi}(p)|^2$. Debido a que su producto es mayor o igual que una constante positiva, como indica (70), es entonces imposible que ambas incertidumbres sean cero. Dependiendo de la función de onda $\psi(x)$, ó ambas incertidumbres son diferentes

ó sólo una de ellas es cero y la otra es infinita. En el segundo caso, en el que una de ellas sea cero, digamos $\Delta x = 0$, significa que se tiene certeza de esa variable \hat{x} y, por lo tanto, que corresponde a haber realizado una medición de tal variable. Al mismo tiempo la incertidumbre de la otra variable, Δp , es infinita, lo que indica que se tiene una total incertidumbre de esa variable. Esto implica que sólo es posible medir \hat{x} o \hat{p} pero no ambas a la vez. Sin embargo, nos preguntamos ¿y si nosotros medimos o tratamos de medir ambas a la vez? la respuesta es que, de acuerdo a la mecánica cuántica, eso debe ser imposible. Esto debe traducirse tal que debe ser imposible construir un instrumento que pueda medir \hat{x} y \hat{p} a la vez. Es decir, si construimos un instrumento que mida \hat{x} , con ese instrumento debe ser imposible medir \hat{p} , y viceversa. Hasta el día de hoy esto parece cumplirse. La extensión a observables que no sean \hat{x} ó \hat{p} , digamos $\hat{f} = \hat{f}^\dagger$ y $\hat{g} = \hat{g}^\dagger$ es que, si conmutan sí puede construirse un instrumento que mida a la dos simultáneamente, y si no conmutan entonces es imposible construir tal dispositivo.

Los teoremas anteriores, no exhaustivos pero suficientes para nuestros propósitos, nos permiten dar una interpretación de la mecánica cuántica, es decir, de los operadores, las funciones de onda y los coeficientes de los desarrollos de funciones de onda en una base. Varios de estos conceptos ya se han discutido, por supuesto, pero los teoremas anteriores permiten “cerrar” la interpretación.

Observables. Llamamos *observable* a toda cantidad física que, en el laboratorio, pueda ser o sea susceptible de ser medida o inferida. Suponemos que para lograr tal medición o inferencia en un sistema dado, se realizó un experimento o medición explícita en el sistema con un aparato de medición, en el instante en el que se desea saber el resultado de la medición o en un instante previo. La conexión fundamental con la teoría es que a cada observable se le asocia un operador Hermitiano. Y viceversa, a todo operador Hermitiano se le asocia una observable. Por ejemplo a las cantidades físicas posición, momento y energía, se les asocia los operadores Hermitianos \hat{x} , \hat{p} y \hat{H} .

La primera razón por las que a las observables se les asocia un operador Hermitiano es porque los eigenvalores de estos últimos son reales. Entonces, como en el laboratorio a lo que se mide se le asocia un número real, la interpretación es que los eigenvalores f_n del operador \hat{f} son los únicos valores *posibles* que la cantidad física asociada a \hat{f} puede tomar. Es importante en-

tonces recalcar que si medimos \hat{f} y obtenemos un valor dado, ese valor debe ser uno de los eigenvalores. Sobra enfatizar que esto se ha comprobado de manera precisa. Podemos afirmar, entonces, que si se realiza una medición de \hat{f} y se obtiene, digamos, el eigenvalor f_l , se tiene *certeza* de que el valor de la observable \hat{f} es f_l .

