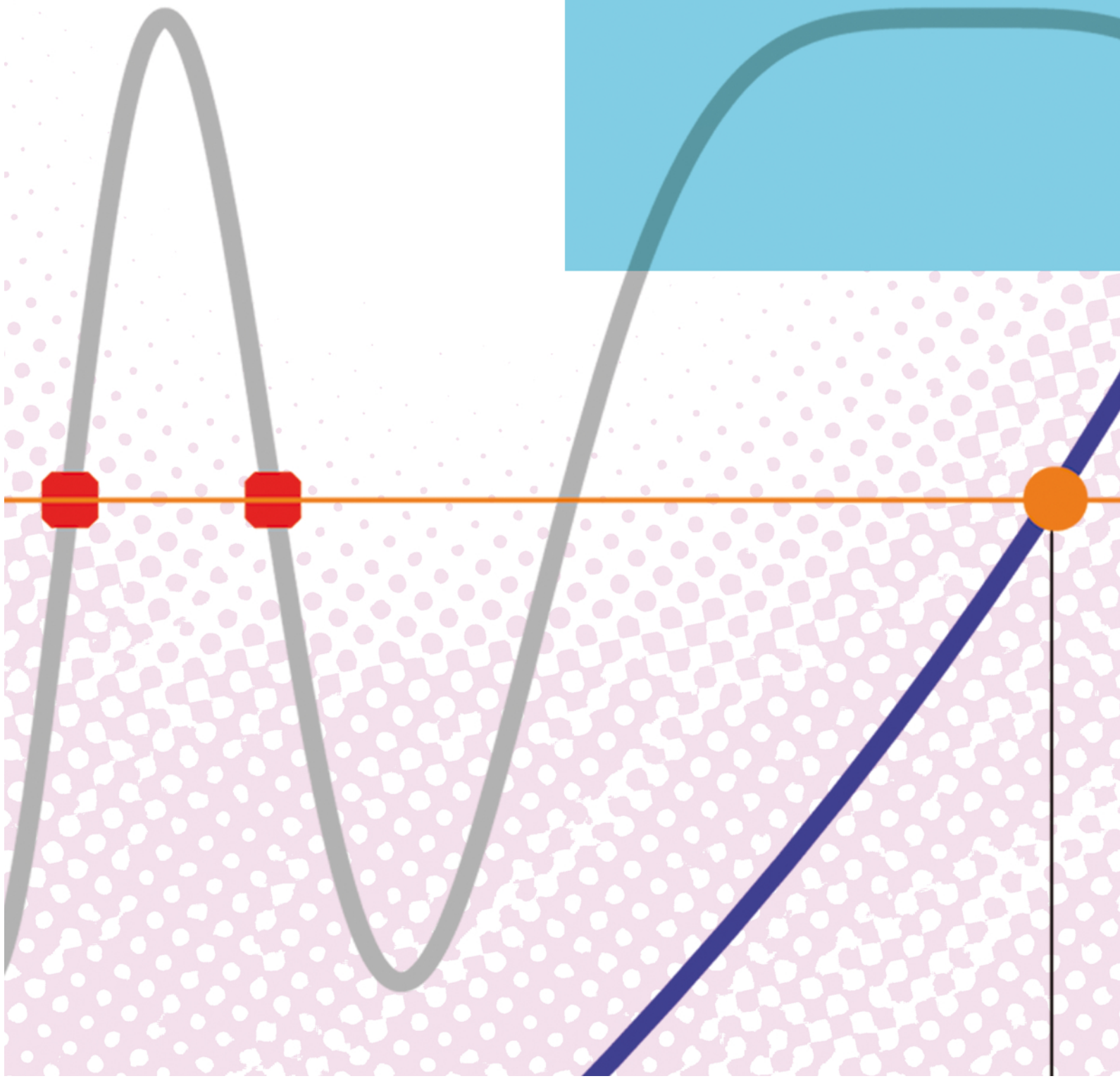


Bernardo Adeva Andany

Universidad de Santiago de Compostela

MECÁNICA CUÁNTICA CONCEPTUAL

**Algunas ideas
clave**



MECÁNICA CUÁNTICA CONCEPTUAL

Algunas ideas clave

Bernardo Adeva Andany *

Departamento de Física de Partículas
University of Santiago de Compostela

bernardo.adeva@usc.es

12 de Mayo de 2016



Esta obra está sujeta a una licencia de Reconocimiento-Compatir igual 4.0 Internacional CC-BY-SA de Creative Commons. Título: Mecánica Cuántica Conceptual, algunas ideas clave. Autor: Bernardo Adeva Andany, Universidade de Santiago de Compostela. Podéis modificar la obra, reproducirla, distribuirla o comunicarla públicamente siempre que citéis el autor y la fuente. La licencia completa se puede consultar en <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>

* agradezco a Dolores Cortina Gil y Marcos Seco Miguélez su ayuda inestimable en la preparación de estas notas

Prólogo

El material que aquí se presenta es una introducción breve y matemáticamente precisa, al cuerpo conceptual y herramientas de cálculo de la Mecánica Cuántica y de la Física Cuántica. Está dirigido a personas que, teniendo una base matemática en el cálculo diferencial e integral, y estando familiarizados con la Mecánica Clásica y las ondas, deseen conocer de cerca los fundamentos de la teoría cuántica. En particular, a alumnos que cursen una asignatura de Física Cuántica, en cualquier programa universitario, ya sea en Ciencias o Ingeniería. Permite al lector adquirir en poco tiempo capacidad operativa para la resolución de problemas físicos en esta disciplina.

La introducción a la Mecánica Cuántica se realiza utilizando el marco semiclásico, tanto por su valor conceptual como por su utilidad técnica, siendo la Mecánica Clásica de Newton y la Relatividad los puntos de referencia. Se hace hincapié, no sólo en las radicales diferencias conceptuales que éstas tienen respecto a la Mecánica Cuántica, sino también en la transición suave que muestran hacia ella. Se busca evitar una doble exposición de la Mecánica Cuántica, en la cuál la fenomenología de la constante de Planck se expondría primero, siguiendo la “antigua teoría de los cuántos”, para luego pasar a otra teoría distinta, y más rigurosa. Pensamos que esta duplicidad es hoy día evitable, y la exposición conceptual puede hacerse sin recurso a distintos niveles fenomenológicos.

Se utiliza la propagación de Feynman como base axiomática de la Mecánica Cuántica, completada con las ideas generalmente admitidas sobre el problema de la medida. Se proporciona una idea simple de la inmersión que sufre dicha Mecánica Cuántica en la Teoría Cuántica de Campos, ilustrada con la emisión de fotones.

Este curso se ha llevado a cabo durante los últimos años en la Universidad de Santiago de Compostela, dentro del programa de grado en Física, y se continúa con la resolución analítica de una serie de casos normalizados de la ecuación de Schrödinger, como parte de la asignatura de Física Cuántica I.

Índice

1. El principio de Mínima Acción	3
2. La constante de Planck	5
2.1. La observación en intervalos de tiempo muy cortos	7
2.2. El movimiento periódico	8
2.3. El tamaño de los átomos y el radio de Bohr	9
2.4. El oscilador armónico	12
2.5. Densidad de niveles de energía	12
2.6. El movimiento ondulatorio	14
3. La propagación de Feynman	17
3.1. Propagación exacta sobre un tiempo finito	21
4. La velocidad instantánea	22
5. La ecuación de Schrödinger	24
6. La función de ondas	25
7. Ondas planas y transformación de Fourier	27
8. Valores medios e indeterminación	29
9. El principio de indeterminación	32
10. Extensión a tres dimensiones	34
11. Autoestados y valores medibles	36
12. Los estados estacionarios	38
13. La fórmula de Bohr	42
14. La Mecánica Cuántica en el marco relativista	44

1. El principio de Mínima Acción

Consideremos un cuerpo que se mueve en una dimensión, sometido a un cierto potencial $U(x, t)$. Por ejemplo, una manzana que cae desde la rama de un árbol al suelo, con movimiento uniformemente acelerado. Siendo $x(t)$ la altura a la que se encuentra sobre el suelo, su energía cinética es $T = \frac{1}{2}m\dot{x}^2$ y su energía potencial es $U(x) = mgx$. La Lagrangiana es $L = T - U$. Si parte del reposo con una altura inicial x_1 , el movimiento puede representarse como una trayectoria en el plano (x, t) , que como sabemos, corresponde a la parábola $x = x_1 - \frac{1}{2}gt^2$.

Esta trayectoria es la única que verifica la segunda ley de Newton

$$-\frac{\partial U}{\partial x} = m\ddot{x} \quad (1)$$

o equivalentemente, la única solución de la ecuación de Lagrange $\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial L}{\partial x} = 0$, con las condiciones iniciales que se han especificado.

La **integral de acción** se define para cualquier trayectoria $x(t)$ como:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(x(t), \dot{x}(t), t) dt = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{1}{2}m\dot{x}^2(t) - mgx(t)\right) dt \quad (2)$$

donde (t_1, t_2) representa el intervalo de tiempo sobre el cual deseamos definir dicha acción (por ejemplo, desde el instante en que se separa la manzana hasta que toca el suelo). Es claro que la acción tiene dimensión de energía \times tiempo, ya que $L = T - U$ es una diferencia de energías, que se multiplica por un intervalo de tiempo. En el Sistema Internacional de unidades se mide en $J \cdot s$ (Julios \times segundo).

Es sabido desde el siglo XVIII que la segunda ley de Newton se deduce de un principio variacional, el principio de Mínima Acción, que consiste en exigir que la integral de acción S tenga un valor extremal ¹ sobre la trayectoria real $x(t)$ ².

En efecto, cualquier otra función diferenciable $x(t)$ distinta de la parábola $x = x_1 - \frac{1}{2}gt^2$ producirá un valor de la integral (2) mayor que:

$$S = \Delta t \left(-mgx_1 + \frac{1}{3}mg^2(\Delta t)^2\right)$$

y sugerimos al alumno que compruebe que efectivamente éste es el valor que toma la integral de acción para la parábola anterior, siendo $\Delta t = t_2 - t_1$.

El método general para deducir la ecuación de Newton a partir del principio de mínima acción, realizando la variación de una trayectoria finita y exigiendo que ésta sea nula, es bien conocido en Mecánica ³, y conduce a las ecuaciones de Euler-Lagrange como paso previo. Veamos que puede llegarse a idéntica conclusión de forma más directa, analizando el movimiento durante un intervalo de tiempo infinitesimal $\Delta t = t_2 - t_1$. Supongamos que la masa m se mueve desde (x_1, t_1) hasta (x_2, t_2) en un intervalo de tiempo Δt muy pequeño, sometida al potencial $U(x, t)$. Consideremos la posición x que ocupa en el tiempo central $t = (t_1 + t_2)/2$, tal como se indica en la Figura 1.

¹puede demostrarse que, para cualquier potencial, la integral de acción tiene un mínimo para trayectorias suficientemente cortas en el tiempo. En el caso más general, tiene un mínimo o un punto silla. La acción nunca puede ser máxima sobre la trayectoria real.

²adoptamos aquí la formulación de Hamilton del principio de Mínima Acción.

³véase, por ejemplo "Mecánica" de Landau-Lifshitz, Vol.1, pag.2.

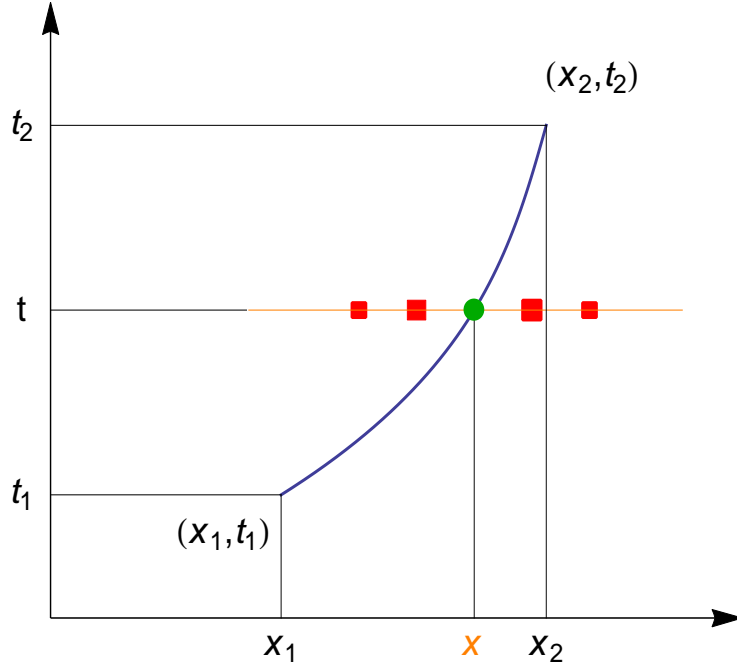


Figura 1: *Movimiento en el plano (x, t) según distintas trayectorias: la de mínima acción (verde) y otras fuera de la Mecánica Clásica (rojo)*

Vamos a demostrar que el único punto intermedio x permitido por el principio de mínima acción, es precisamente el que verifica la segunda ley de Newton $-\frac{\partial U}{\partial x} = m\ddot{x}$. En efecto, podemos calcular, separadamente, las velocidades promedio v_1 y v_2 que tiene el móvil en la primera mitad (t_1, t) y en la segunda mitad (t, t_2) del intervalo, respectivamente.

Su aceleración en el instante t vendrá dada por:

$$\ddot{x} = \frac{v_2 - v_1}{\Delta t/2}$$

y la ley de Newton puede expresarse como:

$$\frac{m}{(\Delta t/2)} \left[\frac{x_2 - x}{(\Delta t/2)} - \frac{x - x_1}{(\Delta t/2)} \right] + \frac{\partial U}{\partial x} = 0 \quad (3)$$

Por otro lado, también podemos calcular la acción S en el intervalo Δt como una suma de dos términos :

$$\begin{aligned} S &= \int_{t_1}^{t_2} L dt = \int_{t_1}^{t_2} (T - U) dt = \bar{L}_1 \frac{\Delta t}{2} + \bar{L}_2 \frac{\Delta t}{2} \\ &= \frac{\Delta t}{2} \left[m \frac{(x - x_1)^2}{2(\Delta t/2)^2} - U\left(\frac{x_1 + x}{2}\right) \right] + \frac{\Delta t}{2} \left[m \frac{(x_2 - x)^2}{2(\Delta t/2)^2} - U\left(\frac{x + x_2}{2}\right) \right] \end{aligned} \quad (4)$$

Donde $U((x_1 + x)/2)$ representa el potencial promedio en la primera mitad (análogamente $U((x + x_2)/2)$). Evidentemente la acción no tomará iguales valores para cada punto intermedio x que la partícula pueda ocupar en el instante $t = (t_1 + t_2)/2$. Pues bien, el principio de mínima acción dice que el único punto x posible es aquél que hace mínimo (extremal) el valor de S y cumple por tanto $\frac{\partial S}{\partial x} = 0$. Es fácil comprobar, derivando la expresión (4) respecto a x , que se obtiene exactamente la fórmula (3), que equivale a (1).

Debe quedar claro que, en el proceso variacional antes considerado, los puntos extremos de la trayectoria (x_1, t_1) y (x_2, t_2) permanecen fijos. En un campo constante en el tiempo ($\frac{\partial U}{\partial t} = \frac{\partial L}{\partial t} = 0$), la energía total $E = T + U$ es una constante del movimiento. Si tenemos varias dimensiones espaciales, un punto dado (x_2, t_2) puede ser alcanzado desde el punto inicial (x_1, t_1) a través de más de una trayectoria (todas con S extremal).

Tiene interés calcular la integral de acción sobre los puntos de la trayectoria clásica $(x(t), t)$ que, partiendo del punto (x_1, t_1) , tiene una energía E determinada ⁴:

$$S(t_2 - t_1) = \int_{t_1}^{t_2} L(t)dt = \int \left(\frac{\partial S}{\partial t} dt + \frac{\partial S}{\partial x} dx \right) = -E \cdot (t_2 - t_1) + \int_{x_1}^{x_2} p(x)dx \quad (5)$$

La cantidad:

$$S_0 = \int_{x_1}^{x_2} p(x)dx = S + E \cdot (t_2 - t_1) \quad (6)$$

se conoce en la literatura como **integral de acción reducida**, o característica. Tiene la propiedad de ser invariante bajo cualquier redefinición del cero de la energía potencial $U(x) \rightarrow U(x) + C$, debido a la presencia del término de signo opuesto en $L = T - U$, y de ser por tanto medible en el laboratorio. Juega un papel importante en el movimiento de los cuerpos y de las ondas, y tiene en la Naturaleza un carácter *intrínsecamente oscilatorio* que estudiaremos a continuación.

2. La constante de Planck

Hemos dicho que la acción reducida S_0 es una cantidad medible, y debemos considerar la posibilidad de realizar medidas de ella en el laboratorio, en unidades $J \cdot s$. Para ello sería necesario determinar la energía cinética y la posición del cuerpo en sucesivos instantes de tiempo, buscando causar la mínima perturbación de la trayectoria. Las leyes de la Mecánica convencional no señalan ningún impedimento para llevar a cabo una medición tan precisa como queramos, estando únicamente limitados por la propia precisión de nuestros aparatos de medida.

La realidad física nos depara no obstante una sorpresa. Se conoce desde hace más de un siglo que la acción reducida es una cantidad *no nula y discretizada*, que sólo puede tomar valores que sean múltiplos enteros positivos de una constante universal, la constante de Planck, que en el día de hoy es conocida con 9 dígitos de precisión, y cuyo valor numérico se aproxima a $h = 6.626 \times 10^{-34} Js$. Este valor es exactamente el mismo con independencia del tipo de energía que esté representada por el potencial $U(x, t)$, que puede ser electromagnética, nuclear, electrodébil o gravitatoria, y afecta por igual al movimiento de los cuerpos de masa m y al de las ondas.

La verdadera continuidad del espacio y del tiempo a muy pequeña escala es un tema abierto en Física, para el que no tenemos una respuesta establecida. Se desconoce si son continuos o no. Sin embargo existe una discontinuidad bien establecida en el proceso observacional a pequeña escala, que afecta inequívocamente a la acción reducida. Sus repercusiones en todas las ramas de la Física, y del conocimiento en general, son enormes y vamos a hacer una primera discusión de las más importantes en los apartados siguientes.

⁴ $S(x, t)$ construye una función en el plano (x, t) que se llama función principal de Hamilton, y que verifica $\frac{\partial S}{\partial t} = -E$ y $\frac{\partial S}{\partial x} = p$, siendo p el momento en el punto (x, t) .

