ACERCAMIENTO DIDÁCTICO ELEMENTAL A LA MATEMÁTICA DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

Joaquín González Álvarez

Introducción

A partir de los trabajos a principios del siglo XX de Max Planck y Albert Einstein, se sabe que las radiaciones electromagnéticas como la luz, las de radio, los rayos infrarrojos y ultravioletas, etc., tienen la curiosa propiedad de que para ciertos fenómenos como las interferencias luminosas, el arco iris y otros se comportan como **ondas** (la propagación de una vibración u oscilación) y en otros como los fotoeléctricos (célula fotoeléctrica) se comportan como un flujo o chorro de partículas llamadas **cuantos** que en el caso de la luz se llaman **fotones.** Esta curiosa propiedad se llama "naturaleza dual de la radiación", que en el caso lumínico recibe el nombre de "naturaleza dual de la luz". De estos temas se ocupa la Mecánica Cuántica cuyos métodos matemáticos de análisis tratamos en el presente trabajo.

Primeros Conceptos

Los cuantos *no son* partículas de sustancia, son partículas de energía. Son la menor cantidad de energía que puede haber de determinada radiación. Así por ejemplo, la menor cantidad de energía que puede haber de luz verde, es el cuanto o fotón de luz verde. No puede haber medio cuanto, ni un tercio de cuanto, ni nada por el estilo.

El número de oscilaciones por unidad de tiempo en las ondas se llama frecuencia (la representaremos por f, en muchos libros se representa por la letra griega *nu*: υ). Por analogía, a los cuantos también se les asigna una frecuencia f. En el caso de la luz cada color se diferencia por su frecuencia. El rojo tiene relativamente baja frecuencia y el violeta, alta, pero todos tienen su frecuencia característica.

Los cuantos tienen una energía E que viene dada por la fórmula:

$$E = hf$$

Donde h es la *muy importante* constante de Planck, que veremos en *todas* las ecuaciones de la Mecánica Cuántica.

La constante de Planck h, tiene un valor sumamente pequeño, tanto que h sólo tiene un valor significativo cuando aparece junto a magnitudes sumamente pequeñas, que son las que trata la

Mecánica Cuántica, o sea las relativas a átomos, electrones, fotones, protones, neutrones, etc., que constituyen las llamadas partículas elementales y son, repetimos, el tema de la Mecánica Cuántica y de la Física Atómica, que son las ciencias del *micromundo.*

Cuando se trata de la física de las cosas grandes, o sea del *macromundo*, que es la física habitual del movimiento de los vehículos, proyectiles, etc, la h se hace insignificante y no aparece en sus ecuaciones. La característica matemática de la Mecánica Cuántica es la aparición en todas sus ecuaciones de la constante h.

En la Mecánica Cuántica es fundamental el *Principio de Incertidumbre* o *de Indeterminación* de Heisenberg, que expresa que de una partícula del micromundo (electrones, etc.) no se puede determinar a la vez, con la misma precisión, su posición **x**, y su cantidad de movimiento **p** (velocidad multiplicada por la masa). Esto es, mientras menos error en la medida de **x** cometamos, mayor error cometeremos en la medida de **p**. Podemos decir, no podemos, en el micromundo, medir a la vez, con precisión, la posición y la velocidad de una partícula.

Es por lo anterior, que en la Mecánica Cuántica, no se puede determinar con precisión el comportamiento de un sistema físico, sólo se puede hallar la *probabilidad* del comportamiento de un sistema. La probabilidad es una característica que diferencia radicalmente la Mecánica Cuántica de la Mecánica del macromundo.

El Principio de Incertidumbre de Heisenberg, se puede expresar con símbolos matemáticos así:

$$(\Delta x)(\Delta p) \approx h$$

donde Δ error, imprecisión… Se puede ver que si Δx se hace grande, entonces Δp se tiene que hacer pequeño para que su producto se mantenga constante. Y esto es lo que dice el *Principio de Incertidumbre* de Heisenberg.