Lo anterior da lugar a la segunda razón de que a las observables se les asocie un operador Hermitiano: Dado que cada eigenvalor f_n corresponde a una eigenfunción $\phi_n(x)$, entonces, la certeza de que el valor de la observable es f_n , se traduce a que tenemos certeza de que el *estado* del sistema es $\phi_n(x)$. Note que podría haber una ambigüedad en la determinación del estado si el eigenvalor fuera degenerado. Es decir, si $f_n = f_m$ para $n \neq m$, entonces la medición de f_n (igual a f_m) nos deja la ambigüedad de que el estado sea $\zeta_n(x)$ ó $\zeta_m(x)$. Y es aquí donde entra la importancia del Teorema 3: si medimos \hat{h} , el operador con todos sus eigenvalores diferentes (i.e. sin degeneraciones), se remueve la ambigüedad. Esto nos indica que las cantidades relevantes a ser medidas son sólo aquellas como \hat{h} , que no tienen degeneraciones. El valor de todas las observables \hat{g} que sean funciones de \hat{h} quedan inmediatamente determinadas, sin necesidad de medirlas. En conclusión, midiendo \hat{h} y obteniendo h_n el estado queda únicamente determinado.

La tercera razón, debida a la completez de la base, es que, si antes de la medición teníamos certeza de que el estado era una función de onda $\psi(x)$, entonces podemos afirmar que *si* midiéramos \hat{h} (aunque no la midamos!), existe una probabilidad $|c_n|^2$ de que hallemos el valor h_n , donde

$$c_n = \langle \zeta_n | \psi \rangle. \quad (71)$$

Es decir, hemos supuesto que, debido a la completez de la base,

$$\psi(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \zeta_n(x). \quad (72)$$

Esto, aúnado con el Principio de Incertidumbre (Primera y Segunda Parte), nos indica que sólo podemos desarrollar la función de onda en una sólo base a la vez, no en dos o más. Es decir, sólo podemos hacer la predicción de la medición de una observable \hat{h} (y de todas las conmuten con ese operador) a la vez, implicando que se puede hacer usando un dispositivo experimental dado. Si queremos predecir las probabilidades de otra observable \hat{f} que no

conmute con la anterior, $[\hat{h}, \hat{f}] \neq 0$, entonces tenemos que desarrollar al estado $\psi(x)$ en la base de \hat{f} , diferente a la de \hat{h} , implicando ahora que usaremos el dispositivo que mide \hat{f} pero que no puede medir \hat{h} .

¿Cómo obtenemos $\psi(x)$? Con lo anterior ya podemos afirmar qué quiere decir la frase “suponga que el sistema está en el estado *arbitrario* $\psi(x)$ ” ... sólo necesitamos el siguiente teorema:

Teorema 5. Toda función de onda $\psi(x)$ en el espacio de Hilbert \mathcal{H} es un elemento de alguna base de \mathcal{H} , es decir, $\psi(x)$ es una eigenfunción de *algún* operador Hermitiano correspondiente a un eigenvalor. Por lo tanto, cuando afirmamos que el estado del sistema es $\psi(x)$ es porque está implícito que se realizó alguna medición que nos dió certeza de que el estado era $\psi(x)$.

Con lo anterior (y con la evolución temporal dada por el propagador, conociendo el Hamiltoniano del sistema) se “cierra” el procedimiento de cómo funciona y se usa la mecánica cuántica, desde un punto de vista operativo. Note, sin embargo, que todo tiene una connotación estadística, es decir, para hablar de probabilidades, certezas e incertidumbres, tenemos que pensar en una colección de experimentos en los que, por ejemplo, el sistema se puede colocar en el mismo estado $\psi(x)$ y luego se mide, digamos, el operador \hat{g} . Cada medición nos da un eigenvalor de \hat{g} y los coeficientes del desarrollo de $\psi(x)$ en la base de \hat{g} nos dan las fracciones de las veces que se hallaron los eigenvalores correspondientes. Sin embargo, queda una pregunta: ¿qué sucede en *cada* experimento por separado en que se tuvo certeza de $\psi(x)$, se midió \hat{g} y se obtuvo *un* eigenvalor? Es decir, la colección de todas las mediciones y las probabilidades nos pueden decir que ocurre en cada realización? La respuesta es no: La mecánica cuántica no nos indica que sucede en *una sólo* realización. Es decir, si sabemos con certeza que el estado es $\psi(x)$, primero, tenemos la libertad de medir lo que nos plazca. Una vez que decidimos que medir, sabemos de antemano que valores podemos obtener y sus probabilidades, pero es imposible predecir cuál valor exactamente se va a obtener. En la literatura a esto se le llama *indeterminismo*. Y la pregunta es, ¿qué ocurre realmente en cada medición? Aunque debemos ser claros que ni la teoría ni los experimentos han sido capaces de responder esa pregunta, siempre podemos recurrir a “interpretaciones”. Una es el colapso de la función de onda y la otra es la complementariedad de Bohr ... continuará.