Tomar la discontinuidad de la acción reducida como un postulado adicional de la Física, sin ninguna otra idea adicional, *no sería suficiente* para crear una nueva Mecánica consistente y predictiva. Simplemente reflejaría la realidad. Como veremos enseguida, tal hipótesis es incompatible con la existencia de trayectorias diferenciables, con lo cual pierden su fundamento las propias leyes de la Mecánica convencional. El problema de crear una nueva Mecánica consistente lo resolveremos en la Sección 3. Un *enunciado fenomenológico* del hecho anterior, formulado en los limitados términos de la Mecánica Clásica, sería el siguiente:

Principio de cuantificación de la acción: *Para cualquier observación física de un cuerpo o sistema de ellos, sometidos a un campo de fuerzas, o de una onda, ambos durante un tiempo Δt , la acción reducida S_0 , extendida al intervalo Δt , sólo puede tomar valores que sean esencialmente múltiplos enteros de la constante de Planck. La cuantificación tiene lugar en la forma $S_0 = (n + \alpha)h$, donde $n = 1, 2, \dots, \infty$, y $\alpha > -1$ es una constante específica para cada problema.*

Este principio se aplica universalmente a sistemas con un número arbitrario N de grados de libertad, tanto relativistas como no relativistas. Es válido tanto para sistemas integrables, donde existen $N - 1$ constantes del movimiento aparte de la energía total, como para sistemas totalmente caóticos, donde sólo la energía es conservada. Una revisión moderna del mismo nos revela que es una excelente aproximación, si bien no totalmente exacta. Como veremos con la teoría de Feynman, la no exactitud completa es consecuencia de que al movimiento no contribuyen únicamente las trayectorias clásicas, sino todas las trayectorias posibles. Es desde luego un reto para cualquier nueva Mecánica poder predecir en cada caso el valor exacto de α , allá donde se cumpla la ecuación anterior. La constante α se relaciona con propiedades de focalización de las trayectorias clásicas, y admite de hecho una interpretación inequívoca en la Mecánica Clásica. No vamos a profundizar aquí en ello ⁵, sino a centrarnos en el desarrollo de la nueva Mecánica.

Algunos comentarios adicionales sobre este principio de cuantificación:

- dado que las trayectorias diferenciables no representan verdaderamente el movimiento real, resulta difícil verificar su validez de manera *directa*. Si intentamos realizar una medida de S_0 , nos encontramos con que la precisión requerida para probar la validez del principio (inferior a $\pm h$) no puede ser alcanzada en la práctica, como veremos en la Sección 9, y el sistema se ve necesariamente perturbado.
- una forma de verificar dicho principio, en el movimiento periódico, es medir las *energías*, acordes con la secuencia $n = 1, 2, \dots, \infty$, renunciando a intentar observar la trayectoria simultáneamente. Resulta que, en este caso, las energías sí pueden ser medidas con precisión esencialmente ilimitada. En cualquier tipo de movimiento, es posible medir la energía y el tiempo de avance de un móvil, procesando las señales emitidas por él con la ayuda de relojes de una precisión determinada.
- las trayectorias donde se cumple la regla de cuantificación de S_0 , en el movimiento periódico, se suponen diferenciables, y deben ser entendidas como las más próximas al movimiento real que pueden ser formuladas en los términos de la Mecánica Clásica.

⁵la constante α tiene especial sentido para los sistemas integrables, y es aditiva para cada uno de los circuitos cerrados irreducibles i que se producen alrededor de los *toros invariantes* en el espacio fásico que caracterizan el movimiento en este tipo de sistemas. Toma el valor $\alpha_i = \beta_i/4$ en cada uno de ellos, cuando hacemos $n = 0, 1, \dots, \infty$, siendo β_i un número entero llamado índice de Maslov.

Dado el pequeño valor en $J \cdot s$ que toma en la Naturaleza ⁶ la constante h , es claro que el dominio de la Física queda dividido en dos sectores, con una transición continua entre ambos: cuando su valor no nulo resulta imperceptible, y cuando sus efectos se hacen notar con claridad. El primero se produce cuando, una vez evaluada la acción reducida S_0 en el problema a tratar, resulta ser $S_0 \gg h$. Lo llamaremos **límite clásico**, y en él esperamos plena validez de las leyes convencionales de la Mecánica. El segundo ocurre al contrario, cuando $S_0 \simeq h$, y se conoce con el nombre de **límite cuántico**, que vamos a tratar en lo que sigue.

2.1. La observación en intervalos de tiempo muy cortos

Supongamos que queremos observar el movimiento de un cuerpo de masa m durante un intervalo de tiempo muy corto Δt . La acción reducida vale $S_0 = S + E\Delta t = 2T\Delta t$, siendo T su energía cinética $\frac{1}{2}mv^2$. Es evidente que el límite cuántico se alcanza siempre que el intervalo de tiempo Δt sea del orden del cociente h/T , o menor:

$$\Delta t \lesssim \frac{h}{T} \quad (7)$$

Si admitimos que S_0 debe permanecer finita ($\gtrsim h$), entonces ninguna observación realizada durante un tiempo inferior o del orden del indicado será posible sin un aumento de la energía cinética del cuerpo, hasta alcanzar un valor $T \gtrsim h/\Delta t$. Se le llama *fluctuación cuántica*. Téngase en cuenta que si el intervalo de tiempo es realmente pequeño, la energía potencial puede considerarse constante sobre la trayectoria y podemos identificar la energía cinética con la energía total E , de manera que el tiempo crítico para que las fluctuaciones sean importantes es simplemente $\Delta t \sim h/E$.

Recomendamos al alumno comprobar que el tiempo de observación para una pelota de tenis de 100g que se mueve a 50 Km/h sería $\Delta t \sim 1 \times 10^{-35}s$, inferior por muchos órdenes de magnitud al tiempo de exposición de cualquier cámara fotográfica ($\Delta t \geq 1ms$), e incluso de cualquier dispositivo electrónico basado en células fotosensibles ($\Delta t \geq 1ns$). No obstante, si fuésemos capaces de “fotografiar” el movimiento durante un tiempo de $10^{-35}s$, indudablemente observaríamos fluctuaciones, y podríamos ver que su movimiento tiene lugar en “zig-zag”, en esa escala.

Es decir, la localización en el tiempo Δt de un cuerpo en el laboratorio implica un aumento de energía cinética de $h/\Delta t$. Esta energía puede contemplarse como una inversión necesaria para lograr dicha localización, o como una manifestación de ella. Es evidente en cualquier caso, que no resulta posible mantener la existencia de una velocidad instantánea, en el proceso observacional del paso al límite

$$v = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta x}{\Delta t}$$

y que dicho límite no existe en realidad, sino que es infinito. Por tanto, los cuerpos no siguen trayectorias diferenciables. A nosotros nos parece que sí lo hacen, debido a que nuestros sentidos o aparatos de medida no son capaces de constatar intervalos de tiempo suficientemente cortos.

⁶tanto el Julio como el segundo son unidades ligadas a nuestra escala de observación evolutiva.

Sin embargo, el movimiento periódico de los electrones dentro de los átomos y de las moléculas, así como el de protones y neutrones dentro del núcleo, implican una gran localización en el tiempo ligada con su periodo de revolución, y están enteramente gobernados por las fluctuaciones cuánticas.

Consideración relativista

Para rebatir la existencia de trayectorias diferenciables, nos hemos limitado a tratar de forma no relativista la energía cinética. Pero resulta evidente que, para intervalos de tiempo de observación suficientemente cortos, el aumento de la energía cinética necesariamente lleva a cualquier cuerpo al dominio relativista, aproximándose su velocidad a la velocidad de la luz c . Un ejercicio instructivo para el alumno interesado en este caso es tomar la acción relativista S para el movimiento libre ⁷ y averiguar cuál sería la localización temporal Δt necesaria para que la acción reducida $S_0 = S + mc^2\gamma\Delta t$ sea del orden de h (γ es el factor relativista). El resultado es $\Delta t \sim h/mc^2$, siendo m su masa en reposo. Si lo aplicásemos a átomos, moléculas o núcleos, sería un tiempo extremadamente pequeño, en el que dichos sistemas perderían su integridad, y que no tiene relevancia para su estudio. Si lo aplicamos a un electrón, el tiempo de localización anterior es también demasiado pequeño como para ser relevante en el estudio de la materia ordinaria, teniendo sin embargo la interesante consecuencia de producir pares electrón-positrón, allá donde se realice dicha localización.

2.2. El movimiento periódico

Dado que una buena parte de los movimientos que se observan en la naturaleza son de tipo periódico (especialmente en el mundo microscópico) vamos a ver cuál será la condición para que un movimiento de este tipo sea *cuántico*.

Supongamos por ejemplo una órbita cerrada ($E < 0$) en tres dimensiones, con un potencial central del tipo $U(r) = \beta r^d$. De acuerdo con el teorema del virial, los valores medios de las energías cinética (\bar{T}) y potencial (\bar{U}) a lo largo de un periodo Δt ⁸ están relacionados exactamente por la expresión $\bar{T} = \frac{d}{2}\bar{U}$. Este teorema nos permite un cálculo exacto de la acción sobre un ciclo:

$$S = \int_0^{\Delta t} L dt = \bar{L} \Delta t = (\bar{T} - \bar{U}) \Delta t = \left(\frac{d-2}{d+2} \right) E \Delta t \quad (8)$$

la acción reducida será por tanto: $S_0 = S + E\Delta t = [2d/(d+2)]E\Delta t$ y el límite cuántico se producirá cuando $S_0 \simeq h$. En este tipo de movimiento periódico, en una o varias dimensiones, existe una relación 1-1 entre el periodo Δt (o el cuasiperiodo) y la energía E de las órbitas, siendo la única excepción el oscilador armónico, cuyo periodo resulta ser independiente de la energía.

⁷la acción relativista para el movimiento libre es $S = - \int_0^{\Delta t} mc^2 \sqrt{1 - v^2/c^2} dt$.

⁸para potenciales centrales del tipo indicado, únicamente los casos $d = -1$ y $d = 2$ originan trayectorias siempre periódicas. En los demás casos tendría sentido considerar como periodo el intervalo de tiempo Δt en que r realiza un ciclo entre (r_{min}, r_{max}) , llamado cuasiperiodo.

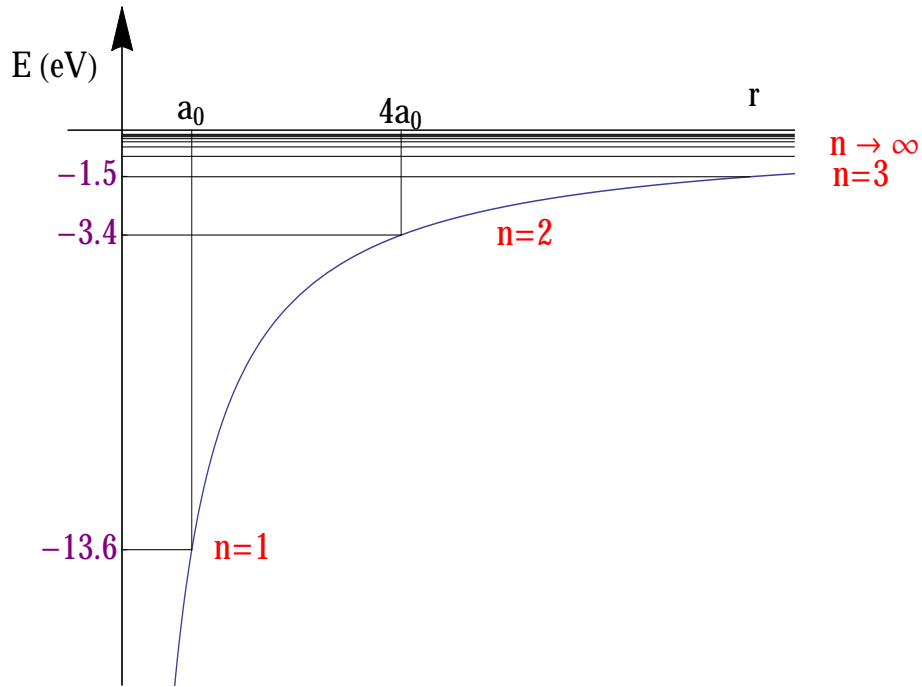


Figura 2: Potencial coulombiano del átomo de Hidrógeno que muestra los estados discretos de la energía, que corresponden a múltiplos enteros de h en la acción clásica reducida S_0 . El nivel más bajo corresponde al radio de Bohr a_0 . En el límite $n \rightarrow \infty$ la energía parece tomar valores continuos.

Por tanto una vez conocida la energía E y el periodo Δt de la órbita, sabemos con precisión si el movimiento se encuentra en el límite cuántico, simplemente evaluando su producto. Es claro que en dicho límite no será posible hablar de trayectorias, y que el movimiento tendrá lugar de forma errática, actuando las fluctuaciones cuánticas de forma intensa en cada ciclo.

2.3. El tamaño de los átomos y el radio de Bohr

Para poder comprender el tamaño finito que tienen los átomos, podemos empezar por analizar el átomo de Hidrógeno. Consideremos el problema de un electrón que se mueve sometido a la atracción eléctrica de un protón (Z protones en general). El potencial de interacción viene dado por la ley de Coulomb $U(r) = -\beta/r$, con $\beta = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}$, siendo e el valor absoluto de la carga del electrón y ϵ_0 la permeabilidad eléctrica del vacío ⁹.

De acuerdo con las leyes de Newton, este movimiento tiene lugar en un plano, y para energías $E < 0$ la solución toma la forma de órbitas elípticas en las que una de las partículas se mueve alrededor del centro de masas, situado en uno de los focos. Además, la tercera ley de Kepler:

$$\Delta t = \frac{\pi}{\sqrt{2}} \frac{\beta m^{1/2}}{|E|^{3/2}} = \frac{2\pi}{\omega} \quad (9)$$

⁹este potencial describe igualmente la atracción gravitatoria entre dos masas m_1 y m_2 , con $\beta = G_N m_1 m_2$, y el análisis físico se aplica íntegramente a este caso también.

establece una relación precisa entre la energía de las órbitas y su periodo Δt , relacionado con la frecuencia angular a través de la expresión $\Delta t = 2\pi/\omega$. Nótese que m representa aquí la masa reducida del sistema de dos cuerpos (el electrón y el núcleo) $m = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$, siendo muy próxima a la masa del electrón m_e .

Según hemos visto con el teorema del virial ($d = -1$ en este caso), la acción vale $S = -3E\Delta t$ y la acción reducida $S_0 = -2E\Delta t$. Conocida la ley de Kepler, podemos comprender que el límite cuántico se producirá cuando la acción S_0 descienda hasta el nivel de h . Y esto ocurre cuando las órbitas adquieren radios muy pequeños, con frecuencias elevadas y energías altas en valor absoluto y negativas.

El principio de cuantificación de la acción se aplica nítidamente en este caso: $S_0 = nh$ con $n = 1, 2, \dots \infty$, siendo nula, de manera efectiva, la constante α ¹⁰. Ello nos permite establecer un filtro sobre las energías permitidas del electrón, que quedan cuantificadas en la forma:

$$-E_n = \frac{1}{2} \frac{m\beta^2}{\hbar^2} \frac{1}{n^2} = \frac{1}{2} \frac{mZ^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (10)$$

Su valor para $n = 1$ y $Z = 1$ ($\hbar \equiv h/2\pi$) corresponde a la energía mínima de un electrón en el campo eléctrico creado por el protón, y la progresión de estas energías hacia cero para $n \rightarrow \infty$ puede observarse en la Figura 2. La energía de ligadura del electrón en el átomo de Hidrógeno se conoce con una precisión inmensa (mejor que una parte en 10^8), a partir de las longitudes de onda de sus líneas de emisión (serie de Balmer), y se llama en la literatura energía de Rydberg E_y . El valor que obtenemos de (10) cuando utilizamos valores de precisión para las constantes fundamentales involucradas es

$$-E_1 = \frac{1}{2} \frac{m\beta^2}{\hbar^2} = 2.180 \times 10^{-18} J \quad (11)$$

y está en excelente acuerdo con el valor tabulado de E_y , del cual difiere en una cantidad relativa del orden de 10^{-3} , que se atribuye fundamentalmente a haber ignorado el momento magnético del electrón, a la imprecisión del cálculo no relativista, a la masa finita del protón, al momento magnético del protón, y a la polarización del vacío. El valor $-E_1$ recibe el nombre de energía del **estado fundamental** del átomo de Hidrógeno. Siendo pequeña en Julios, equivale exactamente a la energía adquirida por un electrón que cae a través de una diferencia de potencial de 13.6 Voltios (13.6 eV).

Vemos que este valor de la energía es proporcional a la constante de acoplo cuadrado β^2 (la “intensidad” de la interacción), a la masa m de la partícula que fluctúa, el electrón, e inversamente proporcional al cuadrado de la constante de Planck. Si la constante h fuese nula, las energías de las órbitas podrían ser infinitamente negativas ($E \rightarrow -\infty$), y de hecho adquirirían siempre tales valores debido al fenómeno de la radiación electromagnética, con independencia de las condiciones iniciales¹¹.

¹⁰para ser exactos, la condición de cuantificación en este caso es: $S_0 = (n + \beta/4)h$, siendo el índice de Maslov $\beta = 4$. En 2D tenemos $\beta = 2$ por las parejas de puntos sobre la elipse que están en línea recta con el foco secundario (puntos conjugados). Pero la elipse debe ser sumergida en 3D, y ello hace que aparezcan dos nuevos puntos conjugados, en línea recta con el foco principal (uno de ellos repetido). La regla general, cuando tenemos varios de grados de libertad, es que al menos uno de ellos cumple $\beta \neq 0$ y n toma valores que empiezan de hecho en cero: $n = 0, 1, \dots \infty$.

¹¹según las ecuaciones de Maxwell del Electromagnetismo, toda carga eléctrica e sometida a una aceleración a radia energía electromagnética al espacio con una potencia P en vatios dada por la fórmula de Larmor $P = \frac{e^2 a^2}{6\pi\epsilon_0 c^3}$. La pérdida de energía del electrón causaría un rápida caída sobre el protón, en un tiempo de $\sim 0.1 ns$. Se recomienda resolver la ecuación diferencial asociada, suponiendo órbitas circulares.

En el estado fundamental el movimiento no se asemeja en absoluto a ningún tipo de trayectoria elíptica, ni se encuentra en un plano. Pensemos que para completar una trayectoria de este tipo, el electrón debería retornar al mismo punto al cabo de un ciclo, lo cual supone una localización en el tiempo con precisión equivalente al periodo ($\sim 10^{-16}s$). Siendo dicho tiempo próximo al cociente h/T , con T la energía cinética, las fluctuaciones cuánticas resultan ser importantes. Precisamente son el origen de dicha energía cinética, y el movimiento es errático alrededor del protón. La distancia promedio a la que se encuentra el electrón del protón está sin embargo bien definida y corresponde a lo que sería el radio mayor de la elipse, unívocamente determinado por su energía $a = \beta/(-2E)$.