El *Principio de Incertidumbre* no sólo se cumple para la coordenada y el impulso. Sino también para otras magnitudes como es el caso de la energía *E* y el tiempo *t*. Así se cumple que:

$$(\Delta E)(\Delta t) \approx h$$

También es un par complementario de incertidumbre el constituido por la amplitud de campo electromagnético u y su velocidad de variación $\partial u/\partial t$, por lo que se cumple:

$$(\Delta \partial u / \partial t)(\Delta u) \approx h$$

La Ecuación de Schrödinger

Así como en la mecánica clásica la ecuación fundamental es la conocida $F=ma$, en Mecánica Cuántica lo es la *Ecuación de Schrödinger*, la cual para el caso mas elemental de un solo grado de libertad e independencia del tiempo tiene la forma:

$$d^2\Psi / dx^2 + (8\pi^2 m / h^2)(E - V)\Psi = 0$$

(Ecuación Diferencial Estacionaria de Schrödinger)

donde ψ recibe el nombre de función de onda la cual es la incógnita de la ecuación. La función de onda expresa el comportamiento del sistema que se estudia. La ecuación diferencial temporal de Schrodinger se asemeja por su forma a la ecuación de onda en mecánica clásica y es así que a la Mecánica Cuántica se le llama también Mecánica Ondulatoria. En la ecuación de Schrodinger sólo hay que sustituir V por la energía potencial del sistema que se estudia y la E, energía total, permanece constante. La probabilidad de encontrar la posición de una partícula en este caso, de un solo grado de libertad, vendrá dada según Bohm, por el cuadrado de ψ que sólo dependerá de x. Para el caso mas general de tres grados de libertad dependerá de x,y,z. Cuando el sistema estudiado depende también del tiempo, se requerirá de la ecuación de Schrödinger adaptada a esta situación y entonces la función de onda ψ dependerá de x,y,z,t y por ende también su cuadrado para determinar la probabilidad.

Veamos como se aplica la antes vista *Ecuación Estacionaria de Schrödinger* para el caso del movimiento libre ($V=0$) de una partícula entre dos paredes rígidas situada una en $x=0$ y la otra en $x=L$.

Haciendo $V=0$ en la ecuación se tendrá:

$$d^2\Psi/dx^2+\left(8\pi^2m/h^2\right)E\Psi=0$$

cuya solución puede comprobarse por integración o sustitución en la ecuación, que es:

$$\Psi=Asen\sqrt{(8\pi^2m/h^2)E}x$$

y como nada mas llega la partícula hasta $x=L$, para este valor $\psi=0$ se tendrá que cumplir que el seno debe ser 0 y por tanto

$$\sqrt{\left(8\pi^2m/h^2\right)E}L=n.\pi$$

y por tanto:

$$E_n=n^2h^2/8mL^2 \qquad n=1,2,3,...$$

Para cada valor del número entero n al cual se le llama *número cuántico principal*, la energía toma un valor al que se le llama *valor del estado estacionario* n.

En el caso de los átomos mientras un electrón se mueve en un nivel estacionario de energía ni emite ni absorbe energía según el Postulado de Bohr. Si el electrón pasa de un nivel de energía E_2 a otro de menor energía E_1 se emite un fotón cuya frecuencia se calcula mediante la ya vista $E=hf$ donde E es la diferencia entre las de los dos niveles involucrados. Caso de que el paso del electrón sea de un nivel de menor energía a uno de mayor, se absorbe un fotón.

Antes de continuar este breve recorrido por lo mas elemental de la Mecánica Cuántica, nos referiremos a la llamada *onda de De Broglie* que se asocia a toda partícula cuya longitud de onda viene dada por $\lambda= h/mv$ donde m es la masa de la partícula y v su velocidad. Dada la pequeñez de h es evidente que sólo la onda de De Broglie se manifestará en partículas del micromudo, el mundo de la Mecánica Cuántica.

La teoría de la longitud de onda de Louis de Broglie, es de pensar que motivó a Schrödinger para su desarrollo del tratamiento ondulatorio de la Mecánica Cuántica centrada en su ecuación. Volvamos a ésta para mostrar cómo aparece implícita la expresión de $\lambda=h/mv$ al aplicar la la ecuación $H\psi=E\psi$ a la partícula libre:

$$h^2/8\pi^2m\ d^2\psi/dx^2 = E\psi$$

y en esta ocasión hallaremos la solución por el método de operadores:

$$D^2 + 8\pi^2 mE/h^2 = 0$$

con lo cual $D = \pm i\left(8\pi^2 mE/h^2\right)^{1/2}$, y por tanto:

$$\psi = A\ exp\ -i(8\pi^2mE/h^2)^{1/2}\ x$$

lo cual podemos escribir poniendo k en lugar del coeficiente de x, $\psi = A\ \ exp\ (-ikx)$.