3 Evolución temporal de los estados ...

En secciones anteriores ya hicimos alusión a la evolución temporal. En esta sección haremos una descripción un poco más detallada.

Primero insistimos que la descripción de un *sistema* está dado por su Hamiltoniano \hat{H} que, en los problemas de este curso, es el operador de la energía. Para partículas en una dimensión, el Hamiltoniano es típicamente,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad (73)$$

donde $V(x)$ es un potencial externo, representando a la energía potencial. Recordemos que siempre imponemos la regla de conmutación $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

El problema básico de la evolución temporal dentro de la mecánica cuántica se resuelve de la siguiente manera. Suponga que en un tiempo inicial t_0 , tenemos certeza que el estado del sistema está dado por $|\psi(t_0)\rangle$; es decir, realizamos la medición de algún operador \hat{O} cuyo resultado nos da la certeza que el estado del sistema es el indicado. Es importante recalcar el hecho que en tiempo inicial sabemos con certeza en qué estado está el sistema. Suponemos que el estado inicial está normalizado,

$$\langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = 1. \quad (74)$$

La pregunta es ahora: en que estado $|\psi(t)\rangle$ se encontrará el sistema a un tiempo $t > t_0$? La respuesta teórica (como fue motivada en clase, por medio de la hipótesis de de Broglie) es que dicho estado es tal que satisface la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad (75)$$

En palabras nos dice que (salvo por el factor $i\hbar$) el cambio en el tiempo del estado se halla aplicando el Hamiltoniano a dicho estado. La solución formal de la ecuación de Schrödinger es, simplemente,

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} |\psi(t_0)\rangle \quad (76)$$

el operador de evolución (o propagador) debe interpretarse como una serie,

$$e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{m!} \left(-i \frac{t-t_0}{\hbar} \right)^m \hat{H}^m \quad (77)$$

Debido a que la evolución temporal es equivalente a conocer el efecto del Hamiltoniano actuando sobre el estado inicial $|\psi(t_0)\rangle$, esto sugiere que estudiemos la base del Hamiltoniano, es decir, que hallemos los eigenestados y eigenvalores del \hat{H} .

La base del Hamiltoniano ... o el problema de eigenvalores de \hat{H}

El problema de eigenvalores de \hat{H} es,

$$\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle \quad (78)$$

es decir, tenemos que hallar el conjunto (infinito) de eigenestados $|\phi_n\rangle$, tal que a cada uno le corresponde el eigenvalor E_n . Sin demostrarlo, afirmamos que si el potencial $V(x)$ no está acotado para $|x| \rightarrow \infty$, es decir, si $V(x) \rightarrow \infty$ si $|x| \rightarrow \infty$, entonces el espectro E_n es denumerable. En otras palabras, la energía se encuentra cuantizada (como en los casos de la partícula en una caja o el oscilador armónico). La demostración de este enunciado puede hallarse en cualquier texto de mecánica cuántica.

