

Mecánica Cuántica

Por José Jesús MENA DELGADILLO

Introducción

El 14 de diciembre de 1900, Max Planck (1858-1947) leyó el trabajo intitulado “La teoría de la ley de distribuciones de energía del espectro normal”; en la reunión Alemana de Física, este trabajo fue el origen de la física cuántica, y fue hasta un cuarto de siglo después, cuando E. Schrödinger (1887-1961), W. K. Heisenberg (1901- 1976), N. Bohr (1885-1962), L. V. De Broglie (1892-1976) y otros desarrollaron la mecánica cuántica moderna.

La necesidad de establecer el estudio y comprensión de la mecánica cuántica, se manifiesta por las contradicciones sistemáticas de las leyes de la mecánica clásica que no concordaban con las observaciones de experimentales de algunos fenómenos y la explicación de estos conflictos solo se posibilitaba con la aplicación de las ideas de la mecánica cuántica.

Radiación de Cuerpo Negro

La descripción del movimiento de un cuerpo, esta dado por la mecánica clásica es adecuada, siempre y cuando dicha velocidad no se aproxime a la velocidad de la luz; en cuyo caso hay que aplicar la mecánica relativista.

Otra limitación de la mecánica clásica, ocurre cuando se estudia la materia de pequeñas dimensiones, es decir, a nivel atómico o subatómico. Por ejemplo la estructura nuclear o las partículas elementales, en donde es indispensable aplicar para su estudio los conceptos de mecánica cuántica, en su versión moderna llamada teoría de campos cuánticos.

Alrededor de 1900 el concepto idealizado de un “cuerpo negro”, que corresponde a un objeto que absorbe toda la radiación de la luz ; De manera que el físico alemán Max Planck, diseñó un experimento utilizando un pequeño orificio en la superficie de una cavidad, que es calentada. En el proceso la luz emitida por el orificio es bloqueada debido a que se clausura el orificio de dicha cavidad.

Implícitamente para construir el modelo que explique el comportamiento de la radiación del cuerpo negro, se concibe que la luz que emite la cavidad tiene un comportamiento ondulatorio, por lo cual es razonable suponer que la luz emitida corresponda a osciladores armónicos, por lo cual para estos osciladores corresponde una frecuencia dada. Este modelo es llamado “La ley de distribución de frecuencias de Rayleigh-Jeans.

De acuerdo con este modelo, el espectro de luz de la radiación de cuerpo negro tiene una distribución de energías dada por:

$$\rho_{\lambda} d\lambda = 8 \pi k T \frac{d \lambda}{\lambda^4} \quad (1)$$

En donde:

ρ_{λ} : Es la densidad de energía por unidad de longitud de onda de radiación en $d\lambda$ centrada en λ .

T: Es la temperatura absoluta.

K: Constante de Boltzmann.

El modelo anterior describe el espectro de radiación del cuerpo negro para longitudes de onda grandes, pero no puede explicarlo para longitudes de onda pequeñas.

Tratando de resolver este problema teórico, M. Planck realiza las siguientes suposiciones:

a) Las oscilaciones en el cuerpo negro no emiten luz en forma continua, y solo ocurre en el proceso de intercambio de sus amplitudes. Si la transición ocurre de una amplitud mayor a otra de amplitud menor, entonces resulta una emisión de luz. Si la transición ocurre de una menor amplitud a otra de mayor amplitud, entonces resulta la absorción de la luz en el oscilador.

b) Un oscilador puede emitir energía al campo de radiación o absorber energía, solo en unidades de energía llamadas cuanta teniendo una magnitud $h \nu$.

En donde:

h: Constante de Planck.

ν : frecuencia del oscilador.

Las suposiciones anteriores conducen a Planck al siguiente relación de distribución de energías para el cuerpo negro.

$$\rho_{\lambda} d\lambda = \frac{C_1}{\lambda^5} \frac{d \lambda}{\exp\left(\frac{c_2}{\lambda T}\right) - 1} \quad (2)$$

Donde:

$$C_1 = 2 \pi c^2 h.$$

$$c_2 = \frac{h c}{k}$$

$$h = 6.6262 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

$$k = 1.3806 \times 10^{-23} \frac{\text{J}}{^\circ \text{K}}$$

$$c = 2.9979 \times 10^8 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

λ : longitud de onda.

T: temperatura.

La luz se comporta como un paquete de ondas y un flujo de partículas, como se observa, en los fenómenos de interferencia y difracción. Por lo cual es necesario introducir una masa efectiva para cualquier fotón dada por la relación:

$$m_e = \frac{h \nu}{c^2} \quad (3)$$

y un momento:

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h \nu}{c} \quad (4)$$

Los conceptos de L. Dé boglie de una longitud de onda asociada a un electrón:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (5)$$

De las relaciones anteriores se incorporan los modelos, para determinar el momento y energía de los estados de los electrones en los átomos.