Y como k es el número de onda igualamos el coeficiente de x a $2\pi/\lambda$ también hacemos $E=p^2/2m$ y despejando nos encontramos con la longitud de onda de Louis de Broglie $\lambda=h/mv$ ya que $p=mv$.

Pondremos un ejemplo mas de aplicación de la Ecuación de Schrödinger, esta vez al oscilador armónico. En la ecuación de Schrödinger se sustituye la energía potencial de nuestro caso $V= m\omega^2x^2/2$. La x tomará el valor de la amplitud en el momento en que E=V. La ecuación tomará la forma:

$$d^2\psi/dx^2 + 8\pi^2mE\psi/h^2 - (2\pi m\varpi/h)^2x^2\psi = 0..$$

Así la función de onda será:

$$\psi = N\ exp\ (-\ x^2/2\ a^2)$$

donde a es la amplitud y N un coeficiente de normalización.

La longitud de onda de De Broglie se vincula al momento angular del electrón en su órbita del siguiente modo. Según la teoría de De Broglie, la longitud de la órbita debe ser igual a un número entero de longitudes de onda $\lambda=h/mv$, así que llamando r al radio de la órbita se cumplirá que $2\pi r=nh/mv$ donde n número entero. Por tanto se cumplirá que $mvr=nh/2\pi$. En el primer miembro tenemos la expresión del momento angular y la expresión completa muestra la cuantificación de dicha magnitud. Así como a los niveles de energía se le asigna como vimos, el número principal n, al momento angular se le hace corresponder un segundo número cuántico l. Como un electrón es una carga eléctrica que se mueve alrededor del núcleo según el modelo atómico de Rutherford –Bohr, constituye una corriente eléctrica y por ende crea un campo magnético por lo cual un tercer número cuántico m caracteriza al electrón. Por último, el electrón se comporta como si tuviera un movimiento de rotación similar al de una peonza, aportando un momento magnético adicional de espín al cual le corresponde un cuarto número cuántico s.Según el Principio de Exclusión de Pauli, en un mismo nivel de energía no puede haber mas de un electrón con el mismo juego de números cuánticos n, l, m, s.

La Ecuación de Schrödinger en función del tiempo para partícula libre y una sóla variable espacial viene dada por la siguiente expresión:

$$-h^2/8\pi^2m\ d^2\psi/dx^2 = ih/2\pi\ d\psi/dt$$

cuya solución es, como puede comprobarse: $\psi = A\ exp\ -i(2\pi Et/h - kx)$. .

Operadores

La Ecuación de Schrodinger la podemos escribir así.

$$(-h^2/8\pi^2m\ \ d^2/dx^2 + V)\ \psi = E\psi$$

Notamos en la expresión anterior que el paréntesis y su contenido indican una operación sobre ψ que da como resultado la multiplicación de esa función por el valor E. A expresiones como ese paréntesis que indican que se efectúe una operación sobre una función, se les llama *operador*, concepto éste que cumple un papel muy importante en Mecánica Cuántica y que en general designaremos por Ä y toda expresión como esa última de la Ecuación de Schrodinger, utilizando operadores, la escribiremos así en general:

$$\ddot{A}\,\psi = a\,\psi$$

Una ecuación de ese tipo se denomina de *funciones propias*, en este caso las soluciones para ψ, y de *valores propios*, los que vaya tomando para cada solución, lo representado por **a**
Un ejemplo de ecuación de funciones y valores propios es la de Schrodinger. En el ejemplo que vimos la aplicación al movimiento de la partícula libres, los valores propios fueron los de la energía en cada uno de los niveles.