Como el espectro es denumerable, el conjunto de los eigenestados $|\phi_n\rangle$, con $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$, forma una base ortonormal y completa del espacio de Hilbert del problema:

$$\langle \phi_m | \phi_n \rangle = \delta_{mn} \quad \text{ortonormalidad} \quad (79)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = \hat{1} \quad \text{completez} \quad (80)$$

Aunque en principio las anteriores expresiones son útiles para el uso de la teoría, típicamente la forma en que se encuentran los estados y los eigenvalores es a través de resolver una ecuación diferencial. Para visualizar este procedimiento, proyectamos la ecuación de eigenvalores de \hat{H} , ec. (78) en la representación de la posición \hat{x} :

$$\langle x | \hat{H} | \phi_n \rangle = E_n \langle x | \phi_n \rangle. \quad (81)$$

Usando la notación usual $\phi_n(x) = \langle x | \phi_n \rangle$, que nos define la función de onda del eigenestado n , y recordando que en esta representación podemos reemplazar el operador de momento como,

$$\hat{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad (82)$$

la ecuación de eigenvalores de la energía se convierte en la ecuación diferencial,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \phi_n(x) + V(x)\phi_n(x) = E_n \phi_n(x). \quad (83)$$

con el requerimiento que las funciones de onda están normalizadas. Esta ecuación puede resolverse analíticamente para unos cuantos potenciales $V(x)$, sin embargo, numéricamente no es muy complicado hallar la solución (para problemas en una dimensión!). Las condiciones de ortonormalidad se expresan ahora como,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(x)\phi_n(x)dx = \delta_{mn} \quad \text{ortonormalidad} \quad (84)$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} \phi_n(x)\phi_n^*(x') = \delta(x-x') \quad \text{completez} \quad (85)$$

Supongamos, sin pérdida de generalidad, que el Hamiltoniano de nuestro problema es del tipo descrito en esta sección, es decir, que la base es denumerable.

Expresando el estado arbitrario en la base de la energía ...

Regresamos al problema de la evolución de un estado arbitrario,

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} |\psi(t_0)\rangle. \quad (86)$$

La discusión anterior nos sugiere expresar el estado inicial en la base de la energía:

$$\begin{aligned} |\psi(t_0)\rangle &= \hat{1} |\psi(t_0)\rangle \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} |\phi_n\rangle \langle \phi_n | \psi(t_0)\rangle \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} a_n |\phi_n\rangle \end{aligned} \quad (87)$$

donde en la última línea hemos definido el coeficiente complejo a_n , como

$$a_n = \langle \phi_n | \psi(t_0)\rangle. \quad (88)$$

Debido a que conocemos el estado inicial y los estados de la energía, suponemos entonces que, en principio, también conocemos los coeficientes a_n . Notamos, entonces, que el estado inicial se puede escribir como una *superposición* de los estados de la energía. Debido a que estado inicial está normalizado a 1, $\langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle = 1$, se deja como ejercicio al lector que verifique que eso implica que

$$\sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 = 1. \quad (89)$$

Este resultado nos garantiza que podemos hacer la siguiente *interpretación*:

Si tenemos certeza que el estado del sistema es $|\psi(t_0)\rangle$, entonces, la probabilidad de que una medida de la energía nos arroje el valor E_n es $|a_n|^2$, con $a_n = \langle \phi_n | \psi(t_0) \rangle$.

Un uso poderoso de la mecánica cuántica es que no necesitamos medir la energía para saber las probabilidades de medición: los coeficientes a_n nos *predicen* dichas probabilidades. Sin embargo, si sí medimos la energía obtendremos algún valor, digamos E_{n_0} , que no puede predecirse de antemano. Es muy importante recalcar que no sólo no podemos *predecir* que ese valor de la energía se obtendría en esa medición, sino que es imposible hacerlo. Al menos, esa es la perspectiva de la teoría de la mecánica cuántica. Esto parecería sugerir que estamos frente a un fenómeno azaroso, como cualquiera de los que conocemos (volados, dados, predicción del clima, etc), pero como discutiremos más abajo, existe una diferencia profunda entre la perspectiva “azarosa” de la teoría cuántica y lo que llamamos la teoría clásica de los procesos estocásticos.