Los experimentos en donde se aplican estas ideas son entre otros:

a) Dispersión de fotones de Rayos X por medio de colisiones de electrones, realizado por A. H. Compton (efecto Compton), en donde se verifica la naturaleza dual de la luz.

b) Experimento de Davisson-Germer (1927), en el cual se observa el patrón de difracción, a partir de las interacciones de electrones de alta velocidad con la estructura de un cristal.

c) El modelo atómico de Bohr, en donde aplica las suposiciones de Planck, consistentes con la idea de niveles discretos de energía, que describe en forma precisa en el caso del Hidrógeno, sin embargo, en el caso de Helio solo lo hace en forma aproximada.

El concepto de la dualidad onda y partícula, resuelve el conflicto inicial de la naturaleza de las partículas subatómicas. Puesto que en ambos casos simplemente se manifiesta el comportamiento de la materia.

La descripción anterior se representa en unidades discretas de energía, llamados cuantos y dado por la relación:

$$E = h \nu \quad (6)$$

En particular N. Bohr propone que los niveles de energía de toda la materia son de la misma forma.

En el caso del fotón se asocia una onda electromagnética, en donde la amplitud del campo electromagnético esta dada por la función: $\Psi(x, t)$. Para cualquier partícula, en particular un fotón o electrón, tienen asociados una función de onda $\Psi(x, t)$.

Funciones de onda

La intensidad de una onda es proporcional a el cuadrado de la amplitud de la onda. La amplitud de la onda en el caso más puede ser compleja, en cuyo caso la intensidad es proporcional a la siguiente expresión:

$$|\Psi(x, t)|^2 = \Psi^* \Psi \quad (7)$$

En donde:

Ψ^* es el complejo conjugado de Ψ

El significado físico de la relación (7), corresponde a la característica cuántica de la partícula en la materia. La función de onda describe a su vez, la localización de la partícula en el espacio tiempo.

Max Born proporciona una interpretación en términos de la función de onda, como la probabilidad por unidad de longitud de encontrar la partícula en un punto y tiempo dado en el espacio.

Por lo tanto la probabilidad de encontrar la partícula en una longitud dx , esta dada por:

$$\Psi^* \Psi dx \quad (8)$$

Dado que (7) es una función de probabilidad, se requiere que se aplique una regla de normalización expresada de la forma:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dx = 1 \quad (9)$$

En el caso más general, para $\Psi(x, y, z, t)$ y $\Psi^* \Psi dx dy dz$, entonces, la probabilidad de encontrar la partícula en un elemento de volumen $dv = dx dy dz$, esta dada por la expresión:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* \Psi dv = 1 \quad (10)$$

La ecuación anterior, corresponde a una relación de incertidumbre propia de la mecánica cuántica, por lo tanto, en este caso se abandona el principio determinístico de la mecánica clásica. En donde no se puede predecir con absoluta exactitud, la trayectoria de la partícula.

La ecuación de Schrödinger

E. Schrödinger aprovecho los conceptos de la dualidad onda-partícula de la materia de L. Bogle (5), y la relación de M. Planck (6), para definir la expresión de la energía total de una partícula, dada por:

$$E = \frac{P^2}{2 m_o} + V \quad (11)$$

En la ecuación anterior, m_o es la masa en reposo de la partícula, es decir, es una expresión no-relativista.

La ecuación en una dimensión, en donde, se conjugan la teoría de L. Bogle y la función de onda, se denomina "La ecuación de Schrödinger", expresada formalmente de la forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V \Psi(x, t) = i \hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (12)$$

En donde: $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ y es conocida como la constante de Dirac.

(El termino i corresponde al hecho que Ψ es una función de onda compleja).

E. Schrödinger desarrolla la ecuación (12), debido a la característica ondulatoria de las partículas, es conveniente señalar que dicha ecuación, no derivable de primeros principios, como sería el caso de la segunda ley de I. Newton, en la mecánica clásica.

W. Heisenberg en 1925, desarrollo un modelo de álgebra matricial para tratar en forma alternativa los problemas que abordaba la ecuación de Schrödinger. Es decir, se aplicaban dos teorías matemáticas diferentes, para resolver un mismo problema físico.

Principio de Incertidumbre

Otra consecuencia del concepto de dualidad onda-partícula, en la materia subatómica, corresponde al principio de incertidumbre de Heisenberg. Este principio establece que dos cantidades en un sistema microscópico, no pueden ser medidas simultáneamente con precisión “infinita”.