Los datos indican que el electrón no gira en el estado fundamental. La elipse clásica ha degenerado en una línea recta, y la distancia radial se orienta al azar en 3D, debido a las fluctuaciones cuánticas. El átomo de Hidrógeno adquiere forma esférica, y su radio está definido en promedio con gran precisión. Se conoce en la literatura como **radio de Bohr** a_0 y según lo anterior podemos predecir su valor:

$$a_0 = \frac{\beta}{-2E_1} = \left(\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}\right) \frac{1}{-2E_1} = \frac{\hbar^2 4\pi\epsilon_0}{Z me^2}$$

que con los valores conocidos de m_e , ϵ_0 , y e arroja para $Z = 1$ el resultado numérico:

$$a_0 = 0.529 \times 10^{-10}m = 0.529\text{\AA} = 0.0529 \text{ nm} = 52.9 \text{ pm}$$

donde el Armstrong (\AA) es una unidad “ad hoc” que a veces se utiliza en física atómica: $1\text{\AA} = 10^{-10}m$. Aunque este valor es demasiado pequeño como para ser observado con un microscopio óptico, debido a la difracción de la luz, puede ser observado con técnicas experimentales más poderosas.

La existencia de valores discretos en la energía del átomo de Hidrógeno (10), en correspondencia con los cuadrados de los números naturales $n = 1, 2, \dots \infty$, está bien comprobada experimentalmente a través de las longitudes de onda de la luz emitida por sus electrones, cuando el átomo se somete colisiones térmicas de varios miles de grados de temperatura.

Obsérvese que en el límite $n \rightarrow \infty$ las energías permitidas recuperan valores casi continuos, ya que las diferencias $|E_{n+1} - E_n|$ se hacen muy pequeñas frente a $|E_n|$, como puede verse en la Figura 2. Esto es lo esperable en el límite clásico.

El estado de mínima energía que se origina en el átomo puede entenderse como un equilibrio entre dos fuerzas opuestas: la energía cinética debida a las fluctuaciones cuánticas, que aumenta enormemente a pequeñas distancias, y que tiende a separar el electrón del núcleo, y la pérdida de energía por radiación debida a la ley de Larmor, que tiende a aproximarlo. Esta última se produce por la aceleración debida al campo eléctrico de Coulomb. El equilibrio se produce a una distancia promedio que es el radio de Bohr.

Podría pensarse en una analogía con el movimiento clásico de Kepler, donde también se produce un equilibrio de este tipo, entre fuerza centrífuga y fuerza de atracción. Sin embargo, hay que destacar que la energía del estado fundamental que se origina en los átomos *no tiene su origen* en la barrera centrífuga, ya que el momento angular en dicho estado es estrictamente nulo.

Vemos por tanto que el tamaño global del átomo de Hidrógeno (e igualmente de todos los demás átomos) viene determinado por la constante de Planck: **si ésta fuese nula, los átomos serían infinitamente pequeños**. La propia estructura atómica de la materia tiene su origen en las fluctuaciones cuánticas y en la constante de Planck.

2.4. El oscilador armónico

Cualquier pozo de potencial unidimensional $U(x)$ genera, para un cuerpo de masa m , un movimiento periódico entre sus dos puntos de retroceso. Cuando el pozo tiene forma parabólica $U(x) = (1/2)kx^2$ hablamos de oscilador armónico, y se verifica la sorprendente propiedad de que el periodo (o la frecuencia) de las oscilaciones $\Delta t = 2\pi/\omega$ se hace independiente de la energía E . Dicha energía está determinada únicamente por la amplitud A , $E = (1/2)kA^2$. Todas las ramas de la Física necesitan referirse profusamente a osciladores armónicos.

Podríamos pensar que la energía (amplitud) de un oscilador fuese tan pequeña como quisiéramos, pero nada más lejos de la realidad. El principio de cuantificación de la acción clásica lo impide radicalmente. Es un ejercicio interesante comprobar que con la solución general para la trayectoria $x(t) = A\cos(\omega t - \phi)$ se obtiene un valor nulo para la integral de acción extendida al periodo Δt ($S = 0$). No obstante, la acción reducida toma el valor $S_0 = S + E\Delta t = 2\pi E/\omega$, y el principio de cuantificación exige en este caso que $S_0 = (n + \beta/4)h$, con $\beta = 2$ ¹² y $n = 0, 1, \dots \infty$. Lo cual nos proporciona los niveles de energía del oscilador armónico:

$$E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, \dots \infty \quad (12)$$

que es uno de los resultados más contrastados y de mayor alcance en el campo de la Física. Nos dice que ningún oscilador puede adquirir ni ceder energía por una cantidad inferior a $\hbar\omega$. Esta cantidad se denomina en la literatura **quantum** de energía y, como vemos, crece linealmente con la frecuencia. Fué conjeturado originalmente por el físico alemán Max Planck in 1900, en referencia a los osciladores atómicos que forman parte de las paredes de la cavidad en equilibrio con su radiación. Este resultado nos dice también que ningún oscilador puede vibrar con energía inferior a 1/2 del quantum. Esta es la llamada **energía del punto cero** que revolucionó la Termodinámica de bajas temperaturas hace un siglo.

2.5. Densidad de niveles de energía

Hemos visto, en dos sistemas Hamiltonianos clave, cómo la cuantificación de la acción genera niveles discretos de energía. Veamos ahora una característica general, que resulta ser independiente de la naturaleza del sistema. Consideremos un Hamiltoniano $H(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ con N grados de libertad, coordenadas generalizadas \mathbf{q} y momentos generalizados \mathbf{p} en el espacio fásico $2N$ -dimensional. La cuantificación de la acción sobre las trayectorias periódicas del sistema se expresa por medio de la integral de línea cerrada:

$$S_0 = \oint \mathbf{p}d\mathbf{q} = \sum_{i=1}^N \oint p_i dq_i = \sum_{i=1}^N S_0^i = \sum_{i=1}^N (n_i + \alpha_i)h$$

y si tomamos el límite en que los números cuánticos son altos $n_i \gg 1$ en cada coordenada, es claro por el teorema de Green que $\oint p_i dq_i = \iint dq_i dp_i = n_i h$ ¹³, con lo cual el área encerrada por la trayectoria en el espacio (q_i, p_i) es un múltiplo n_i de un cuadrado elemental $\delta q_i \delta p_i$ de área h , como se ilustra en la Figura 3.

¹²en cualquier pozo de potencial en 1D, el índice de Maslov β es igual al número de puntos de retroceso, es decir, dos.

¹³el sentido de la integral de línea se toma a *derechas*, siendo $p_i dq_i$ no negativo siempre.

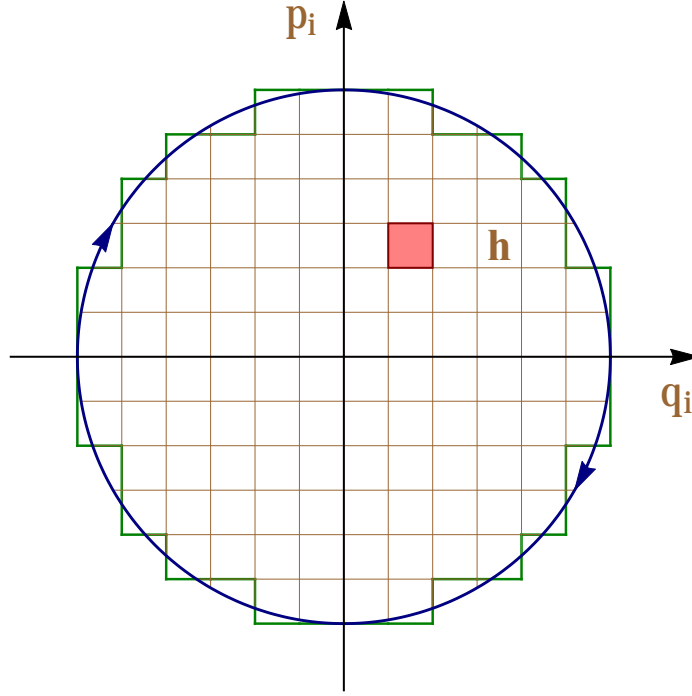


Figura 3: Trayectoria periódica de un grado de libertad i , con coordenada q_i y momento generalizado p_i . El volumen del espacio fásico se encuentra cuantizado en múltiplos de h .

Por tanto, todo volumen en el espacio (\mathbf{q}, \mathbf{p}) será un múltiplo entero del $2N$ -cubo elemental de tamaño $(\delta q_1 \delta p_1)(\delta q_2 \delta p_2) \cdots (\delta q_N \delta p_N) = h^N$. Podemos decir entonces que el espacio fásico se encuentra él mismo discretizado en **celdas elementales de volumen h^N** . En la Mecánica Clásica, el volumen total del espacio fásico con energías inferiores a un cierto valor E , se define como la integral múltiple:

$$\Omega(E) = \int d^N q \int d^N p \theta(E - H(\mathbf{q}, \mathbf{p}))$$

donde H es el Hamiltoniano y $\theta(x)$ es la función escalón unidad ¹⁴. Teniendo en cuenta la discretización anterior, definimos el *número promedio de niveles de energía* como $\langle \mathcal{N}(E) \rangle \equiv \Omega(E)/h^N$ y la *densidad promedio* de niveles por unidad de intervalo de energía $\langle d\mathcal{N}/dE \rangle \equiv (d\Omega(E)/dE)/h^N$. Los cuales ilustran el hecho de que, para todo sistema físico la cuantificación de la acción crea un número en general *finito* ¹⁵ de niveles de energía, y que dicho número puede calcularse simplemente conociendo la constante de Planck y el volumen del espacio fásico. El cálculo será muy preciso si lo aplicamos a intervalos de energía $(E, E + \Delta E)$ con ΔE pequeño en comparación con E , pero grande con respecto al espaciado promedio de niveles $\langle d\mathcal{N}/dE \rangle^{-1}$.

¹⁴como ejercicio, proponemos demostrar que para un oscilador 1D, tenemos $\Omega(E) = 2\pi E/\omega$, y para un conjunto de N osciladores independientes con Hamiltoniano $H = \sum_i^N p_i^2/2m + (1/2)m\omega^2 q_i^2$, se cumple $\Omega(E) = (2\pi E/\omega)^N (1/N\Gamma(N))$, siendo Γ la función de Euler.

¹⁵para alguna elección concreta de la energía E , el número de estados puede hacerse infinito, siempre dentro de un conjunto discreto.

Por tanto vemos que todo sistema físico, que hemos supuesto confinado en movimiento periódico, mostrará la presencia de niveles discretos de energía, en abierta discrepancia con la Mecánica Clásica, según la cuál la energía de dicho sistema toma en general valores continuos. Es revelador el hecho de que lo anterior se mantenga válido en el límite que anteriormente hemos definido como *límite clásico*. De hecho, nos muestra que la Mecánica Clásica *nunca se recupera* en realidad, ni siquiera en dicho límite.

Mencionaremos finalmente una curiosidad para el alumno especialmente interesado, cuyos detalles nos llevarían más allá de los límites de este curso. Para sistemas clásicamente caóticos, donde no existen constantes del movimiento más allá de la energía total E , el espaciado de niveles resulta ser notablemente *regular*. De hecho, el número de niveles $N(E_q)$ por debajo de la energía E_q , como función de $E_q \in (E, E + \Delta E)$, ajusta bien a una línea recta, siendo la desviación cuadrática media del ajuste mucho menor en el caso de los sistemas caóticos que en el caso de los sistemas integrables. En este último, donde existen $N - 1$ constantes de movimiento, el posicionado de los niveles ocurre generalmente al azar, en relación con el espaciado promedio. Ambos fenómenos han sido entendidos ¹⁶, y el primero de ellos se conoce en la literatura como *repulsión cuántica de niveles*. Ha sido observado extensamente en sistemas clásicamente caóticos con muchos grados de libertad N , como resonancias de núcleo compuesto, átomos pesados y moléculas.

2.6. El movimiento ondulatorio

De forma general podemos afirmar que el dominio de la Física se extiende al movimiento de dos tipos de objetos: los cuerpos de masa m y las ondas. El carácter discontinuo de la acción reducida afecta a ambos por igual.

Las ondas son objetos que describen la propagación de magnitudes físicas de manera continua a través del espacio y del tiempo. Por sencillez nos restringimos a una dimensión, aunque su dominio natural son las 3 dimensiones espaciales. Su definición matemática más general es una amplitud de propagación en la forma $Ae^{i(kx - \omega t)}$, donde A es la magnitud física que se propaga, medida en las unidades que corresponda del Sistema Internacional, ω es la periodicidad temporal o frecuencia angular (unidades s^{-1}) y k es la periodicidad espacial o número de ondas por unidad de longitud (m^{-1}). Ambas periodicidades están siempre relacionadas por una función $\omega = \omega(k)$, llamada *relación de dispersión*.

Existe en Física una enorme diversidad de ondas, tanto en soporte material como en el vacío, realizándose casi todas las formas funcionales concebibles para $\omega(k)$. Esta función debe ser determinada experimentalmente, en general. La utilización de los números complejos para describir las ondas es conveniente, pero no obligada (las ondas podrían definirse igualmente con la función coseno).

Cuando la función $\omega(k)$ es la función lineal $\omega = vk$ hablamos de una onda no dispersiva, con velocidad de propagación v . En general tenemos la velocidad de grupo $v = d\omega/dk$. Las ondas transportan energía (y con ella información) a través del espacio. En cada punto tienen una densidad de energía \mathcal{E} , por unidad de volumen. También tienen una densidad Lagrangiana \mathcal{L} (por unidad de volumen) ¹⁷ que gobierna, a través del principio de Mínima Acción, las ecuaciones diferenciales en derivadas parciales que cumple la magnitud A .

¹⁶véase M. V. Berry, "Semiclassical Mechanics of regular and irregular motion", Les Houches Lecture, 1983, y M. Gutzwiller, "Chaos in Classical and Quantum Mechanics", Springer 1990.

¹⁷ por ejemplo, la densidad Lagrangiana para el campo electromagnético, en ausencia de corrientes y cargas, es $\mathcal{L} = \frac{1}{2}(\epsilon_0 \mathbf{E}^2 - \frac{1}{\mu_0} \mathbf{B}^2)$.

Cuando las ondas tienen soporte material en átomos o moléculas, éstos actúan como agentes transmisores precisamente porque vibran armónicamente alrededor de sus posiciones de equilibrio.

Por ello la onda hereda del oscilador armónico muchas de sus propiedades. Consideremos una onda de frecuencia ω , encerrada en una cavidad rectangular de volumen V , cuyos lados son múltiplos de su semilongitud de onda. La integral de acción reducida extendida a un ciclo $t_2 - t_1 = 2\pi/\omega$ vale:

$$S_0 = \int_{t_1}^{t_2} \left(\int_V \mathcal{L}(\mathbf{x}, \dot{\mathbf{x}}, t) d^3\mathbf{x} \right) dt + E \cdot (t_2 - t_1)$$

siendo E la integral de la densidad de energía \mathcal{E} sobre el volumen V . Tanto si se trata de una distribución continua de osciladores, como si se trata de un campo electromagnético, el primer término resulta nulo ¹⁸. El principio de cuantificación de la acción, utilizando los mismos resultados que para el oscilador armónico, nos lleva a la conclusión de que la energía en la cavidad está discretizada de la misma forma que éste:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, \dots \infty \quad (13)$$

Como la onda se propaga con una cierta velocidad si abrimos un agujero en cualquiera de las paredes de la cavidad, la energía transferida hacia un detector no puede ser inferior a la que indica el **quantum** $\hbar\omega$, que es directamente proporcional a la frecuencia. No importa si la onda tiene un soporte material o si se propaga en el vacío, ni tampoco importa cuál sea la naturaleza física de la magnitud A que se propaga, sólo es esencial que ésta tiene una frecuencia determinada. Por tanto la energía *transferible* de cualquier onda es un *múltiplo entero positivo del quantum* $E = n\hbar\omega$ con $n = 1, 2, \dots \infty$.

Sin embargo, la onda encerrada en la cavidad de volumen V tiene una **energía no transferible** $\frac{1}{2}\hbar\omega$ almacenada en su interior, que no se transporta con la onda. Si la onda tiene soporte en el vacío, esta energía se hace infinita al sumar sobre todas las frecuencias posibles en esa cavidad, lo cuál no se aprecia en general como contradictorio ¹⁹. Pero si la onda tiene un soporte material en átomos o moléculas, existe siempre un límite superior a dichas frecuencias, derivado de la longitud de onda mínima que corresponde al tamaño de sus átomos, y nunca es la energía infinita.

Consideremos una onda que transporta una cierta potencia por unidad de superficie en su frente de ondas en Wm^{-2} , conocida de antemano, y que incide sobre una superficie normal de área A_S . Podemos pensar, para fijar ideas, en una onda electromagnética. Nos interesa destacar cuatro aspectos esenciales relacionados con la detección de cuanta ²⁰ en el laboratorio, en el límite en que la potencia de la onda es muy débil, y son detectables señales individuales de los cuanta en los detectores:

¹⁸puede verse con facilidad que, en ambos casos, conduce a la integral del coseno sobre un número entero de ciclos.

¹⁹esta energía se ha observado indirectamente en experimentos de precisión, en el caso del campo electromagnético. Las fluctuaciones del campo en el vacío generan una fuerza atractiva entre dos placas metálicas muy próximas, que es conocida en la literatura como *fuerza de Casimir*.

²⁰utilizamos la palabra en español cuanta como el plural de quantum.

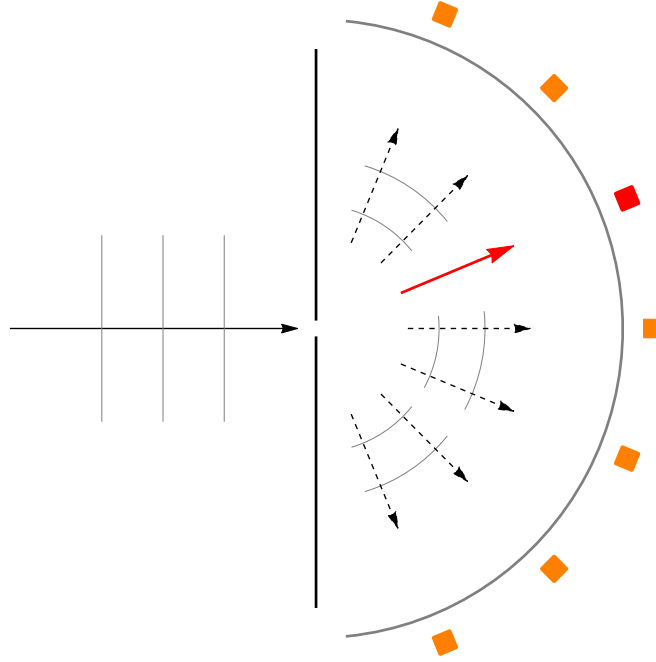


Figura 4: Cuando una onda muy débil se difracta, sólo uno de los detectores registrará el quantum, el resto no darán señal. No podemos predecir cuál es el detector que salta.