Con el desarrollo anterior del estado inicial podemos ahora hallar de manera muy sencilla el estado a un tiempo arbitrario posterior $t > t_0$. Para esto sustituimos el estado inicial, ec. (87), en la expresión del estado al tiempo t , ec. (??):

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} |\psi(t_0)\rangle \\ &= e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} \sum_{n=1}^{\infty} a_n |\phi_n\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-i\hat{H}(t-t_0)/\hbar} |\phi_n\rangle \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} a_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |\phi_n\rangle
\end{aligned} \tag{90}$$

donde en la última línea usamos el hecho que los kets $|\phi_n\rangle$ son la base de \hat{H} , ec. (78). Por conveniencia definimos el coeficiente

$$a_n(t) = a_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \tag{91}$$

tal que el estado al tiempo t puede escribirse como

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) |\phi_n\rangle. \tag{92}$$

Evidentemente, la evolución temporal del estado está contenida en los coeficientes $a_n(t)$. Es importante recalcar que, en lo que a la evolución concierne, este es el resultado final. Es decir, cualquier “pregunta” que le hagamos al sistema, está contenida en la expresión anterior, ec. (92). Analicemos dos casos sencillos, el primero en el que al tiempo t nos preguntamos por las probabilidades de mediciones de la energía y, el segundo, donde analizamos las probabilidades de mediciones de la posición \hat{x} .

Medición de la energía al tiempo t

Dado el estado al tiempo t , expresado como,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) |\phi_n\rangle. \tag{93}$$

nos indica inmediatamente que la probabilidad de hallar E_n en una medición de la energía es $|a_n(t)|^2$. Sin embargo, tenemos el siguiente resultado

$$\begin{aligned}
|a_n(t)|^2 &= a_n^* e^{iE_n(t-t_0)/\hbar} a_n e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \\
&= |a_n|^2
\end{aligned} \tag{94}$$

es decir, las probabilidades de la energía son independientes del tiempo. Siguiendo este resultado uno puede mostrar que el valor de expectación de la

energía también permanece constante: (haga todos los pasos!)

$$\begin{aligned}
 \langle \hat{H} \rangle &= \langle \psi(t) | \hat{H} | \psi(t) \rangle \\
 &= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} a_m^*(t) a_n(t) \langle \phi_m | \hat{H} | \phi_n \rangle \\
 &= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} a_m^*(t) a_n(t) E_n \langle \phi_m | \phi_n \rangle \\
 &= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} a_m^*(t) a_n(t) E_n \delta_{mn} \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} a_n^*(t) a_n(t) E_n \\
 &= \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 E_n \\
 &= \langle \psi(t_0) | \hat{H} | \psi(t_0) \rangle.
 \end{aligned} \tag{95}$$

Este es uno de los enunciados de la conservación de la energía en la mecánica cuántica.

Suponga ahora que los coeficientes a_n son tales que $a_{n_0} = 1$ y $a_n = 0$ si $n \neq n_0$. En ese caso, el estado inicial es

$$|\psi(t_0)\rangle = |\phi_{n_0}\rangle \tag{96}$$

es decir, el estado inicial es el estado n_0 de la energía. Es fácil ver que al tiempo t el estado es

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_{n_0}(t-t_0)/\hbar} |\phi_{n_0}\rangle \tag{97}$$

pero $|a_{n_0}(t)|^2 = |a_{n_0}|^2 = 1$. Es decir, el estado permanece siendo el estado de la energía n_0 . El resultado es que los estados de la energía *no evolucionan* en el tiempo. Se la acostumbra calificar a los estados de la energía como *estados estacionarios*.