Por ejemplo, si se considera un electrón. Su posición x y su momento P son conocidos solo con cierta precisión. Ahora si Δx es la incertidumbre de su posición y ΔP es la incertidumbre de su momento, entonces se establece la relación:

$$\Delta x \Delta P \geq h \quad (13)$$

Dado que h tiene un valor constante, entonces directamente de la relación (13), conocida como la relación de incertidumbre de Heisenberg. Por ejemplo. Si Δx tiende a ser pequeña, entonces como consecuencia ΔP tiende a aumentar. Por lo cual si precisamos el valor de x , entonces perdemos información de P y viceversa. Existen otras relaciones para expresar el principio de incertidumbre de Heisenberg, por ejemplo:

$$\Delta E \Delta t \geq h \quad (14)$$

En donde:

E: Energía de la partícula.

t: tiempo

Representación matricial de Heisenberg

Considerando el operador M con una matriz que describe un sistema físico, y en donde a partir de sus eigenvalores podemos conocer los resultados esperados en un experimento.

La ecuación de movimiento de Heisenberg esta dada por la expresión:

$$\dot{Q} = \frac{1}{i\hbar} [Q, H] \quad (15)$$

En donde:

Q: es una función implícita del tiempo.

H: es el operador Hamiltoniano de energía.

Si $Q = Q(t)$; entonces la relación (15), se convierte en:

$$\dot{Q} = \frac{1}{i\hbar}[Q, H] + \frac{\partial Q}{\partial t} \quad (16)$$

Para un sistema con n grados de libertad. La evolución del sistema físico, está dado por las siguientes ecuaciones de movimiento:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \quad (17)$$

En donde:

L: es llamada la función Lagrangiana, expresada por:

$$L = L\left(q_1, q_2, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_m, t\right) \quad y \quad \left(q_1, q_2, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_m\right) \in R^{2n}$$

Las ecuaciones de movimiento de las partículas, en la representación hamiltoniana, se expresa en la forma canónica :

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{P}_i \quad y \quad \frac{\partial H}{\partial P_i} = \dot{q}_i \quad (18)$$

Nótese la analogía formal con la formulación de la mecánica clásica hamiltoniana.

q_i : denota las coordenadas generalizadas del sistema físico.

P_i : denota los momentos generalizados del sistema físico.

La representación de la mecánica cuántica de P. Dirac.

La notación de bra-ket que introduce P. Dirac en la formulación de la mecánica cuántica, unifica en una misma simbología, la descripción de las cantidades observables y los operadores que operan en la mecánica matricial. Es decir, los operadores actuando como matrices. Así, como la descripción que se lleva a cabo en la mecánica ondulatoria.

A continuación se realiza una breve introducción de las propiedades y principios básicos de los bra-ket.

Sea la representación:

$$x = x^1 (1, 0, 0) + x^2 (0, 1, 0) + x^3 (0, 0, 1)$$

La expresión anterior se puede escribir, para vectores columna de la forma:

$$\aleph = \begin{bmatrix} x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x^1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ x^2 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ x^3 \end{bmatrix} = x^1 |1\rangle + x^2 |2\rangle + x^3 |3\rangle$$

La notación bra-ket de Dirac se basa en dos símbolos fundamentales:

a) bra: $\langle x_i |$

b) ket: $|x_j\rangle$

La aplicación del bra-ket, consiste en unirlos para representar el producto interno de dos vectores o dos funciones.

La operación suma entre 2 kets, se define si ambos son del mismo tipo y se denota, por:

$$|\Psi_1\rangle + |\Psi_2\rangle$$

Cada ket puede ser multiplicado por una constante, cuyo cuadrado representa la ocurrencia del estado representado por el ket, de manera tal que se pueden definir las siguientes combinaciones:

$$a|\Psi_1\rangle + b|\Psi_2\rangle$$

La probabilidad de que en un experimento ocurra Ψ_1 es: $|a|^2$ y la probabilidad de que en un experimento ocurra Ψ_2 es: $|b|^2$.

Cuando se suman dos o más kets, resulta una superposición de estados.

En la mecánica matricial se representa el producto interno de dos vectores x_i y x_k , se simboliza este hecho, de la forma:

$$\langle x_i | x_k \rangle$$

En el caso de cuando los vectores \aleph_i y \aleph_j , son vectores ortogonales y normalizados (vectores ortonormales), entonces el producto interno de los vectores, es:

$$\langle \aleph_i | \aleph_k \rangle = \delta_{ik}$$

En donde, $\delta_{i k}$ es la delta de Kronecker, que se define:

$$\delta_{i k} = \begin{cases} 1 & \text{cuando } i = k \\ 0 & \text{cuando } i \neq k \end{cases}$$

El bra asignado al vector, \aleph_i , proporciona una representación matricial como un vector renglón. El ket asignado al vector, \aleph_k , proporciona la representación matricial de un vector columna.