- La transferencia del quantum es **instantánea**, tiene carácter súbito y no gradual. El instante de tiempo en que se produce la transferencia, contado a partir del instante en que llega el frente de ondas, es impredecible, en relación al lapso de tiempo $\Delta t = \hbar\omega/(WA_S)$, que podríamos considerar como cadencia natural en la llegada de los cuanta.
- A todos los efectos, la onda se comporta como una colección de **partículas** que viajasen con ella, pero *no sincronizadas* con ella.
- El carácter aleatorio del quantum se extiende también a la dirección espacial de transferencia de la energía. Pensemos en una onda que se difracta a través de un pequeño agujero, y coloquemos una serie de detectores distribuidos uniformemente sobre una superficie esférica centrada en él. Es **impredecible** cuál de los detectores va a registrar la señal del quantum, y cuáles no registrarán señal. Esto se ilustra en la Figura 4. Un ejemplo relevante lo tenemos en la dirección de salida del fotón emitido por un átomo, o por un núcleo, dentro del ángulo sólido 4π .
- La idea de **potencia instantánea** de una onda (en Wm^{-2}) deja de tener sentido en el límite de ondas muy débiles. Se hace imposible seguir en el tiempo la transferencia de energía, al no ser continua. Evidentemente, la potencia instantánea que corresponde a la absorción de un quantum es infinita, si dividimos una energía finita por un tiempo *nulo*. La potencia de la onda en Wm^{-2} debe entenderse entonces como *potencia promedio*. El fenómeno es similar al que nos impidió definir la velocidad instantánea, en el caso de un móvil de masa m .

Todas las propiedades anteriores han sido confirmadas en el laboratorio con niveles muy elevados de precisión, especialmente en el caso de los fotones. Es claro que la existencia de cuanta introduce elementos aleatorios en la transmisión de la energía de las ondas. En el límite de ondas muy débiles, la transmisión de información se ve también afectada por un ruido inevitable.

Una consecuencia sorprendente de la presencia de la constante de Planck en la Física es, como hemos visto, la de hacer que los cuerpos de masa m y las ondas adquieran propiedades similares, por cuanto comparten **características aleatorias comunes**, que no eran esperables en ninguno de ellos.

3. La propagación de Feynman

Como se ha visto, el carácter discreto y *no nulo* de la acción reducida ($S_0 \gtrsim h$) impone que para medidas realizadas en intervalos de tiempo $\Delta t \lesssim \frac{h}{E}$ sobre la trayectoria de una partícula, sean esperables fluctuaciones importantes de su energía, que no son conciliables con la existencia de trayectorias diferenciables.

Si intentamos imaginarnos el movimiento como una sucesión de pequeños intervalos de tiempo, no debe sorprender que la aceptación del carácter discreto de la acción reducida (originalmente propuesto por Planck), conlleve una gran *transformación conceptual* en Física, que puede resumirse de la siguiente manera: el movimiento para $\Delta t \lesssim h/E$ tiene lugar de forma **no determinista**, de manera que la posición observada de una partícula, en un instante dado, no puede deducirse con certitud a partir de su posición y velocidad en un instante anterior.

Esta afirmación puede parecer sorprendente, y de hecho es contraria a lo que nos dice la teoría de ecuaciones diferenciales, donde la especificación de las condiciones iniciales (posición y velocidad) basta para determinar la solución única del movimiento, en cualquier instante posterior t . Pero tengamos en cuenta que esta teoría se basa en la *diferenciabilidad* de las trayectorias.

Se comprende por tanto que una adecuada descripción de la Física, que incluya el movimiento de átomos, moléculas y partículas elementales, obligue a desechar este carácter determinista. Por otro lado, es claro que cualquier nueva formulación en este sentido debe recuperar también las leyes del movimiento clásico, de tipo determinista, que sabemos describen con gran precisión el movimiento para intervalos de tiempo grandes $\Delta t \gg \frac{h}{E}$.

Veamos cómo puede realizarse esta nueva formulación de una forma rigurosa. Para ello, vamos a centrarnos en el movimiento unidimensional, volviendo a la discusión que hicimos en la Sección 1, para una partícula que se mueve en un pequeño intervalo de tiempo $\Delta t \rightarrow 0$ sometida a un potencial $U(x, t)$. Vimos entonces que el movimiento real “elige” de entre las infinitas posiciones intermedias x posibles entre x_1 y x_2 , aquella que satisface la ley de Newton $-\frac{\partial U}{\partial x} = m\ddot{x}$ que, como se ha visto, es aquella donde la acción S es mínima (véase Figura 1), de tal manera que cualquier otra posición x debe ser desechada. Pues bien, la nueva formulación no determinista de la Mecánica, consiste en admitir que TODAS las posiciones intermedias de la partícula son en principio **posibles**.

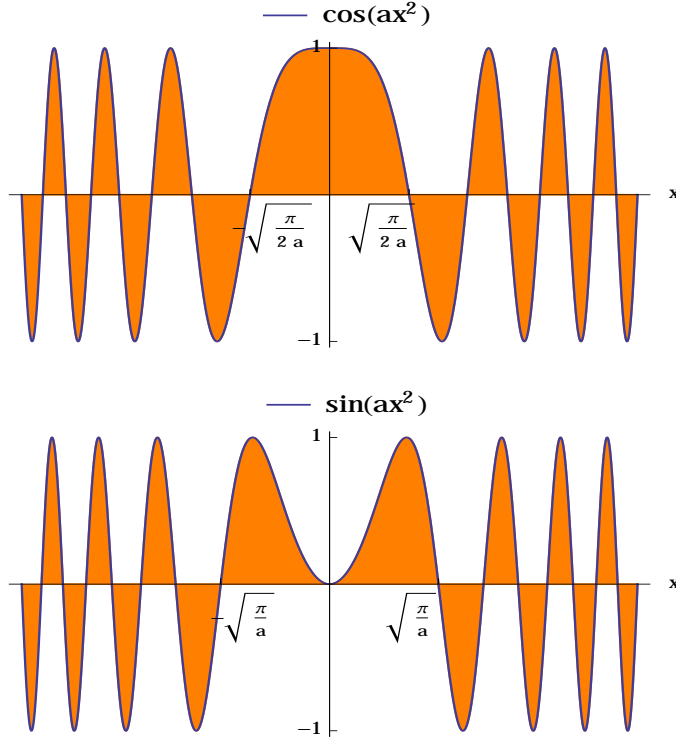


Figura 5: Representación gráfica de las funciones de Fresnel, que son la parte real (arriba) y la parte imaginaria (abajo) de la función e^{iax^2} .

Admitido esto, cumple decir que si la partícula se encuentra en la posición x_1 en el instante t_1 , al cabo de un pequeño intervalo de tiempo Δt ha ocupado virtualmente todo el espacio. Con objeto de precisar más esta virtualidad, definimos la **amplitud de propagación** $K(x, t) \equiv \langle x \ t \mid x_1 \ t_1 \rangle$ como un número COMPLEJO, que caracteriza el movimiento desde el punto x_1 al punto x . Su *fase* hace posible la interferencia entre las amplitudes de propagación que corresponden a distintas posiciones intermedias x en la transición entre x_1 y x_2 . El *módulo* de este número complejo depende únicamente del intervalo de tiempo $t - t_1$. Para cualquier intervalo de tiempo Δt , la amplitud de propagación para la transición entre $(x_1 \ t_1)$ y $(x_2 \ t_2)$ satisface el siguiente **postulado de propagación**:

$$\langle x_2 \ t_2 \mid x_1 \ t_1 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x_2 \ t_2 \mid x \ t \rangle \cdot \langle x \ t \mid x_1 \ t_1 \rangle dx \quad (14)$$

donde t es un tiempo intermedio $t \in (t_1, t_2)$. La integración de este producto de números complejos se realiza sobre todo el espacio virtual de posiciones intermedias x (por supuesto, reales).

Esta expresión indica la propiedad fundamental que deben satisfacer las amplitudes de propagación ²¹. Se resume diciendo: “para moverse de un punto a otro, los cuerpos deben sondear antes todas las posiciones del espacio”.

²¹la amplitud (14) se construye como una *suma* (integral) sobre muchas amplitudes distintas (camino), que contribuyen simultáneamente al movimiento. Se hace referencia a esta idea en la literatura como **principio de superposición**. Veremos en la Sección 6 cómo este principio se extiende inmediatamente al propio estado de movimiento.

En la Mecánica determinista (Mecánica Clásica), esta amplitud se asociaría con una probabilidad que fuese simplemente 1, en el caso de que el movimiento entre $(x_1 t_1)$ y $(x_2 t_2)$ sea posible, y cero en caso contrario. En cambio, en la Mecánica Cuántica, será justamente la amplitud cero la que no es posible, pudiendo pasarse desde la amplitud +1 a la amplitud -1 a través de un continuo de valores sobre el disco unidad del plano complejo. Esto hace posible la interferencia.

Una adecuada definición de la amplitud de propagación, en una nueva formulación de la Física, debe verificar que, en el caso del movimiento macroscópico (para intervalos de tiempo largos $\Delta t \gg \frac{\hbar}{E}$), el mecanismo de interferencia entre distintos “saltos” x alejados de la trayectoria clásica debe ser fuertemente **destrutivo**, con objeto de verificar la ley de Newton con precisión.

El postulado (14) está abocado a la utilización de la función exponencial en la amplitud de propagación, debido a la propiedad característica de ésta: $\exp(a + b) = \exp(a) \exp(b)$. Por otro lado, para lograr el mecanismo de interferencia anteriormente descrito estamos obligados a usar una función oscilatoria. Por tanto, se hace *inevitable* la utilización de los *números complejos* en la descripción del movimiento en Física, en la forma $e^{if(x)}$ ²². Resulta interesante que éstos no sean necesarios en la Mecánica Clásica.

La adecuada definición de la amplitud de propagación para $\Delta t \rightarrow 0$, que tomaremos aquí como un postulado, fue enunciada en 1948 por el físico norteamericano Richard P. Feynman. Este postulado debe adoptarse junto con el anterior (14) sobre la superposición y factorización de las amplitudes.

Principio de propagación de Feynman: *La amplitud de propagación para el movimiento de una partícula de masa m , sometida a un potencial $U(x, t)$, desde el punto x_1 en el instante t_1 al punto x en el instante t , en el límite $\Delta t = t - t_1 \rightarrow 0$, viene dada por:*

$$\begin{aligned} \langle x t | x_1 t_1 \rangle &= A e^{\frac{iS}{\hbar}} = A e^{\frac{i}{\hbar} L \Delta t} \\ &= \sqrt{\frac{m}{i2\pi\hbar\Delta t}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\frac{m(x - x_1)^2}{2\Delta t} - U \left(\frac{x + x_1}{2}, t \right) \Delta t \right) \right] \end{aligned} \quad (15)$$

donde $S = L\Delta t = (T - U)\Delta t$ es la acción clásica completa que corresponde al movimiento en el intervalo espacio-temporal entre (x_1, t_1) y (x, t) .

Para demostrar el valor del coeficiente $A = \sqrt{m/(i2\pi\hbar\Delta t)}$, es necesario tener en cuenta, en primer lugar, que en el límite $\Delta t \rightarrow 0$ la energía potencial no influye en dicho factor, si se compara el comportamiento asintótico opuesto de los dos términos del exponente ²³, siendo su valor exacto el obtenido para el movimiento libre ($U(x, t) = 0$). El valor de A se obtiene de la verificación del postulado (14) tras dividir el intervalo Δt en dos mitades $\Delta t/2$, y sumar los exponentes de los propagadores respectivos. Se deja como ejercicio para el alumno, usando para ello el valor de la integral:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ax^2+bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{-a}} e^{-b^2/4a} \quad a, b \in \mathbb{C} \quad \text{Re}(a) \leq 0$$

²²puede comprobarse de forma explícita que la función coseno (parte real de la anterior) fracasa en cumplir la relación integral (14).

²³esto es válido siempre que el potencial tenga un crecimiento asintótico para $x \rightarrow \pm\infty$ a lo sumo cuadrático, es decir si $|U(x, t)| \leq C(x - x_1)^2 \forall x$, para alguna constante C .

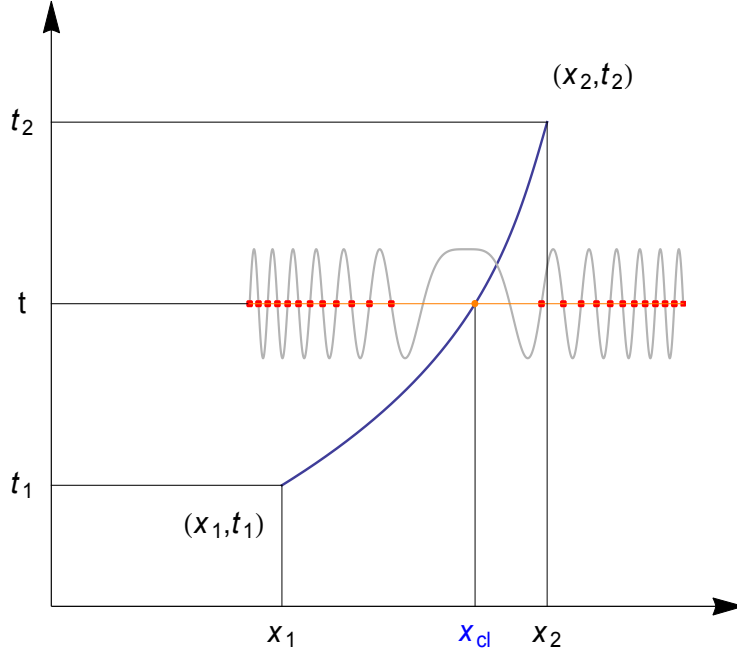


Figura 6: Posiciones x que ocupa un cuerpo (en rojo) en el instante t al pasar de x_1 a x_2 en un pequeño lapso de tiempo, separadas de la trayectoria clásica (azul), y la parte real de la amplitud que les asigna el propagador de Feynman (gris).

Al realizar el cálculo en la ecuación (14), el primer miembro será proporcional a $A(\Delta t)$ y el segundo proporcional a $A^2(\Delta t/2)\sqrt{\Delta t}$. La solución es $A \propto 1/\sqrt{\Delta t}$, verificándose $A(\Delta t/2) = \sqrt{2}A(\Delta t)$, de lo cual se sigue inmediatamente el resultado deseado.

Si consideramos por simplicidad el caso del movimiento libre, vemos que la parte real y la parte imaginaria del propagador son las conocidas funciones de Fresnel, cuya integral se obtiene de la anterior con $b = 0$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \cos(ax^2)dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \sin(ax^2)dx = \sqrt{\frac{\pi}{2a}}$$

La representación gráfica de estas funciones puede verse en la Figura 5. Una observación detallada de dicha figura hará comprender al alumno la razón por la cual estas integrales son convergentes: debido a la rápida oscilación de la fase para valores $x \rightarrow \pm\infty$, las contribuciones positivas y negativas se cancelan de forma tanto más precisa cuanto mayor es $|x|$, de forma que la contribución principal a la integral viene determinada por los valores de x en el entorno de los primeros ceros ²⁴ ($|x| \lesssim \sqrt{\frac{\pi}{a}}$).

Volviendo al principio de Feynman, vemos que esto tiene un significado físico importante, pues según (14) deben sumarse las contribuciones de todos los puntos x intermedios, tal como se muestra en la Figura 6, y la partícula fluctúa con alta probabilidad dentro de un intervalo alrededor del punto x_{cl} de la trayectoria clásica ($x_{cl} - \Delta x, x_{cl} + \Delta x$), con

$$\Delta x \lesssim \sqrt{\frac{\pi\hbar\Delta t}{m}} \quad (16)$$

²⁴los ceros son $x_n = \pm\sqrt{(2n-1)\pi/2a}$ para la función coseno y $x_n = \pm\sqrt{n\pi/2a}$ para el seno, con $n = 1, 2, \dots \infty$.

siendo improbables las fluctuaciones de mayor alcance, debido a las cancelaciones antes mencionadas. Veremos en la Sección 4 mayor detalle sobre lo ilustrado en la Figura 6, y sus consecuencias. La Sección 3.1 a continuación no es indispensable para comprender el resto, y el lector puede pasar directamente adelante.

3.1. Propagación exacta sobre un tiempo finito

La expresión (15) es válida para un intervalo de tiempo Δt infinitesimal. Si se desea realizar la propagación a través de un intervalo de tiempo finito, entonces es necesario aplicar (15) reiteradamente, en intervalos de tiempo sucesivos dt , teniendo en cuenta que, en cada uno de ellos, la partícula puede desplazarse desde cualquier punto del espacio hasta cualquier otro.

Sólo para el alumno específicamente interesado, indicamos a continuación la forma detallada en que se realiza esta integración. El intervalo $\Delta t = t_b - t_a$ se divide en pequeños subintervalos $\epsilon = t_{i+1} - t_i$ con $\Delta t = N\epsilon$, de manera que en cada instante t_i seleccionamos un punto arbitrario x_i y construimos un camino conectando todos los puntos así seleccionados (x_i, t_i) , para $i = 0, \dots, N$ con $t_N = t_b$. Podemos evaluar la Lagrangiana $L(x, \dot{x}, t)$ en cada punto (x_i, t_i) y aplicar el propagador (15) en cada subintervalo:

$$K(i+1, i) = \frac{1}{A} \exp \left[\frac{i\epsilon}{\hbar} L \left(\frac{x_{i+1} + x_i}{2}, \frac{x_{i+1} - x_i}{\epsilon}, \frac{t_{i+1} + t_i}{2} \right) \right]$$

entonces el propagador sobre el intervalo de tiempo finito es el producto de todos ellos:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \prod_{i=0}^{N-1} K(i+1, i) \quad (17)$$

que se corresponde exactamente con la siguiente expresión detallada:

$$K(x_b, t_b; x_a, t_a) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{A} \int \int \dots \int e^{\frac{i}{\hbar} S[b,a]} \frac{dx_1}{A} \frac{dx_2}{A} \dots \frac{dx_{N-1}}{A} \quad (18)$$

donde $S[b, a] = \int_{t_a}^{t_b} L(x, \dot{x}, t) dt$ es la integral de línea obtenida a partir del camino de trazos rectos (x_i, t_i) anteriormente indicado, y A es el factor calculado antes. La integración sobre las coordenadas espaciales se realiza en cada instante de tiempo t_i de la misma manera que antes, dando lugar a una integral múltiple $(N-1)$ -dimensional. Finalmente se toma el límite $N \rightarrow \infty$ (que equivale a $\epsilon \rightarrow 0$).