En el caso visto de la Ecuación de Schrodinger, al operador correspondiente al paréntesis se le llama *hamiltoniano* el cual se representa por ¨¨H. Así, dicha ecuación puede escribirse:

$$\ddot{H}\,\psi = E\,\psi$$

Otro operador muy utilizado en Mecánica Cuántica es el operador *momento lineal* ¨P= -ih/2π d/dx. En una ecuación de funciones y valores propios con este operador:

$$-ih/2\pi\; d/dx\; \psi = p\psi \qquad (p=mv)$$

Se tiene que la solución es

$$\psi = C\; exp\; i\; 2\pi p/h\; x$$

la cual comparada con la clásica onda plana:

$$u = c\; exp\; ikx \qquad (k=2\pi/\lambda)$$

nos lleva a la expresión de la longitud de la onda de De Broglie de la cual ya habíamos hablado:

$$\lambda = h/p$$

Para los casos en que se trate de tres variables, en los operadores habrá que utilizar el símbolo de derivada parcial, esto es, en vez de d, aparecerá ∂ para cada variable.

Los operadores para las variables son ellas mismas y para la energía potencial potencial también será ella misma. Esto es V.

Utilizando operadores se puede pasar de las conocidas expresiones de la Mecánica Clásica a las de la Mecánica Cuántica, sustituyendo la magnitud clásica por operadores cuánticos como los antes descritos, pero esto no quiere decir que el formalismo todo de la Mecánica Cúantica se puede obtener sencillamente con realizar la citadas sustituciones de magnitudes por operadores. Sin embargo en muchos casos podrá hacerse, como obtener (que no deducir) la Ecuación de Schrödinger a partir del empleo de la expresión clásica de la conservación de la energía:

$$p^2\,/2m + V = E$$

Donde en el primer término se reconoce a la energía cinética T. a la cual se suma la potencial V y se iguala a la energía total E.

Sustituyendo p por el operador cuántico correspondiente antes visto, se obtendrá la Ecuación de Schrödinger.

Conmutación de Operadores

Veamos el caso de conmutación del operador momentum con la coordenada. Si el operador es respecto a una coordenada distinta a aquella con la cual se investiga la conmutación, conduce a igualdad:. En la explicación en aras de la facilidad, designaremos al operador momentum respecto a x con el símbolo p, así tendremos para lo que acabamos de exponer que se cumplirá que: $py - yp = 0$.

Analicemos el caso en el cual el momentum es respecto a la misma coordenada con la cual se quiere analizar la conmutación o no.

Veamos. $(px - xp)\psi = -h/2\pi\partial/\partial x(x\psi) + ih/2\pi x\partial\psi/\partial x = -ih/2\pi\psi$, o sea que no conmutan. De modo que se dará la conmutación del tipo py pero no la del tipo px. De aquí se infiere que no puede determinarse al mismo tiempo la posición y el momentum de una partícula a lo largo de la misma coordenada, lo cual está contenido en el Principio de Indeterminación o de Incertidumbre de Heisenberg que ya vimos anteriormente. Este principio como ya hemos dicho, se cumple también para el par energía (E)-tiempo que toma precisar esa energía (t).: $\Delta E \Delta t \approx h$.

El Principio de Indeterminación de Heisenberg, como todos los conceptos y relaciones de la Mecánica Cuántica sólo se hace evidente a escala submicrocópica. Específicamente en la variante del Principio para el caso que acabamos de citar en el par energía-tiempo, éste se manifiesta con características notables para distancias inferiores a la longitud de Planck, la cual es de 1.616×10^{-33} cm. En el ámbito de estas dimensiones, la peculiar variación de la indeterminación del tiempo que toma la precisión de la energía, da lugar a que la fluctuación de ésta provoque la creación de pares partícula-antipartícula, en virtud de la ecuación relativística: $E=mc^2$.. Esta frenética producción de partículas-antipartículas, debida a las fluctuaciones cuánticas, producen deformaciones en el tejido del espacio-tiempo, a muy pequeña escala constituyendo lo que pudiéramos llamar rugosidades del espacio-tiempo. Esas deformaciones que contrastan por su pequeñez a la vez que gran curvatura con las suaves ondulaciones que prevé la Teoría General de la Relatividad, es causa de la hasta ahora insalvable incompatibilidad de la Mecánica Cuántica y la Teoría General de la Relatividad. La presencia de las fluctuaciones cuánticas y consecuente aparición de materia en forma de pares partícula-antipartícula, se predicen a nivel sub-planckiano hasta en lo que se considera como vacío absoluto. Tal hecho motiva reflexiones y especulaciones de índole inclusive filosóficas.