Medición de la posición \hat{x} al tiempo t

Estando el sistema en el estado $|\psi(t)\rangle$ ahora nos preguntamos por la probabilidad de hallar el valor x si medimos la posición \hat{x} . Siguiendo nuestro procedimiento, lo primero es expresar al estado $|\psi(t)\rangle$ en la base de \hat{x} :

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \hat{1}|\psi(t)\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle\langle x|\psi(t)\rangle dx \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, t) |x\rangle dx \end{aligned} \quad (98)$$

donde en la última línea hemos identificado a la función de onda usual como,

$$\psi(x, t) = \langle x|\psi(t)\rangle. \quad (99)$$

Por lo tanto, la probabilidad de hallar a la posición \hat{x} entre x y $x + dx$ al tiempo t , es $|\psi(x, t)|^2 dx$. Lo interesante es ahora expresar dicha probabilidad en términos de la superposición de los estados de la energía para así tener una expresión con dependencia explícita en el tiempo. Para esto, hacemos las siguientes sustituciones (haga los pasos!):

$$\begin{aligned} |\psi(x, t)|^2 &= \langle \psi(t)|x\rangle\langle x|\psi(t)\rangle \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} a_m^*(t)\langle \phi_m|x\rangle \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t)\langle x|\phi_n\rangle \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} a_m^*(t)a_n(t)\phi_m^*(x)\phi_n(x) \end{aligned} \quad (100)$$

donde identificamos a la funciones de onda de la energía $\phi_n(x) = \langle x|\phi_n\rangle$. Ahora separamos la doble suma en una parte donde $n = m$ y otra con $n \neq m$:

$$\begin{aligned} |\psi(x, t)|^2 &= \sum_{n=1}^{\infty} a_n^*(t)a_n(t)\phi_n^*(x)\phi_n(x) + \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} a_m^*(t)a_n(t)\phi_m^*(x)\phi_n(x) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 |\phi_n(x)|^2 + \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} a_m^*(t)a_n(t)\phi_m^*(x)\phi_n(x) \end{aligned} \quad (101)$$

$$|\psi(x, t)|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |a_n|^2 |\phi_n(x)|^2 + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{\substack{n=1 \\ m \neq n}}^{\infty} a_m^* a_n e^{-i(E_n - E_m)(t - t_0)/\hbar} \phi_m^*(x) \phi_n(x) \quad (102)$$

Varias observaciones: Primero, notamos que $|\phi_n(x)|^2$ tiene la interpretación de ser la probabilidad de hallar el valor x de la posición, *si* el estado del sistema fuera $|\phi_n\rangle$. Por lo tanto, los términos de la primera suma, $|a_n|^2 |\phi_n(x)|^2$, además de ser independientes del tiempo, pueden interpretarse como la probabilidad de hallar el valor x de \hat{x} dado que la energía tenga el valor E_n . Si el segundo término de la doble suma no existiera, entonces la interpretación de la superposición

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} a_n(t) |\phi_n\rangle \quad (103)$$

sería que el estado del sistema tiene energía E_1 ó E_2 ó E_3 ó ... E_n , con probabilidades $|a_n|^2$... sin embargo, esta interpretación no es posible debido a la existencia del término de la doble suma que, nótese, involucra productos de estados con energías E_n y E_m . Este término es crucial pues es el que lleva la dependencia temporal; su interpretación es que representa la *interferencia* de los estados de la energía. Sin estos términos no podemos describir las observaciones experimentales.

La existencia de los términos de interferencia son los responsables de indicarnos que la mecánica cuántica *no es* una teoría de procesos estocásticos y que, si creemos que describe a la Naturaleza, entonces nos lleva a concluir que el “azar” en las mediciones cuánticas no es el mismo azar de los dados o de cualquier proceso que consideremos azaroso. En estos últimos el azar es una consecuencia del desconocimiento (o ignorancia), deliberado o no, de todas las variables que describen a un proceso dado. Es decir, en el azar usual, creemos que si tuviéramos conocimiento de *todas* las variables que describen una situación dada, entonces *no habría* azar. Este no es el caso en la mecánica cuántica ... seguiremos discutiendo este punto a lo largo del curso ... por cierto, como un detalle anecdótico, esta observación fue lo que tanto molestó a Einstein, argumentando que la mecánica cuántica es una teoría incompleta, y que expresó en una de sus famosas frases: “... Dios no juega a los dados con el Universo”.