La expresión (18) es conocida en la literatura como **integral de caminos** de Feynman. Como se ha dicho, se trata de una integral múltiple $(N-1)$ -dimensional sobre las coordenadas espaciales, mientras que la suma en el tiempo viene a completar, en el límite $\epsilon \rightarrow 0$, la integral de acción en el exponente. Se suele utilizar la notación sucinta:

$$K(b, a) = \int_a^b e^{\frac{i}{\hbar} S[b,a]} \mathcal{D}x(t) \quad (19)$$

donde el símbolo $\mathcal{D}x(t)$ nos recuerda que la integración espacial múltiple (18) equivale de hecho a sumar sobre *todas* las trayectorias $x(t)$ posibles entre los puntos x_a y x_b . En la discusión que sigue, en particular la derivación de la ecuación de Schrödinger en la Sección 5, nos resultará suficiente la consideración del intervalo infinitesimal (15).

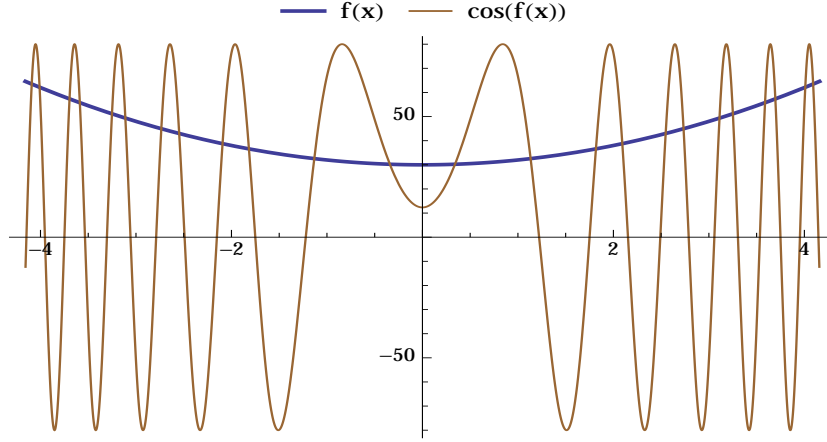


Figura 7: El número de oscilaciones de la función $\cos(f(x))$ es menor cerca del mínimo de $f(x)$.

4. La velocidad instantánea

Vamos a ver a continuación que, de acuerdo con la hipótesis de Feynman, la posición intermedia $x_1 < x < x_2$ que verifica la ley de Newton es precisamente el valor central alrededor del cual la partícula puede fluctuar en su posición.

Consideremos de nuevo la secuencia representada en la Figura 6, donde una partícula de masa m se mueve desde (x_1, t_1) a (x_2, t_2) pasando por la posición intermedia x (tiempo $t = (t_1 + t_2)/2$), siendo $\Delta t = t_2 - t_1$. Entonces la amplitud de transición $1 \rightarrow 2$ viene dada según (14) por:

$$\langle x_2 t_2 | x_1 t_1 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} M(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \langle x_2 t_2 | x t \rangle \langle x t | x_1 t_1 \rangle dx$$

que, de acuerdo con (15), puede expresarse como:

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{+\infty} A^2 e^{\frac{i}{\hbar} \left[\left(\frac{m}{2} \frac{(x-x_1)^2}{(\Delta t/2)^2} - U\left(\frac{x_1+x}{2}\right) \right) \frac{\Delta t}{2} \right]} e^{\frac{i}{\hbar} \left[\left(\frac{m}{2} \frac{(x_2-x)^2}{(\Delta t/2)^2} - U\left(\frac{x+x_2}{2}\right) \right) \frac{\Delta t}{2} \right]} dx \\ & = \int_{-\infty}^{+\infty} A^2 e^{\frac{i}{\hbar} \frac{\Delta t}{2} \left[\frac{m}{2} \frac{(x-x_1)^2 + (x_2-x)^2}{(\Delta t/2)^2} - (U\left(\frac{x_1+x}{2}\right) + U\left(\frac{x+x_2}{2}\right)) \right]} dx \end{aligned}$$

Es fácil comprobar que la mayor contribución a la integral proviene de la región en que x es próximo al valor que hace mínima la expresión entre corchetes. En general, para una función $f(x)$ que tenga un mínimo en $x = x_c$, el valor de la integral $\int_{-\infty}^{+\infty} \cos(f(x)) dx$, que es la parte real de la expresión anterior, recibe su mayor contribución de aquellos valores $x \simeq x_c$ donde el coseno tiene el menor número de oscilaciones por unidad de longitud, tal como se ilustra en la Figura 7. Pero el valor de x que hace mínima la expresión entre corchetes es precisamente el que verifica la segunda ley de Newton, $-\frac{\partial U}{\partial x} = m\ddot{x}$, tal como se demostró en la Sección 1, con arreglo a la fórmula (4).

Así pues, vemos que el efecto de interferencia destructiva que se deriva de la expresión (15) es esencial para producir una supresión en probabilidad de las posiciones muy separadas de la trayectoria clásica de la partícula (fluctuaciones) durante el tiempo de observación Δt .

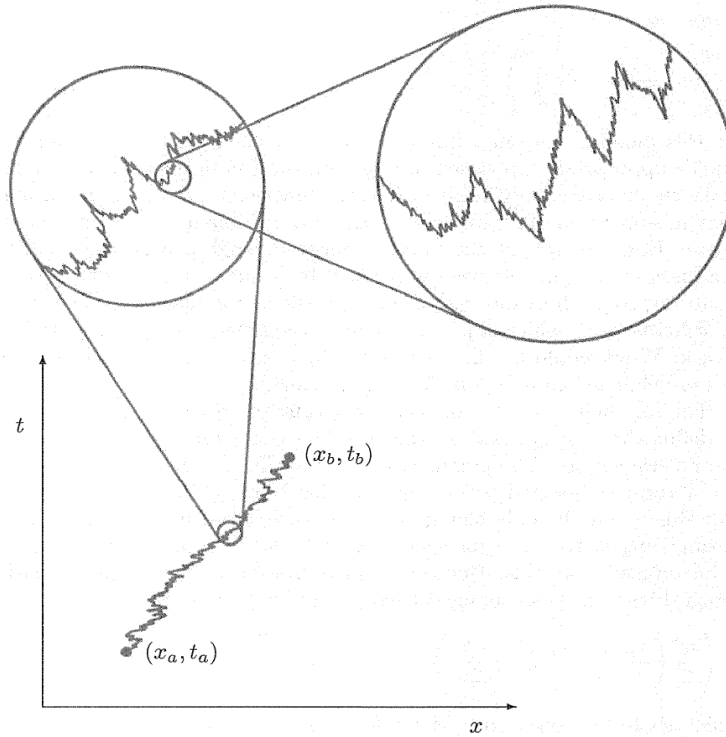


Figura 8: Camino irregular seguido por una partícula cuando se mira en detalle en un diagrama espacio-tiempo: la trayectoria no es diferenciable. Dibujo original de Richard Feynman en [Quantum Mechanics and Path Integrals](#), 1948.

Recordemos que la extensión espacial donde estas fluctuaciones actúan con mayor intensidad está determinada por la expresión (16). En ella podemos apreciar que, aunque la zona Δx manchada por dichas fluctuaciones se hace infinitamente pequeña en el límite $\Delta t \rightarrow 0$, no lo hace linealmente, sino proporcionalmente a $\sqrt{\Delta t}$ (con mayor lentitud). Por tanto el cociente $\Delta x/\Delta t$ **no es finito** en dicho límite, sino que diverge como $1/\sqrt{\Delta t}$. Esto nos dice que la velocidad instantánea no tiene sentido en la realidad física. Su módulo se hace siempre infinito, si tomamos la relación no relativista para la energía cinética ²⁵.

Esta importante conclusión, que es consecuencia en última instancia del carácter discreto (*no nulo*) de la acción reducida, rompe indudablemente con las ideas preconcebidas sobre la diferenciable de las trayectorias. Es claro que la observación de la partícula durante intervalos de tiempo cada vez más cortos, producirá necesariamente fluctuaciones en su velocidad $\Delta x/\Delta t$, siendo esta cada vez más alta. Por otro lado, si el intervalo de tiempo de observación es suficientemente largo, como es el caso, por ejemplo, de una fotografía de un móvil tomada con un tiempo de exposición de alguna fracción de segundo (10^{-2} – 10^{-3} s), entonces el movimiento aparece como perfectamente continuo, sin fluctuaciones. Esta idea puede apreciarse en la Figura 8, que ha sido tomada del libro de Feynman y Hibbs *Quantum Mechanics and Path Integrals*, Dover (2010).

²⁵recordamos aquí la consideración relativista realizada en 2.1, que lleva la velocidad hacia c .

5. La ecuación de Schrödinger

Hemos visto hasta ahora cómo el movimiento de una partícula en el límite $\Delta t \rightarrow 0$ puede representarse a través de una amplitud de propagación espacio-temporal $\langle x t | x_1 t_1 \rangle$, que es en realidad una función compleja de las variables reales (x, t) . Esta idea nos ha permitido conciliar el carácter discontinuo de la acción a pequeña escala con una descripción matemática continua que hará posible utilizar el cálculo diferencial para el estudio del movimiento.

Pese a su riqueza conceptual, la utilización práctica de la expresión (19) para propagar la partícula desde (x_1, t_1) hasta (x_2, t_2) cuando $\Delta t = t_2 - t_1$ es *finito* (no infinitesimal), requiere introducir nuevas técnicas matemáticas de integración, que no desarrollaremos aquí. En su lugar, demostraremos un camino más fácil para utilizar la expresión (19), basado en el cálculo diferencial. Basta darse cuenta de que la función $K(x, t) \equiv \langle x t | x_1 t_1 \rangle$ se comporta en realidad como una onda fuertemente dispersiva en las coordenadas (x, t) .

En efecto, vamos a demostrar que, basándonos en la expresión (14), y en la forma (15) de la amplitud de propagación $K(x, t) \equiv \langle x t | x_1 t_1 \rangle$ para $\Delta t = t - t_1 \rightarrow 0$, la función $K(x, t)$ satisface la siguiente ecuación diferencial, llamada **ecuación de Schrödinger**:

$$i\hbar \frac{\partial K(x, t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 K(x, t)}{\partial x^2} + U(x, t)K(x, t) \quad (20)$$

Para ello, consideremos que el punto $(x, t + \Delta t)$ puede ser alcanzado desde todos los puntos del espacio $x - \xi$ en el instante anterior t . Escribamos entonces la amplitud $K(x, t + \Delta t) \equiv \langle x t + \Delta t | x_1 t_1 \rangle$ como una integral sobre dichos puntos $x - \xi$, según la expresión (14):

$$K(x, t + \Delta t) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, t + \Delta t; x - \xi, t) K(x - \xi, t) d\xi$$

El primer factor del integrando $K(x, t + \Delta t; x - \xi, t) \equiv \langle x, t + \Delta t | x - \xi, t \rangle$ puede expresarse de acuerdo con el propagador de Feynman, con el resultado:

$$K(x, t + \Delta t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(\frac{i m \xi^2}{\hbar 2 \Delta t}\right) \exp\left(\frac{i}{\hbar} [-U(x - \xi/2) \Delta t]\right) K(x - \xi, t) d\xi \quad (21)$$

Dado que la función $K(x, t)$ es infinitamente diferenciable para $t \neq t_1$, para relacionar sus derivadas parciales planteamos su desarrollo en serie de potencias de Δt :

$$K(x, t + \Delta t) = K(x, t) + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} K(x, t) + \dots$$

y en potencias de ξ :

$$K(x - \xi, t) = K(x, t) - \xi \frac{\partial K(x, t)}{\partial x} + \frac{\xi^2}{2} \frac{\partial^2 K(x, t)}{\partial x^2} + \dots \quad (22)$$

así como también el desarrollo de la función exponencial:

$$e^{-\frac{i}{\hbar} U(x - \xi/2) \Delta t} = 1 - \frac{i}{\hbar} U(x - \xi/2) \Delta t + \dots = 1 - \frac{i}{\hbar} U(x) \Delta t + \frac{i \xi}{\hbar 2} \frac{\partial U}{\partial x} \Delta t - \frac{i \xi^2}{\hbar 4} \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \Delta t + \dots \quad (23)$$

Es claro que al hacer los productos cruzados de los desarrollos (22) y (23) en el segundo miembro de (21) van a aparecer 12 términos, de los cuales se anulan todos aquellos que sean potencias impares de ξ , al integrar entre $-\infty$ y $+\infty$. Para evaluar las potencias pares deben tenerse en cuenta los valores de las integrales ²⁶

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m\xi^2}{2\Delta t}} d\xi = \sqrt{\frac{2\pi i \hbar \Delta t}{m}}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m\xi^2}{2\Delta t}} d\xi = \sqrt{2\pi} \left(\frac{i\hbar \Delta t}{m} \right)^{3/2}$$

de forma que los términos resultantes en el segundo miembro de (21) son proporcionales a potencias de Δt , de las cuales despreciamos $(\Delta t)^2$, $(\Delta t)^3$, \dots en el límite $\Delta t \rightarrow 0$. La expresión finalmente obtenida es:

$$\Delta t \frac{\partial K(x, t)}{\partial t} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} \sqrt{2\pi} \left(\frac{i\hbar \Delta t}{m} \right)^{3/2} \frac{1}{2} \frac{\partial^2 K(x, t)}{\partial x^2} - \frac{i}{\hbar} \Delta t U(x) K(x, t)$$

de donde se obtiene (20) simplificando Δt en los dos miembros. Nótese que los términos en $\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} K$, $\frac{\partial U}{\partial x} \frac{\partial K}{\partial x}$, y $U \frac{\partial^2 K}{\partial x^2}$, resultan ser proporcionales a $(\Delta t)^2$ y no contribuyen en el límite $\Delta t \rightarrow 0$. La ecuación diferencial (20) es una herramienta fundamental en todas las aplicaciones de la Mecánica Cuántica. Fue descubierta por el físico austriaco Erwin Schrödinger en 1926.

6. La función de ondas

Hemos definido $K(x_2, t_2; x_1, t_1)$ como la amplitud de propagación para que una partícula de masa m , que se mueve sometida a un potencial $U(x, t)$, pase de (x_1, t_1) a (x_2, t_2) , y lo hemos hecho utilizando la acción clásica del movimiento. Pero a diferencia de lo que ocurre en la Mecánica Clásica, donde el movimiento, con unas condiciones determinadas, es posible o no, en la Mecánica Cuántica el movimiento es siempre posible. Por tanto la partícula inicialmente localizada en el punto x_1 , en un tiempo posterior $t > t_1$ va a ocupar virtualmente todo el espacio, y cada nuevo punto es susceptible de propagarse nuevamente en el tiempo. Se hace entonces necesario definir de forma general el estado de ocupación del espacio que puede tener una partícula en un instante determinado.

Tiene interés considerar la amplitud de propagación para que la partícula llegue a un punto dado sin ninguna información específica sobre su movimiento previo. Podemos definir una función compleja $\psi(x, t)$ que sea la **amplitud total** para llegar a (x, t) sin indicar el pasado. A esta amplitud se la llama **función de ondas**. No hay diferencia conceptual entre dicha amplitud y la amplitud de propagación que hemos visto. De hecho, el propagador $K(x, t; x_1, t_1)$ es una función de ondas, pues representa una amplitud concreta para llegar a (x, t) , la que proviene de (x_1, t_1) . Cuando utilizamos la notación de la función de ondas $\psi(x, t)$, queremos decir que no nos interesa el movimiento anterior.

²⁶la segunda de ellas se deduce de la primera derivando respecto al coeficiente que multiplica a ξ^2

Dado que $\psi(x, t)$ es una amplitud de propagación, satisface el postulado general de propagación que establecimos en la ecuación (14). Como esta ecuación es válida para *todos* los puntos x_1 , entonces la función de ondas debe satisfacer la ecuación integral:

$$\psi(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, t; x_1, t_1) \psi(x_1, t_1) dx_1 \quad (24)$$

Este resultado puede enunciarse en términos físicos: la amplitud total para llegar a (x, t) es la suma (integral) sobre todos los valores posibles de x_1 , de la amplitud total para llegar al punto (x_1, t_1) ($\psi(x_1, t_1)$), multiplicada por la amplitud para llegar desde x_1 a x ($K(x, t; x_1, t_1)$). Los efectos de la historia pasada de la partícula se pueden expresar entonces en términos de una única función. La ecuación (24) es válida con la forma exacta del propagador dada en 3.1, y resulta de gran utilidad aproximarla, para intervalos de tiempo cortos, por la expresión (15).

Dado que el propagador cumple la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial K(x, t)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 K(x, t)}{\partial x^2} + U(x, t)K(x, t)$$

es fácil demostrar que la función $\psi(x, t)$ satisface también dicha ecuación, es decir:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t) \right) \psi \quad (25)$$

lo cual dejamos como ejercicio al alumno (basta esencialmente aplicar la derivación bajo el signo integral). Ahora puede comprenderse mejor el significado matemático de la ecuación (24), pues la función $\psi(x_1, t_1)$ juega el papel de una única condición inicial (arbitraria) en la evolución de $\psi(x, t)$ ²⁷.

Así pues, tomaremos la función compleja $\psi(x, t)$ como definición del *estado de movimiento* de la partícula en el instante t . Se asocia a ella la siguiente **interpretación probabilística**, introducida por el físico alemán Max Born en 1926: la densidad de probabilidad de que la partícula se encuentre en el intervalo $(x, x + dx)$, como resultado de una medida, viene dada por:

$$\frac{dP(x, t)}{dx} = |\psi(x, t)|^2$$

Como la probabilidad total de que ocupe algún punto del espacio debe ser la unidad en cada instante t , debe verificarse la llamada **condición de normalización**²⁸:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (26)$$

Existe una correspondencia 1 – 1 entre los estados de movimiento de una partícula y las funciones complejas que verifican las ecuaciones (25) y (26).

²⁷ nótese que la ecuación de Schrödinger (25) es de primer orden en t , y sus soluciones dependen de una única constante de integración. No se requiere por tanto conocer el valor inicial de $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ en cada punto. En esto hay una diferencia esencial con la ecuación de Newton, y con la ecuación de ondas, donde figura la derivada segunda $\frac{\partial^2}{\partial t^2}$, y se requieren *dos* constantes de integración.