Analicemos la justificación de la posibilidad de aparición de materia aún en lo que se denomina vacío absoluto. Al cumplirse la expresión $\Delta E \Delta t \approx h$ y al variar continuamente el tiempo, habrá variación de energía, y como $E= mc^2$ habrá creación de materia en forma de pares partícula-antipartícula.

De modo que el vacío absoluto no es tal vacío pero así aparece por la compensación continua entre creación de partículas y aniquilación por contacto materia-antimateria..

A partir de lo expuesto, habría que valorar la aseveración de la Teoría del Big Bang de que todo surgió de la nada.

Actualmente se trabaja por llevar adelante la Teoría de las Cuerdas y aunque no se ha podido llevar a la comprobación experimental, los teóricos de la misma plantean que como las cuerdas (sustitutas de las partículas elementales) no pueden tener dimensiones subplanckeanas no detectan las rugosidades del espacio-tiempo antes tratadas cuyas dimensiones son mas pequeñas que la longitud de Planck. Razonando de esa manera y apelando a un radical positivismo, los teóricos de las cuerdas piensan salvar la incompatibilidad entre Mecánica Cuántica y Teoría General de la Relatividad. Así esperan fundamentar el buscado gravitón eludiendo los molestos infinitos que la teoría de las partículas encuentra.

Mediante razonamientos semejantes a los vistos los teóricos de las cuerdas proponen la tesis de la no reducción a un punto geométrico del universo si se produce el supuesto Big Crunch que algunos auguran al universo como final del proceso iniciado en el Big Bang. Alegan que algunas de las extradimensiones que necesitan para sus fundamentaciones, se encuentran enrolladas y sus energías son de dos tipos: de vibración y de enrollado, la primera depende del radio y la segunda del inverso de éste. Dichas energías sumadas dan la total. Llegando el Big Crunch, tendiendo a dimensiones subplanckianas, la energía que depende directamente del radio decrece pero el colapso no se produce porque la energía que depende del inverso del radio, en compensación aumenta. En vez de un colapso se produce un rebote. En definitiva la Teoría de las Cuerdas no se enfrenta a singularidades que pongan en litigio la Teoría General de la Relatividad con la Mecánica Cuántica. .
.

Valores medios

Como ya hemos dicho, la Mecánica Cuántica es una ciencia probabilística por lo cual muchos conceptos de la Teoría de las Probabilidades tendrán que estar presentes en su tratamiento.
Uno de esos conceptos es el de densidad de probabilidad, la cual representaremos por φ se calculará mediante la fórmula:

$$\varphi = dW/dx$$

donde W probabilidad de ocurrencia en el intervalo dx. Se tendrá por tanto, que existe conmutación del tipo

$$dW = \varphi\ dx.$$

El valor medio de una variable x viene dado por:

$$<x> = \int x\varphi dx$$

En Mecánica Cuántica para el concepto análogo de φ se utiliza $(\psi)^2$, pero para ψ compleja que es el caso común, se representa ψ*ψ, que en la integral anterior se utiliza intercalando la variable entre la conjugada de la función de onda (la que aparece con asterisco) y la función de onda misma:

$$<x> = \int \psi^* x\, \psi dx$$

Cuando se trate de otra magnitud que no sea la coordenada, se colocará en vez de ésta la magnitud en cuestión. Si los límites son menos y mas infinito, la integral será igual a uno.

Conclusiones

Hemos daado una visión panorámica de manera mas bien elemental de los procedimientos matemáticos que se siguen para el estudio de la Mecánica Cuántica manteniendo constante relación con la base conceptual de dicha disciplina.

Bibliografía

Alonso, M. Física Atómica. Universidad de la Habana.
Byron, F. W. Mathematics of Classical and Quantum Physics.
Addison and Wesley Publishing Company, Mass.1970.
Greene, B.. The Elegant Universe. Vintage Books. New York.
Landau, L. y E. Lifshitz. Mecánica Cuántica. Reverté. Barcelona.
Page, L. y M. Alonso. Física Teórica. Cultural S.A. La Habana.
Treiman, S. The Odd Quantum. Princeton University Press. New Jersey.1999.