A todo ket se le puede asignar un bra que es su dual correspondiente. Dado un ket, podemos obtener su bra dual tomando el conjugado complejo del ket.

En notación bra-ket se aplica un operador O (matriz) que actúa sobre un vector, \aleph , y se expresa de la forma:

$$O | \aleph \rangle$$

En mecánica ondulatoria, el operador es diferencial actuando sobre una función de onda Ψ , que se denota de la forma:

$$O | \Psi \rangle$$

Utilizando la operación del producto de un ket con un bra, resulta:

$$\langle \Psi_1 | + | 0 \rangle \langle \Psi_2 | = \langle \Psi_1 | 0 \rangle \langle \Psi_2 | \quad (19)$$

En mecánica ondulatoria, se establece la siguiente ecuación de eigenvalores:

$$A | \alpha \rangle = a | \alpha \rangle \quad (20)$$

En donde: A es un operador y a es un eigenvalor.

Operador Hamiltoniano.

Un operador frecuente utilizado tanto en mecánica analítica (clásica) y mecánica cuántica, corresponde al Hamiltoniano.

El operador hamiltoniano, se define:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \quad (21)$$

En donde:

\hat{H} : es el operador Hamiltoniano.

\hat{T} : es el operador de energía cinética.

\hat{V} : es el operador de energía potencial.

En donde el operador cuantizado de la energía cinética, para una partícula que se mueve en la dirección x, esta dada por:

$$\hat{T}_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (22)$$

En el caso de una partícula libre, la energía cinética esta dada por:

$$E_c = \frac{p^2}{2m}$$

entonces:

$$p^2 = 2m E_c \quad (23)$$

Por lo tanto, aplicando operadores, resulta:

$$\hat{P}_x^2 = 2m \hat{T}_x \quad (24)$$

Sustituyendo la expresión (22) en (24), resulta:

$$\hat{P}_x^2 = 2m \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) = -\hbar^2 \frac{d^2}{dx^2} \quad (25)$$

Dado que:

$$\hat{P}_x^2 = \hat{P}_x \hat{P}_x \quad (26)$$

Por consistencia lógica, entre la relación (25) y (26), resulta:

$$\hat{P}_x = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (27)$$

Valores esperados

El valor esperado ó valor promedio de una propiedad A, se le puede asociar su correspondiente operador lineal \hat{A} . Considere a su vez, que a la coordenada x se le asocia un operador \hat{x} multiplicativo, entonces el valor esperado de x, esta definido por la expresión:

$$\langle x \rangle = \int_a^b x |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_a^b x \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx \quad (28)$$

Si: $x \Psi(x, t) = \hat{x} \Psi(x, t)$, entonces la relación (28), se expresa de la forma:

$$\langle x \rangle = \int_a^b \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx \quad (29)$$

En mecánica cuántica se establece, que un operador representa una cantidad física observable, que se obtiene de la forma:

$$\langle A \rangle = \int_a^b \Psi^* \hat{A} \Psi dV \quad (30)$$

En el caso de una dimensión:

$$\langle A \rangle = \int_a^b \Psi^*(x, t) \hat{A} \Psi(x, t) dx \quad (31)$$

En donde: $\Psi(x, t)$ es una función normalizada, que satisface la siguiente relación:

$$\int_a^b |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (32)$$

Operadores Hermitianos

En mecánica cuántica, a cualquier cantidad física se le puede asignar un operador (posición, velocidad, cantidad de movimiento lineal, energía, etc.). En particular la ecuación de Schrödinger puede ser expresada, en términos del operador Hamiltoniano.

Las operaciones que satisfacen los operadores Hamiltonianos, están dadas por:

a) Considere la suma y resta de los operadores \hat{A} y \hat{B} que operan sobre una función f , de manera que se satisface:

$$(\hat{A} + \hat{B}) f = \hat{A} f + \hat{B} f$$

$$(\hat{A} - \hat{B}) f = \hat{A} f - \hat{B} f$$

b) Para el producto de operadores, resulta:

$$(\hat{A} \hat{B}) f = \hat{A} (\hat{B} f)$$

c) El producto de un operador consigo mismo:

$$\hat{A}^2 = \hat{A} \hat{A}$$

Operador lineal.