²⁸lo cual lleva implícito el requisito de convergencia de la integral, es decir, que la función ψ debe ser **de cuadrado sumable**.

Una importante propiedad de la función de ondas es que su multiplicación por cualquier factor de **fase global** de la forma $e^{i\theta}$, donde $\theta \in \mathbb{R}$ no depende de las coordenadas espaciales ni del tiempo, carece por completo de significado físico, y el producto sigue representando el mismo estado. Esto es consecuencia de la indefinición del cero de la energía potencial en Mecánica, y de la forma en que ésta actúa en el propagador de Feynman (15). En efecto, una redefinición $U(x, t) \rightarrow U(x, t) + C$ resulta indistinguible de un cambio en el origen de tiempos ($t = 0$) $t \rightarrow t + t_0$.

7. Ondas planas y transformación de Fourier

Desde el punto de vista matemático, la ecuación de Schrödinger (25), es una ecuación diferencial en derivadas parciales de segundo orden, a cuya familia pertenecen también la ecuación de ondas y la ecuación de difusión o propagación del calor (que resulta de cambiar la unidad imaginaria i por 1).

Consideremos como posible solución de la ecuación (25) la onda plana:

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} \quad (27)$$

que representa una onda que se propaga a lo largo del eje X positivo, con frecuencia angular ω , número de ondas k y velocidad $v_p = \omega/k$, y que verifica la ecuación de ondas

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \frac{1}{v_p^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0$$

y por tanto no verifica la ecuación (25) con $U(x, t) = 0$, a no ser que la relación de dispersión $\omega = \omega(k)$ sea exactamente:

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (28)$$

como se comprueba fácilmente utilizando las expresiones (27) y (25).

La asociación de la onda plana representada por la solución (27) con el estado concreto de una partícula la realizaremos siguiendo el camino históricamente trazado por el físico francés Louis De Broglie²⁹, quien conjeturó en 1923 lo siguiente:

Hipótesis de De Broglie. *Todo cuerpo móvil con momento p lleva asociada una onda, que es consustancial con su estado de movimiento, y cuya longitud de onda vale*

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (29)$$

siendo h la constante de Planck.

En efecto, esta onda no es otra cosa que el estado $\psi(x, t)$ definido por la solución (27) de la ecuación de Schrödinger, que hemos representado en la Figura 9 para $t = 0$. Con la relación de dispersión (28), asociamos la velocidad de la partícula con la velocidad de grupo $v_g = \frac{d\omega}{dk}$ de la onda:

$$p = mv_g = m \frac{d\omega}{dk} = m \frac{\hbar k}{m} = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$$

²⁹aunque él siguió un razonamiento totalmente relativista bien distinto al expuesto aquí.

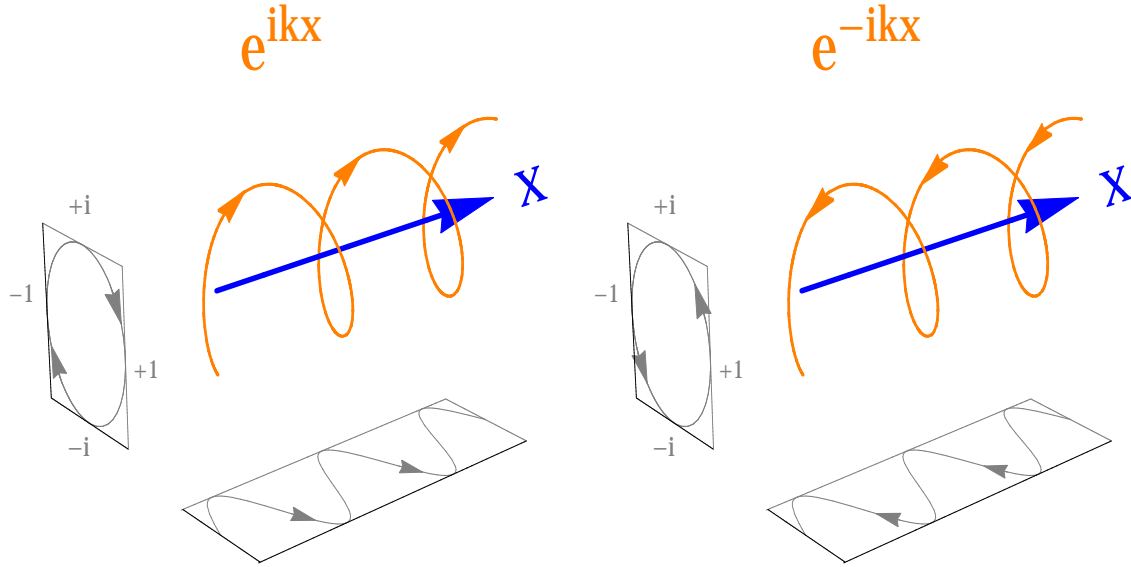


Figura 9: Ondas planas para una partícula en $t = 0$ propagándose a lo largo del eje X , para ambos signos del número de ondas $\pm k$. Obsérvese cómo la función nunca pasa por cero, teniendo un carácter dextro/levo en la propagación hacia adelante/atrás.

estando la energía de la partícula asociada con la frecuencia ω de dicha onda:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega$$

Las fórmulas $p = \hbar k$ y $E = \hbar\omega$ se conocen en la literatura como **relaciones de De Broglie**. La onda plana (27) es perfectamente relativista cuando se utiliza la relación de dispersión $\omega = \sqrt{\hbar^2 c^2 k^2 + m^2 c^4} / \hbar$, asociada a la energía total $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$.

El carácter fuertemente dispersivo se hace notar cuando superponemos ondas con distintos valores de λ para formar un pulso, pues las velocidades de propagación de sus fases serán inversamente proporcionales a sus longitudes de onda ($v_p = \omega/k = h/2m\lambda$), y el pulso perderá su forma.

Con esta asignación de momento y energía a la **onda plana** (27), su fase coincide exactamente con la acción clásica S dividida por \hbar , y por tanto representa también la amplitud de propagación de una *partícula libre* que se mueve con velocidad constante a través del espacio, según el propagador de Feynman.

En efecto, $x = vt$ y se cumple:

$$kx - \omega t = \frac{px}{\hbar} - \frac{Et}{\hbar} = \frac{1}{\hbar} \left(2\frac{mv^2}{2}t - Et \right) = \frac{1}{\hbar} Lt = \frac{1}{\hbar} S$$

donde, al ser $U = 0$ (movimiento libre), tenemos $L = E = T = mv^2/2$.

Téngase en cuenta que, en cualquier instante de tiempo t , la solución (27) presenta una densidad de probabilidad que es constante para todos los puntos x del espacio:

$$|\psi(x, t)|^2 = |A|^2 = \text{constante} \quad \forall x \in \mathbb{R} \quad (30)$$

Lo cual constituye una *idealización matemática*, pues resulta natural suponer que la longitud de los trenes de ondas preparados en el laboratorio no pueda superar las propias dimensiones del mismo, no importa lo grande que lo queramos imaginar, decayendo a cero fuera de él.

Esto equivale a decir, como veremos a continuación, que las partículas nunca tendrán su momento definido con total precisión. Una consecuencia de este carácter ideal (no realizable en la práctica) de estos estados, es que el valor correcto de la constante A en la ecuación (27) no puede ser determinado simplemente por la condición de normalización (26), ya que la integral es divergente. Es decir, no estamos hablando de una función de cuadrado sumable.

En un instante de tiempo determinado, se define la **transformada de Fourier** de la función de ondas $\psi(x)$ como:

$$f(k) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-ikx} dx \quad (31)$$

La transformación de Fourier es una de las armas matemáticas más potentes que se hayan inventado, y consecuentemente sus propiedades y teoremas asociados pueden encontrarse en numerosos libros de texto ³⁰. El *teorema de inversión* de la transformación de Fourier asegura que la función de ondas puede recuperarse siempre como:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(k) e^{ikx} dk \quad (32)$$

cumpléndose además que $\int_{-\infty}^{+\infty} |f(k)|^2 dk = 1$. Lo cual nos dice que pueden utilizarse ondas planas e^{ikx} con distintas longitudes de onda para construir cualquier función compleja definida sobre \mathbb{R} . Dado que $|\psi(x)|^2 dx$ representa la probabilidad de que la partícula sea detectada en $(x, x + dx)$, debemos asociar $|f(k)|^2 dk$ con la probabilidad de que la partícula tenga su momento en $(p, p + dp) = \hbar(k, k + dk)$. Nótese que mientras x se mide en unidades de longitud (m), k se mide en unidades de longitud inversa (m^{-1}): número de ondas por unidad de longitud.

De la misma manera que el cuerpo ocupa simultáneamente toda una región del espacio, debemos admitir que su velocidad no es única, sino que el espacio de velocidades se encuentra igualmente ocupado de manera continua, de acuerdo con la transformada de Fourier. Hay que enfatizar que las funciones complejas $\psi(x)$ y $f(k)$ proporcionan dos descripciones equivalentes de **un mismo estado de movimiento**, pues contienen exactamente la misma información. Esta *correlación* entre posiciones y velocidades de un cuerpo es un fenómeno que *no se produce* en la Mecánica Clásica.

8. Valores medios e indeterminación

Ya que la función de ondas $\psi(x)$ de la partícula ocupa todo el espacio, tiene gran interés saber con precisión el valor promedio $\langle x \rangle$ de las medidas que obtendríamos de su posición en cada instante. Igualmente saber la dispersión Δx en dichas medidas de la posición alrededor de este valor medio, es decir, la extensión espacial sobre la que fluctúa con mayor probabilidad.

³⁰véase por ejemplo “The Fourier Transform and its Applications”, R. N. Bracewell (2000).

Estas cantidades se calculan de la siguiente forma, a partir de la información contenida en la función de ondas $\psi(x)$:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x)|^2 dx \quad (33)$$

$$(\Delta x)^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$$

donde $\langle x^2 \rangle$ es el valor medio de x^2 , que se calcula evidentemente como:

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi(x)|^2 dx$$

No siendo posible, como se ha explicado, la definición de una velocidad instantánea, sí tienen en cambio perfecto sentido la *velocidad promedio* $\langle v \rangle$, y el momento promedio $\langle p \rangle$ de la partícula. Este último se determina, siguiendo la idea anterior, como el valor medio de k en la transformada de Fourier:

$$\langle p \rangle = \hbar \langle k \rangle = \hbar \int_{-\infty}^{+\infty} k |f(k)|^2 dk = m \langle v \rangle$$

Existe sin embargo una forma más directa de calcular el momento promedio sin tener que calcular previamente la transformada de Fourier de la función de ondas, pudiendo obtenerse $\langle p \rangle$ tras realizar una única integral. Para ello es necesario conocer algunas propiedades de la transformación de Fourier.

Dentro del conjunto de funciones de onda (espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R})$), puede definirse un **producto escalar** de la siguiente manera:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(x)^* \psi_2(x) dx$$

donde $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle$ es un número complejo.

Nótese que $\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle^*$. Puede comprobarse fácilmente que la existencia de este producto escalar confiere al espacio de Hilbert la estructura de espacio vectorial.

La transformada de Fourier cumple entonces la siguiente propiedad, conocida en los libros de matemáticas como *identidad de Parseval* generalizada:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_1(x)^* \psi_2(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} f_1(k)^* f_2(k) dk \quad \forall \psi_{1,2} \in L^2(\mathbb{R})$$

es decir, el producto escalar permanece invariante después de transformar cada uno de sus factores: $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle f_1 | f_2 \rangle$. Por tanto, el producto escalar puede asociarse realmente con la proyección de un estado cuántico en otro, siendo su resultado el mismo, ya se realice en la representación de posiciones de la función de ondas, o en la de momentos.

Este resultado nos permite calcular $\langle p \rangle$ directamente. En efecto, derivando respecto a x los dos miembros de la ecuación (32) tenemos:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} ik f(k) e^{ikx} dk$$

lo cual nos está indicando una propiedad general, que la transformada de Fourier de la derivada $\frac{\partial\psi}{\partial x}$ es simplemente $ikf(k)$. Por tanto:

$$\langle k \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} k|f(k)|^2 dk \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{i} f(k)^* (ikf(k)) dk = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{i} \psi^*(x) \frac{\partial\psi}{\partial x} dx$$

o en definitiva:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) (-i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial x}) dx$$

que es la fórmula directa que deseábamos encontrar.

Si se mira atentamente, esta expresión es formalmente idéntica a (33), y ambas pueden considerarse casos particulares de una definición más general de valor medio de un **operador** que representa a cualquier **magnitud física medible** A :

$$\langle A \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) (A\psi) dx = \langle \psi | A\psi \rangle \quad (34)$$

siendo $A = x$ (posición) ó p (momento). Para cada magnitud física medible A puede encontrarse unívocamente un operador específico, generalmente a partir de los dos anteriores. Estos operadores (que sirven esencialmente para calcular valores medios), son aplicaciones matemáticas *lineales* que asocian a cada elemento del espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R})$ otro elemento del mismo espacio ($\psi \rightarrow A\psi \in L^2(\mathbb{R})$).

Como acabamos de ver, el **operador momento** está representado por una derivación parcial respecto a la coordenada de movimiento:

$$p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Por supuesto, los valores medios $\langle A \rangle$ deben ser siempre *reales* sobre cualquier función de ondas, como lo son las medidas de cualquier magnitud física A en el laboratorio. Esto obliga a que los operadores físicos A deben ser **autoadjuntos**, es decir, que verifiquen $\langle \psi | A\psi \rangle = \langle A\psi | \psi \rangle \equiv \langle \psi | A | \psi \rangle \forall \psi$, para que pueda cumplirse lo anterior. Tiene también perfecto sentido la evaluación de $\langle A^2 \rangle$. En este caso, debe entenderse la acción de A^2 como la aplicación reiterada $A(A\psi)$. Nótese la *analogía profunda* de estos operadores con las matrices complejas hermíticas, que también son operadores lineales autoadjuntos sobre un espacio vectorial, de dimensión finita. Análogamente pueden definirse potencias más elevadas, desarrollos en serie, etc.

Las medidas individuales realizadas en el laboratorio de la magnitud A , obtenidas con idéntico estado inicial ψ , manifestarán el carácter no determinista de la Mecánica arrojando valores aleatorios. Sin embargo, podemos predecir con exactitud la dispersión de dichas medidas (ΔA) alrededor de su valor medio, a través de la expresión:

$$(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \quad (35)$$

Si la aplicamos, por ejemplo, al operador momento p , el cálculo de $\langle p^2 \rangle$ se realiza por medio de la siguiente integral:

$$\langle p^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) (-\hbar^2 \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}) dx$$

cuyo valor es siempre positivo o nulo para funciones de cuadrado sumable, como puede demostrarse usando la integración por partes. Vemos entonces que el operador $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, t)$, que aparece en la ecuación de Schrödinger (25), representa la energía total, pues el primer término representa la energía cinética.

De acuerdo con todo lo anterior, tenemos ahora una prescripción de cálculo que nos permite evaluar, usando el cálculo integral, los valores medios y la dispersión, tanto de la posición como del momento de una partícula, como de cualquier otra magnitud construida a partir de ellos. En otras palabras, hemos aprendido a “decodificar” la información contenida en la función de ondas $\psi(x)$ de una partícula, para hacer predicciones estadísticas sobre los resultados de las medidas de cualquier observable en el laboratorio.

Al igual que ocurre con las matrices, la acción de estos operadores no es en general conmutativa. Por ejemplo, es un ejercicio simple comprobar que, para cualquier función de ondas ψ , se cumple que:

$$xp - px = i\hbar$$

donde es necesario advertir sobre una costumbre frecuente en la Mecánica Cuántica: se están utilizando los mismos símbolos para designar los *valores* de las magnitudes físicas y los *operadores* que las representan. En realidad queremos decir que: $(xp - px)\psi = i\hbar\psi \quad \forall \psi$.

9. El principio de indeterminación

Una de las propiedades más notables de la transformación de Fourier es que, si la función original es muy estrecha ($\Delta x \rightarrow 0$), su transformada es muy ancha ($\Delta k \rightarrow \infty$). La idea matemática es bien intuitiva: no podemos construir una función estrecha sumando únicamente longitudes de onda ($\lambda = 2\pi/k$) mayores que su anchura. En otras palabras, el producto $\Delta x \Delta k$ es aproximadamente la unidad. El enunciado preciso del teorema matemático es: $\Delta x \Delta k \geq 1/2, \quad \forall \psi$. Los pasos necesarios para demostrarlo, como teorema general de la transformación de Fourier (independiente de la constante de Planck), son los siguientes:

a) Partir de la expresión evidente:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(x + \lambda \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi \right]^* \left(x + \lambda \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx \geq 0 \quad \forall \lambda \in \mathbb{R}$$

donde $x + \lambda \frac{\partial}{\partial x} = x + i\lambda k$ es un operador *real*, con $k \equiv -i \frac{\partial}{\partial x}$.

b) Sumar y restar a la expresión entre corchetes $\psi \cdot \left(x - \lambda \frac{\partial}{\partial x} \right)$, y demostrar que:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(x + \lambda \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi^* - \psi^* \cdot \left(x - \lambda \frac{\partial}{\partial x} \right) \right] \left(x + \lambda \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx = 0$$

debido a que el integrando es una derivada total, y se cumple:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial}{\partial x} \left[\psi^* \cdot \left(x + \lambda \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi \right] dx = 0$$

ya que cualquier función de cuadrado sumable ψ debe verificar $\left| x|\psi|^2 + \lambda \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{-\infty}^{+\infty} = 0$.

c) Finalmente expresar lo que queda de la integral original como:

$$\langle x^2 \rangle + \lambda^2 \langle k^2 \rangle - \lambda \geq 0$$

y observar que, sin pérdida de generalidad, $\langle x^2 \rangle = (\Delta x)^2$ y $\langle k^2 \rangle = (\Delta k)^2$ al ser estas cantidades independientes de la elección del origen de coordenadas. La prueba del teorema se sigue de examinar el discriminante de la parábola anterior en λ .

Dejamos como ejercicio para el alumno la realización detallada de estos pasos, y pasamos a discutir la trascendencia física que adquiere el resultado, cuando tenemos en cuenta que la derivación parcial $\frac{\partial}{\partial x}$ representa como sabemos el *momento*, según $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = \hbar k$.

El resultado fue enunciado por primera vez por el físico alemán Werner Heisenberg en 1929, y se conoce en Física como **principio de indeterminación**³¹ posición-momento: si conocemos con gran precisión (Δx) la posición que ocupa un cuerpo, entonces son inevitables grandes fluctuaciones en el valor de su momento (Δp), estando las anchuras de ambas distribuciones relacionadas por la desigualdad:

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar/2 \quad (36)$$

que se cumple para toda función de ondas, en cualquier instante de tiempo. El impacto en la Física es enorme. Revela la imposibilidad por principio de conocer simultáneamente con total precisión la posición de un cuerpo a lo largo de una dirección determinada, y su momento en esa misma dirección.

Es claro que, en el caso límite de la onda plana (27), tenemos $\Delta x = \infty$ (partícula totalmente deslocalizada) y $\Delta p = 0$ (estrictamente monocromática). En el extremo opuesto, la función $K(x, t) = \langle x, t | x_1, t_1 \rangle$ representa la evolución temporal de una partícula localizada en el punto x_1 en el instante t_1 ($\psi(x) = \delta(x - x_1)$) con $\Delta x = 0$, siendo en ese mismo instante $\Delta p = \infty$. En efecto, téngase en cuenta que, según la expresión (15) la partícula inicialmente localizada en x_1 (en el instante t_1) puede alcanzar cualquier punto del espacio x en un instante posterior $t > t_1$ con igual probabilidad, luego su espectro de velocidades en el instante t_1 es realmente infinito, y por tanto $\Delta p = m\Delta v = \infty$.

Cuando la partícula se desplaza por el espacio en la forma de un pulso dispersivo con velocidad de grupo v , tiene perfecto sentido definir la **indeterminación en el tiempo** que se origina como consecuencia de la indeterminación espacial, en la forma: $\Delta t \equiv \Delta x/v$. Se puede igualmente calcular la indeterminación en la energía a partir de Δp como:

$$\Delta E = \Delta\left(\frac{p^2}{2m}\right) = \frac{p}{m}\Delta p = v\Delta p$$

donde también figura la velocidad de la partícula, y hemos utilizado la regla de la cadena para relacionar las variaciones de energía y momento. Idéntico resultado se obtiene diferenciando la expresión relativista para la energía $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$ (siendo m la masa en reposo), teniendo en cuenta que $v = \beta c = pc^2/E$ en este caso. Es claro que el producto $\Delta E \Delta t$ no depende ya de v , y de la expresión (36) obtenemos el **principio de indeterminación energía-tiempo**:

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar/2 \quad (37)$$

³¹en el mundo científico de habla hispana, es igualmente frecuente la denominación: “principio de incertidumbre”. En inglés se usa generalmente la expresión: “uncertainty principle”.

Una consecuencia inmediata de la expresión (36) es que todo cuerpo confinado en una región del espacio de tamaño $2\Delta x$ necesariamente adquiere una energía cinética cuyo valor medio cumple:

$$\langle T \rangle = \frac{1}{2m}(\Delta p)^2 \geq \frac{1}{4} \frac{1}{2m} \frac{\hbar^2}{(\Delta x)^2}$$

lo cual es evidente, si prescindimos de la velocidad global del sistema, siendo entonces $\langle p \rangle = 0$. Dado que hemos calculado el valor medio de T , no estamos hablando de fluctuaciones individuales en una medida concreta de la energía cinética, sino de un desplazamiento de la mayoría de las medidas. Por esta razón, suele utilizarse el principio de indeterminación como una igualdad aproximada, en la forma: $\Delta x \Delta p \sim \hbar$ ³², y escribirse directamente que la energía cinética adquirida es $T \sim \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2}$.

Para darnos una idea numérica de la magnitud de esta energía debida a las fluctuaciones cuánticas, podemos considerar la partícula más ligera que tenemos en la materia ordinaria, el electrón. Su masa es $m_e = 9.109 \times 10^{-31} \text{Kg}$, y evaluamos su energía cinética en eV para tres valores de interés: $\Delta x = 1 \text{mm}$, $1 \mu\text{m}$ y 1Å , con valores respectivos: $3.8 \times 10^{-14} \text{ eV}$, $3.8 \times 10^{-8} \text{ eV}$ y 3.8 eV . Mientras en los dos primeros casos la energía es inobservable en el laboratorio, en el tercero pasa a ser muy significativa.

Esta es justamente la situación que se da en el átomo de Hidrógeno, que hemos aproximado aquí crudamente en 1D. En este caso conocemos el potencial que lo confina, que es la ley de Coulomb, pero lo importante es que hemos podido llegar a conclusiones bastante exactas sobre la energía del sistema sin necesidad de conocer dicho potencial, simplemente a partir del tamaño del objeto. Cuando además se conoce el potencial de confinamiento, el principio de indeterminación nos permite estimar siempre, al menos en 1D, la energía del estado fundamental, encontrando el mínimo de la energía total.

La expresión (37) para la indeterminación energía-tiempo puede usarse también como la igualdad aproximada: $\Delta E \Delta t \sim \hbar$. Esto nos sirve para estimar la energía cinética ΔE adquirida por el confinamiento en el tiempo. Por ejemplo, vemos que cuando $\Delta t \sim \hbar/E$ dicha energía es significativa en términos relativos, ya que $\Delta E/E \sim (\hbar/E)(1/\Delta t) \sim 1$.

10. Extensión a tres dimensiones

Todas las ideas desarrolladas se han formulado suponiendo que tanto el movimiento, como el campo de fuerzas $U(x, t)$, ocurren únicamente en una dimensión, el eje X. Sin embargo, el movimiento real tiene lugar a lo largo de 3 coordenadas espaciales $\mathbf{r} = (x, y, z)$, que dependen del tiempo t . La extensión a 3 dimensiones de todo lo anterior puede realizarse de forma inmediata, y no requiere la introducción de nuevos postulados.

Es un ejercicio de gran utilidad escribir correctamente, utilizando la notación vectorial $\mathbf{r}(t)$, las siguientes expresiones:

- amplitud de propagación de Feynman
- ecuación de Schrödinger
- función de ondas y acción del propagador sobre ellas

³²conviene conocer que para la mayor parte de los pozos de potencial en su estado fundamental, la aproximación citada se verifica con mayor exactitud que si se utilizase en la forma $\Delta x \Delta p \sim \hbar/2$.

- onda plana, relación de dispersión y velocidad de grupo
- valor medio de una magnitud escalar A y vectorial $\mathbf{A} = (A_x, A_y, A_z)$
- transformada de Fourier
- producto escalar de funciones de ondas
- operador \mathbf{p}
- operador $H = \mathbf{p}^2/2m + U$
- principio de indeterminación

El paso a 3D de cada uno de los apartados anteriores no se encuentra en ningún caso vacío de contenido conceptual. Dejamos para el alumno este ejercicio, apuntando que en los factores de normalización de la transformada de Fourier y del propagador de Feynman, se hace necesario reemplazar el factor $(2\pi)^{1/2}$ por $(2\pi)^{3/2}$.

Escribamos como ejemplo el resultado para la ecuación de Schrödinger en 3D:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(\mathbf{r}, t) \right) \psi \quad (38)$$

Utilizando la definición del operador de Laplace $\Delta \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, la ecuación de Schrödinger se suele escribir así :

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + U(\mathbf{r}, t) \right) \psi \quad (39)$$

O de forma aún más simple, utilizando el operador Hamiltoniano $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + U$:

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

Al extender a 3D el principio de indeterminación debe recordarse que este afecta únicamente a la posición y el momento medidos a lo largo del mismo eje: $\Delta x_i \Delta p_i \sim \hbar$ con $x_i = x, y, z$. La transformada inversa de Fourier en 3D se escribe como:

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \iiint f(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} d^3\mathbf{k} \quad (41)$$

y *se suman* las energías generadas independientemente por el confinamiento en cada uno de los ejes coordenados, ya que $\langle T \rangle = [(\Delta p_x)^2 + (\Delta p_y)^2 + (\Delta p_z)^2] / 2m$.

Existe una magnitud física que no tiene sentido en 1D, que es el giro o momento angular, designado por el vector \mathbf{L} . En cada instante, este se calcula como el producto vectorial de los vectores posición $\mathbf{r}(t)$ y momento $\mathbf{p}(t)$: $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. El principio de indeterminación impide conocer simultáneamente sus 3 componentes $\mathbf{L} = (L_x, L_y, L_z)$ con total precisión. Los valores medios y la dispersión en cada componente pueden calcularse en principio, para una función de ondas determinada, de acuerdo con las fórmulas (34) y (35), aunque el conocimiento de los autoestados simplifica generalmente los cálculos.

Número de medidas

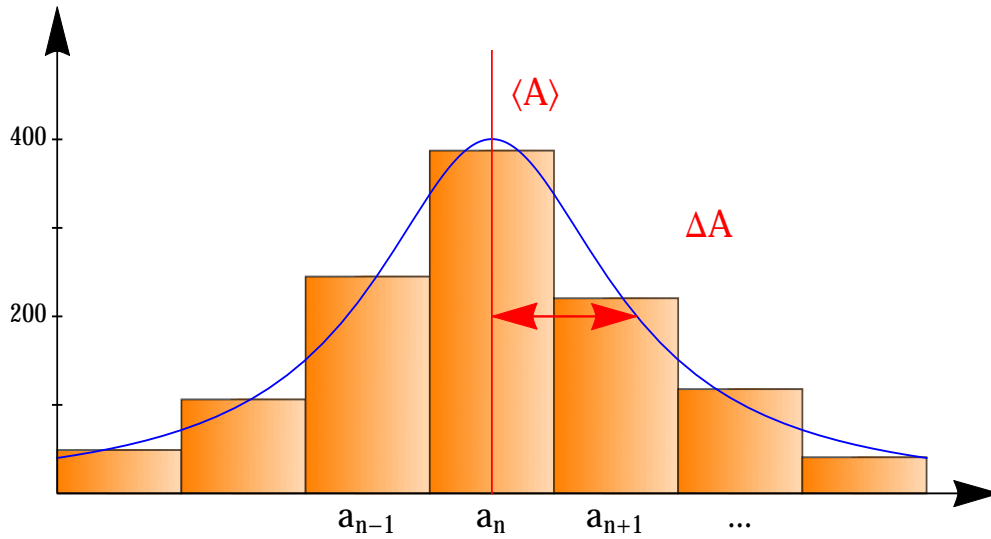


Figura 10: Distribución de 1000 medidas realizadas en el laboratorio de la magnitud A , sobre un estado ψ que no es autoestado de dicha magnitud, y que ha sido preparado idéntico cada vez. Sólo los autovalores a_n resultan medibles, siendo aleatoria la distribución, con una función de probabilidad calculable.

11. Autoestados y valores medibles

Dada una magnitud física medible A , debemos hacernos la siguiente pregunta: ¿existen funciones de ondas ψ tales que dicha magnitud esté bien definida en ellas, de tal manera que la repetición de medidas sobre tales estados ψ arrojen siempre el mismo valor real $a \in \mathbb{R}$? O de forma más precisa: ¿existen funciones ψ tales que, en ellas, $\Delta A = 0$?

Con la definición anterior de ΔA , estamos en situación de responder matemáticamente a dicha pregunta. Supongamos que somos capaces de resolver el **problema de autovalores** para el operador A : $A\psi = a\psi$. Esto significa encontrar los autovalores a y los autovectores ψ posibles en dicha ecuación ³³. En este caso, la ecuación (35) nos permite comprobar inmediatamente que: $(\Delta A)^2 = a^2\langle\psi|\psi\rangle - a^2\langle\psi|\psi\rangle^2 = 0$, ya que $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ debido a la propiedad de normalización.

Por tanto el problema queda formulado en términos matemáticos: se trata de resolver el problema de autovalores para el operador A . Los estados ψ buscados son los autovectores de dicho problema, llamados en la Mecánica Cuántica **autoestados** ³⁴. Sabemos que los autovalores a serán siempre reales, pero anticipamos que no recubrirán en general toda la recta real, sino que definirán un subconjunto dentro de la misma. En muchos casos este subconjunto, que recibe el nombre de *espectro* del operador A , será discreto. Será esencial en la determinación de este subconjunto el imponer que la función de ondas debe ser continua en \mathbb{R}^3 , y de cuadrado sumable. Todos aquellos valores reales a que no pertenezcan al espectro del observable A resultarán prohibidos, y nunca podrán ser medidos en el laboratorio. Además ocurre que, sobre los autoestados, las medidas resultan *reproducibles* y arrojan siempre el mismo valor.

³³en general, se tratará de una ecuación diferencial en derivadas parciales.

³⁴en inglés: *eigenstates* (autoestados), *eigenvalues* (autovalores), y *eigenfunctions* (autofunciones). Esta denominación tiene su origen en el alemán, lengua embrionaria en el desarrollo de la Mecánica Cuántica.

De la misma manera que los autovectores de una matriz que corresponden a autovalores distintos son ortogonales entre sí, ocurre lo mismo con los autoestados de cualquier operador lineal: forman un conjunto ortonormal de funciones (las **autofunciones**), con la definición que hemos dado del producto escalar, en el espacio de funciones de cuadrado sumable (espacio de Hilbert). Además, los autoestados que corresponden al mismo autovalor a_n forman un *subespacio* de dimensión $N(a_n)$ en el cuál también es posible definir una base ortonormal $\{\psi_{n,k}, k = 1, N(a_n)\}$.

Supongamos que medimos determinada magnitud A en el laboratorio, para un cuerpo que se encuentra inicialmente en un estado ψ que *no* es un autoestado, y obtenemos el valor $a \in \mathbb{R}$. Es generalmente admitido que la función de ondas experimenta un cambio tras la medida, y debe ahora ser una autofunción ψ_a , correspondiente al autovalor medido. Dado que la medida excluye valores alternativos $a_x \neq a$ que no se han realizado ³⁵ éstos no pueden ser ya considerados como parte del estado de movimiento de la partícula.

Este fenómeno por el cuál la realización de una medida altera aleatoriamente el estado del cuerpo observado se conoce en la literatura como el **colapso de la función de ondas**. La idea fue propuesta originalmente en 1932 por el matemático húngaro John von Neumann, y es hoy generalmente admitida en la Mecánica Cuántica. En el laboratorio, el colapso de la función de ondas ocurre de manera súbita e impredecible, de forma similar a como hemos descrito en la Sección 2.6 para la detección de un fotón. Es justamente aquí donde se manifiestan las fluctuaciones cuánticas, ya que el conocimiento de la función de ondas no nos permite saber “a priori” cuál será el autovalor medido. En la Figura 10 se representa una posible distribución de estas medidas.

Es importante saber que, según lo anterior, la transición de la función de ondas $\psi \rightarrow \psi_a$ en el momento de la medida **no está gobernada por la ecuación de Schrödinger**, siendo desconocidas por la Física actual las leyes que gobiernan el colapso de la función de ondas. Esto se comprende fácilmente, ya que la función de ondas resultante de la evolución con la ecuación de Schrödinger estaría unívocamente determinada a partir de ψ por el propagador de Feynman, de acuerdo con la expresión (24).

De forma general, podemos afirmar que el conjunto de autofunciones de cualquier operador hermítico A forma una base ortonormal del espacio de funciones de cuadrado sumable, y por tanto cualquier función de ondas, en un instante determinado, puede expandirse en la forma:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n \sum_k c_{n,k} \psi_{a_n,k}(\mathbf{r}) \quad (42)$$

donde $\{\psi_{a_n,k}(\mathbf{r}), k = 1, N(a_n)\}$ son las autofunciones ortogonales que corresponden a cada autovalor real distinto a_n , k se llama índice de degeneración, y los coeficientes complejos $c_{n,k}$ pueden obtenerse como productos escalares $c_{n,k} = \langle \psi_{a_n,k} | \psi \rangle$. La propiedad de normalización exige que $\sum_{n,k} |c_{n,k}|^2 = 1$, y ello nos indica que los valores $\sum_k |c_{n,k}|^2$ son las probabilidades de que la medida realizada sobre ψ arroje el valor a_n .

Nótese que la transformada inversa de Fourier que vimos anteriormente (ecuación (41)) es en realidad un caso particular de (42), que corresponde a las autofunciones del momento (ondas planas $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$), estando ausente el índice de degeneración k , con $a_n = \mathbf{p}_n = \hbar\mathbf{k}_n$ y $c_n = f(\mathbf{k}_n)$. En ese caso, la suma (integral triple) se extiende en realidad sobre un conjunto *continuo*, al ser continuo en general el espectro de momentos \mathbf{p} .

³⁵no consideramos aquí el efecto de las fluctuaciones estadísticas inherentes a toda medida, ni su posible error sistemático.

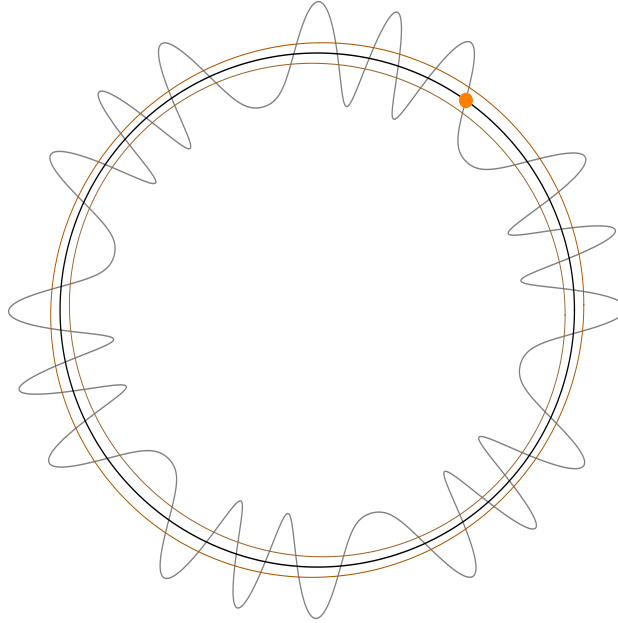


Figura 11: Ilustración de la idea de un estado estacionario en un espacio de coordenadas 2D: las fluctuaciones cuánticas son de tal naturaleza que en cada punto (naranja) la fase del propagador (línea ondulada) recupera exactamente su valor sobre trayectorias clásicas cerradas (círculo negro). Se necesitan muchas órbitas clásicas de este tipo para formar un estado estacionario.

12. Los estados estacionarios

Imaginemos una trayectoria clásica periódica de energía E , que se inicia en el punto \mathbf{r}_0 con periodo Δt ³⁶ como la representada en la Figura 11. En cada instante de tiempo t la partícula irá recorriendo puntos a lo largo de esta trayectoria, y podemos asociar a cada punto \mathbf{r} el valor de la fase dado por la acción clásica completa $S = \int_{t_0}^t L dt$ en el propagador de Feynman: $K = Ae^{iS/\hbar} = Ae^{i(S_0 - Et)/\hbar} = e^{-iEt/\hbar} Ae^{iS_0/\hbar}$ ³⁷.