\hat{A} es un operador lineal, si y solo si $\forall k_1, k_2 \in \mathbb{C}$, se satisface:

$$\hat{A}(k_1 f_1 + k_2 f_2) = k_1 \hat{A} f_1 + k_2 \hat{A} f_2$$

Conmutación de operadores

La conmutación de los operadores \hat{A} y \hat{B} , se define:

$$\left[\hat{A}, \hat{B} \right] = \hat{A} \hat{B} - \hat{B} \hat{A}$$

Si: $\left[\hat{A}, \hat{B} \right] = 0$, significa que \hat{A} y \hat{B} conmutan, en caso contrario no conmutan.

Sea \hat{A} un operador lineal que representa a la propiedad física A, entonces el valor probable (promedio) de A, esta dado por:

$$\langle A \rangle = \int \Psi^* (\hat{A} \Psi) dV$$

Dado que A es un número real, entonces se satisface:

$$\langle A \rangle = \langle A \rangle^*$$

Es decir:

$$\int \Psi^* \hat{A} \Psi dV = \left[\int \Psi^* \hat{A} \Psi dV \right]^* = \int \Psi (\hat{A} \Psi)^* dV \quad (33)$$

El operador \hat{A} , que satisface la relación (33), se conoce como operador Hermitiano.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, puede expresarse como una ecuación que involucra operadores, de la forma:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (34)$$

En donde el operador, esta dado por:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x)$$

Entonces; el operador Hamiltoniano, para una partícula en una dimensión se puede escribir de la forma:

$$\hat{H} \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (35)$$

Para el caso tridimensional la ecuación de Schrödinger se puede escribir de la forma:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z) \quad (36)$$

Postulados de la mecánica cuántica

Postulado 1. Existe una función de onda Ψ , que depende del espacio y el tiempo, que contiene la información de un determinado sistema de partículas.

Postulado 2. A cada observable físico (propiedad física medible), le corresponde un operador lineal Hermitiano.

A continuación se presenta una tabla de los operadores, que actúan en mecánica cuántica.

Observable	Operador
x	\hat{x}
\vec{r}	$\hat{\vec{r}}$
P_x	$\hat{P}_x = -i \hbar \frac{\partial}{\partial x}$
\vec{P}	$\hat{\vec{P}} = -i \hbar \nabla$
T_x	$\hat{T}_x = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$
T	$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$
$V(x)$	$\hat{V}(x)$
$V(x, y, z, t)$	$\hat{V}(x, y, z)$
E	$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{V}(x, y, z)$

Postulado 3. Los únicos valores posibles, que pueden resultar de la medición de una propiedad física A, son los valores propios a_i que aparecen como resultado de la ecuación de valores propios:

$$\hat{A} \Psi_i = a_i \Psi_i \quad (37)$$

En donde \hat{A} es el operador lineal Hermitiano.

Postulado 4. Las funciones propias de cada operador \hat{A} que represente a un observable físico forman un conjunto completo. Es decir la función de onda Ψ para cualquier estado se puede representar, como una superposición de funciones propias ortonormales $\{g_i\}$, para cualquier operador cuántico, es decir:

$$\Psi = \sum_i C_i g_i \quad (38)$$

Postulado 5. El valor promedio de la propiedad A de un sistema físico, esta descrito por la función de onda normalizada, dada por:

$$\langle A \rangle = \int \Psi^* A \Psi dV = \int A |\Psi|^2 dV \quad (39)$$

En donde: $|\Psi|^2$ es la propiedad de encontrar al sistema A entre V y V+ΔV.

Postulado 6. La ecuación de Schrödinger, corresponde a la función de onda Ψ de un sistema que evoluciona en el espacio y el tiempo, de acuerdo con la relación:

$$\hat{H} \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (40)$$

En donde: \hat{H} es el operador Hamiltoniano del sistema.

Un aspecto importante de la mecánica cuántica se relaciona con el principio de incertidumbre de Heisenberg y como ya se menciono, se refiere a la posibilidad de que dos observables físicas, no puedan ser medidas simultáneamente.

Bibliografía.

Feynman R., Leighton R. y Sands M.; Física, Vol. III, Mecánica Cuántica; Addison-Wesley Iberoamericana; 1987.

Eisberg R., Resnick R.; Física Cuántica; Limusa; 1989.

Alonso M., Finn E.; Física, Vol. III, Fundamentos cuánticos y estadísticos; Addison-Wesley Iberoamericana; 1968.

Acosta V., Cowan C., Graham B.; Essentials of Modern Physics; Harper & Row, 1973.

José Jesús MENA DELGADILLO
menajess@gmail.com