Si queremos que el movimiento retenga el carácter periódico que muestra en la Mecánica Clásica, es necesario que, en cada punto del espacio \mathbf{r} , esta fase retorne a su valor inicial en cada ciclo, lo cual exige que se cumpla la condición:

$$\frac{S_0}{\hbar} = 2\pi n \quad n = 1, 2, \dots, \infty$$

Al aplicar la condición anterior a los sistemas integrables, conviene saber que en dichos sistemas las trayectorias se encuentran confinadas sobre *toros invariantes* en el espacio fásico, cuya proyección sobre el espacio de coordenadas muestra una frontera.

³⁶en la Mecánica Clásica con N grados de libertad, el movimiento periódico está bien caracterizado tanto en los sistemas integrables como en los sistemas caóticos. En el primer caso, debería llamarse más apropiadamente *multiperódico*, ya que tiene lugar confinado dentro de *toros invariantes* en el espacio fásico de energía constante, con $N - 1$ frecuencias independientes entre sí. Como los números racionales forman un conjunto denso dentro de los números reales, siempre podemos hacer que dichas frecuencias sean proporcionales a un conjunto apropiado de enteros, de manera que sean *conmensurables*, siendo entonces el movimiento verdaderamente periódico. En los sistemas caóticos no existen tales toros, porque no existen más constantes del movimiento que la energía total E . Pero las órbitas periódicas conservan todo su sentido, aún estando aisladas o siendo inestables al cabo de muchos ciclos.

³⁷propagador que, sobre la trayectoria clásica, se hace exacto para cualquier intervalo de tiempo.

Para asegurarnos de que la acción es realmente una función univaluada de las coordenadas, es necesario admitir una pérdida de fase de $\pi/2$ cada vez que la proyección de la trayectoria cerrada alcanza la frontera anteriormente mencionada ³⁸. Por tanto la condición de cuantificación exacta es: $S_0/\hbar = (n + \beta/4)2\pi$, donde β es el número (entero) de intersecciones con la frontera, es decir $S_0 = (n + \beta/4)h$, justo la que habíamos formulado en la Sección 2. En los sistemas caóticos, las trayectorias periódicas experimentan igualmente un refuerzo al estar en fase, pero sus periodos no son conmensurables, y muchas trayectorias pueden contribuir, con periodos muy largos, a una energía determinada.

Con independencia del tipo de movimiento, podemos conjeturar que en la Mecánica Cuántica existen estados de energía bien definida, donde el factor de fase temporal $e^{-iEt/\hbar}$, introducido por la propagación sobre la trayectoria clásica, sea heredado por la función de ondas. Esto sería natural, pues dicho factor indica una periodicidad temporal acorde con la frecuencia de De Broglie $\omega = E/\hbar$, unívocamente relacionada con la energía ³⁹. Vemos por tanto que, bajo la hipótesis de dominancia de las trayectorias clásicas en la propagación exacta, el principio de cuantificación de la acción encuentra pleno fundamento en la teoría de Feynman, y la fórmula $S_0 = \oint \mathbf{p}d\mathbf{r} = (n + \alpha)h$ es una excelente aproximación para calcular las energías permitidas en los sistemas integrables. Se la conoce genéricamente en la literatura como **aproximación semiclásica**.

Pero no nos basta una solución aproximada, y deseamos tener la solución exacta para el problema de las energías, siendo la teoría de Feynman exacta. Además, es un hecho que la mayor parte de los sistemas físicos de interés (como átomos multielectrónicos, moléculas, núcleos, o materia condensada en sólidos o líquidos) son caóticos en su formulación clásica, y la aproximación semiclásica anterior no resulta útil en ellos. La forma más efectiva de tratar el problema es utilizar la ecuación de Schrödinger, dándonos cuenta de que, en la situación descrita, la función de ondas $\psi(\mathbf{r}, t)$ de la partícula debe presentar en todos los puntos del espacio una fase común, periódica en el tiempo. Se trata de un fenómeno análogo a los modos normales en el movimiento ondulatorio.

Deseamos por tanto que la densidad de probabilidad de encontrar la partícula en cualquier punto \mathbf{r} sea constante en el tiempo:

$$\frac{\partial |\psi(\mathbf{r}, t)|^2}{\partial t} = 0 \quad \forall \mathbf{r} \in \mathbb{R}^3 \quad (43)$$

es decir, que se trate de una densidad de probabilidad estacionaria, similar a la distribución invariable de velocidades en un fluido, o a la distribución de temperaturas cuando el flujo de calor en un medio se ha hecho estacionario.

³⁸para una comprensión detallada de esta afirmación en la Mecánica Clásica, es conveniente alguna lectura adicional. Véase por ejemplo el curso de M. V. Berry, "Semiclassical mechanics of regular and irregular motion", North Holland, 1983. Sirva como ejemplo relevante el movimiento en un campo central, donde la coordenada radial r va y viene entre los límites (r_{min}, r_{max}) . La frontera se alcanza justo en esos límites, cuando cambia el signo del momento radial.

³⁹nótese que esta frecuencia no coincide con la que el cuerpo tiene clásicamente $\omega_{cl} = 2\pi/\Delta t$, siendo Δt el periodo.

Podemos entonces lograr soluciones de este tipo a la ecuación de Schrödinger (40) siguiendo los dos pasos siguientes:

- 1) Encontrar soluciones a la ecuación de *autovalores* para el operador energía H :

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (44)$$

para algún valor del parámetro real E (energía total), e imponer la condición de que la función $\psi(\mathbf{r})$ tenga sentido como función de ondas.

Es decir, que cumpla:

- a) La condición de normalización $\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r} = 1$ (integral convergente $< +\infty$).
- b) La continuidad de la función de ondas en cada punto del espacio \mathbb{R}^3 . También la continuidad en cada punto de sus derivadas espaciales $(\frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{r}})$, a no ser que en dicho punto se haya admitido un potencial infinito ⁴⁰.

Es el cumplimiento de las dos condiciones anteriores lo que realmente produce una restricción de los valores de la energía E , llevándolos a sus valores cuánticos.

- 2) Construir a continuación la siguiente función de ondas dependiente del tiempo:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-iEt/\hbar}\psi(\mathbf{r}) \quad (45)$$

que evidentemente representa los estados estacionarios buscados, ya que:

- a) es solución de la ecuación de Schrödinger (40)
- b) cumple la condición (43)

Dejamos como ejercicio simple comprobar que la función de ondas (45) verifica efectivamente los dos apartados anteriores. La ecuación (44) puede escribirse como:

$$H\psi = E\psi \quad (46)$$

y recibe el nombre de **ecuación de Schrödinger independiente del tiempo**. El operador H queda especificado a partir del campo de fuerzas $U(\mathbf{r})$, y el cálculo exacto de las energías de los estados estacionarios queda por tanto reducido a un problema matemático de autovalores, que implica una ecuación diferencial de segundo orden, independiente del tiempo. Los autovalores deben ser reales, al ser H autoadjunto.

Son admisibles condiciones iniciales y de contorno, por ejemplo en la forma de ondas planas o esféricas incidentes, o emergentes, en una dirección determinada. Las condiciones de contorno pueden significar que la función de ondas deba ser nula en determinados dominios del espacio. Esto se consigue habitualmente introduciendo un potencial infinito en tales dominios.

⁴⁰tales potenciales (paredes impenetrables, ley de Coulomb en el origen, funciones delta de Dirac, etc.) no son nunca totalmente realizables en la práctica, pero su introducción puede simplificar matemáticamente el problema en cuestión, y se utilizan habitualmente.

Por supuesto, todos los resultados obtenidos a partir de la ecuación (46), con las condiciones de contorno adecuadas, llevan implícita la precisión de la integral de caminos de Feynman que vimos en 3.1. Como en cualquier problema de autovalores, según lo estudiado en la Sección 11, está asegurado de antemano que los autoestados cumplen $\Delta E = 0$, es decir, que su energía está bien definida. La resolución de la ecuación diferencial $H\psi = E\psi$ para los campos de fuerzas más elementales en una o varias dimensiones (potencial de paredes impenetrables, oscilador armónico, saltos de potencial, ley de Coulomb, etc), será tratada en los próximos temas.

Una vez resuelto el problema de autovalores de la energía con un potencial determinado, disponemos de un conjunto de autofunciones y autovalores de la energía asociados $\{\Phi_{n,k}(\mathbf{r}), E_n, n = 1, \infty, k = 1, N(E_n)\}$, donde k recorre los números cuánticos necesarios para describir las distintas autofunciones ortogonales de igual energía E_n , en el subespacio asociado a este autovalor ⁴¹. La dimensión de este subespacio (número de estados ortogonales de igual energía), recibe en la literatura el nombre de **degeneración cuántica** $g = N(E_n)$. Aunque el fenómeno de la degeneración existe también en la Mecánica Clásica (y es, en general, infinita), el elemento esencial es que, en la realidad física, se trata siempre de un número *finito* y calculable, que constituye la base para el cálculo de la entropía en la Mecánica Estadística.

Expansión en estados estacionarios

Como los autovectores de norma unidad de una matriz (hermítica, en este caso) forman siempre un conjunto ortonormal, dentro del espacio vectorial donde actúa dicha matriz, cualquier función de ondas, en un instante de tiempo determinado, puede expresarse como una combinación lineal de autoestados de la energía. Si por sencillez prescindimos del índice k , que no resulta esencial en la discusión que sigue, podemos escribir: $\psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n \Phi_n(\mathbf{r})$, con números complejos $c_n \in \mathbb{C}$ tales que $\sum_n |c_n|^2 = 1$, estando la dependencia temporal de la función de ondas determinada por la expansión anterior:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar} \Phi_n(\mathbf{r}) \quad (47)$$

como se deduce de la ecuación de Schrödinger, al aplicar la fórmula (45) a cada término. Es importante darse cuenta que tal función no es, en general, un estado estacionario, a no ser que sean cero todos los coeficientes c_n excepto uno. En otras palabras, la condición necesaria y suficiente para que un estado tenga su energía bien definida es que “no se mueva”, según lo indicado en la expresión (43).

Teniendo en cuenta que el producto escalar $c_n = \langle \Phi_n | \psi \rangle$ es independiente de t , podemos reescribir, más en detalle:

$$\psi(\mathbf{r}_2, t_2) = \sum_n \langle \Phi_n | \psi \rangle e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t_2-t_1)} \Phi_n(\mathbf{r}_2) = \sum_n \left(\int \Phi_n^*(\mathbf{r}_1) \psi(\mathbf{r}_1) d^3\mathbf{r}_1 \right) \Phi_n(\mathbf{r}_2) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}(t_2-t_1)}$$

⁴¹por ejemplo, para una partícula de energía E_n encerrada entre las 6 paredes de un paralelepípedo, las posibles orientaciones de su momento. En un potencial de tipo central, los necesarios para indicar su estado de momento angular: (l, m) .

reordenando los factores, y recordando cómo actúa el propagador sobre las funciones de ondas, según la versión 3D de la fórmula (24), llegamos a la conclusión de que el propagador de Feynman exacto puede escribirse como :

$$K(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1) = \sum_n \Phi_n(\mathbf{r}_2) \Phi_n^*(\mathbf{r}_1) e^{-i \frac{E_n}{\hbar} (t_2 - t_1)} \quad (48)$$

donde la propagación puede ser considerada tanto hacia adelante ($t_2 > t_1$) como hacia atrás en el tiempo ($t_2 < t_1$), en la expresión anterior. Sin embargo, para lograr la reversión temporal completa $(\mathbf{r}_2, t_2) \rightarrow (\mathbf{r}_1, t_1)$ es necesaria la utilización del propagador conjugado $K^*(\mathbf{r}_2, t_2; \mathbf{r}_1, t_1)$. La expresión (48) tiene gran utilidad en problemas de todo tipo, que incluyen la dispersión de una partícula por un potencial determinado. También nos demuestra que los estados estacionarios de energía definida son espacialmente invariantes bajo la acción del propagador, tal como habíamos conjeturado al inicio de esta Sección. Para comprobarlo, basta aplicar K sobre un autoestado $\Phi_m(\mathbf{r})$, según (24), y tener en cuenta la ortogonalidad de éstos.

13. La fórmula de Bohr

Hemos visto que, de acuerdo con la ecuación de Schrödinger, una combinación lineal de estados estacionarios genera una dependencia en el tiempo de la función de ondas que ya no es estacionaria, y que adopta la forma de un pulso que se desplaza.

Vamos a analizar la densidad de probabilidad en el caso en que la partícula se encuentra en un estado que es la superposición de dos estados de energías distintas: E_2 (estado *alto*) y E_1 (estado *bajo*), con $E_2 > E_1$. Esta situación es muy general y puede darse en infinidad sistemas físicos, dando lugar a un fenómeno cuántico llamado *oscilación*. Veremos que la partícula se desplaza virtualmente por el espacio de manera periódica, con una frecuencia ω determinada por la **fórmula de Bohr**: $E_2 - E_1 = \hbar\omega$. En el caso en que dicha partícula tenga carga eléctrica, la oscilación da lugar a la emisión de un fotón de igual frecuencia, en acuerdo cualitativo con lo predicho por la Electrodinámica Clásica, al cabo de un cierto tiempo Δt . Por tanto la fórmula de Bohr no es una mera consecuencia de la conservación de la energía y de la existencia de fotones, sino que tiene su fundamento en la ecuación de Schrödinger.

En efecto, supongamos que la función de ondas tiene la forma $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$, siendo $\psi_{2,1}$ las funciones de onda en el estado alto y bajo respectivamente, con $c_{1,2} \in \mathbb{C}$.

Dado que la fase global carece de significado físico, podemos suponer sin pérdida de generalidad que c_1 es real positivo ($c_1 > 0$), y que $c_2 = c_1 e^{i\phi_0}$. Si nos fijamos en un punto \mathbf{r} del espacio, es claro que la densidad de probabilidad en dicho punto recibe una contribución de la interferencia entre ambos estados:

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = |c_1\psi_1 + c_2\psi_2|^2 = |c_1|^2 |\psi_1|^2 + |c_2|^2 |\psi_2|^2 + 2 \operatorname{Re} \left(|c_1 c_2| |\psi_1 \psi_2| e^{-i \left(\frac{(E_2 - E_1)t}{\hbar} - \Phi \right)} \right)$$

donde $\Phi(\mathbf{r}) = \phi_2(\mathbf{r}) - \phi_1(\mathbf{r}) - \phi_0$ está determinada por la diferencia de fase en ese punto entre las funciones de onda $\psi_1 = |\psi_1| e^{i\phi_1(\mathbf{r})}$ y $\psi_2 = |\psi_2| e^{i\phi_2(\mathbf{r})}$.

La densidad de probabilidad es una función periódica del tiempo:

$$|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = A(\mathbf{r}) + B(\mathbf{r}) \cos(\omega t - \Phi(\mathbf{r}))$$

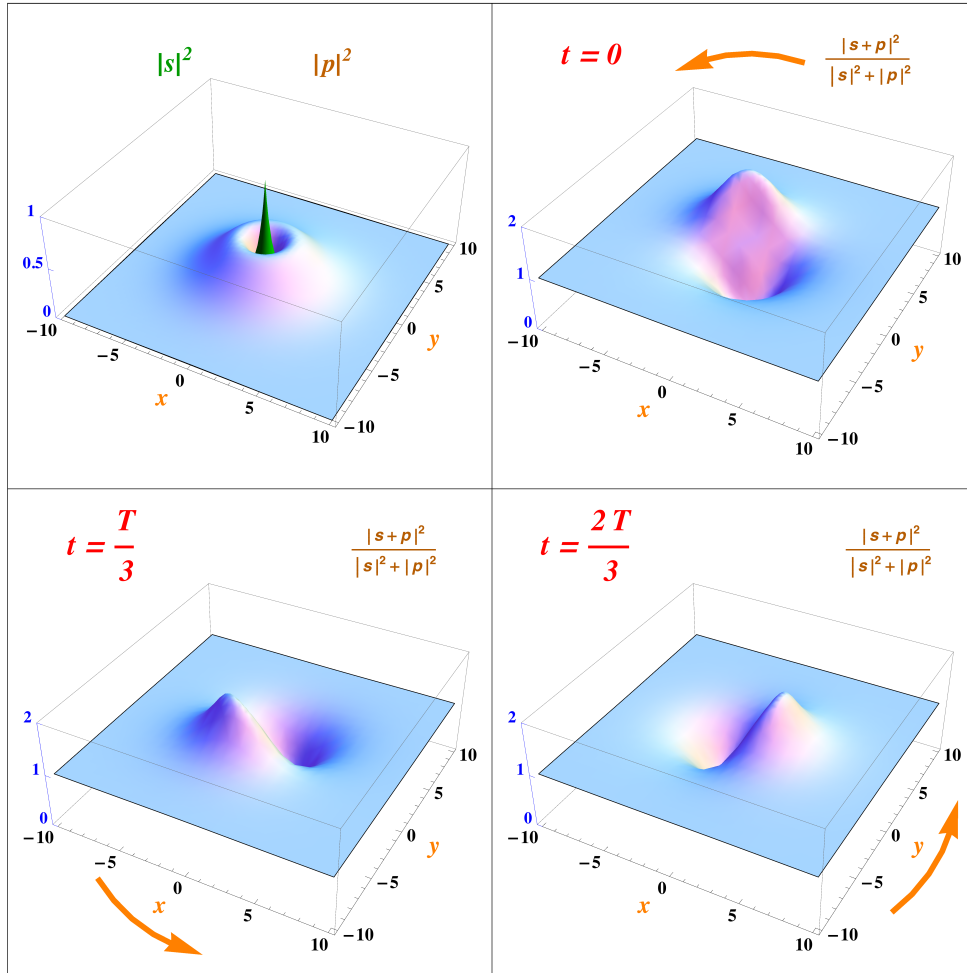


Figura 12: Densidad de probabilidad en el plano horizontal (XY) del estado no estacionario que resulta de superponer los orbitales $2p$ ($n = 2, l = 1, m = 1$) y $1s$ ($n = 1, l = 0$) del Hidrógeno. Puede verse cómo la interferencia entre ambos genera un dipolo eléctrico que es función del tiempo y que gira alrededor del núcleo con la frecuencia de Bohr (periodo $T = \frac{2\pi}{\omega}$). La escalas horizontales son unidades del radio de Bohr a_0 . El orbital $2p$ se ha multiplicado por un factor 50, en el panel de arriba a la izquierda.

que oscila entre un valor máximo $A + B$ (interferencia constructiva) y un valor mínimo $A - B$ (interferencia destructiva) con una frecuencia ω que es independiente del punto \mathbf{r} , y que está determinada por la fórmula de Bohr.

Las funciones A y B sí dependen del punto $A(\mathbf{r}) = |c_1|^2|\psi_1(\mathbf{r})|^2 + |c_2|^2|\psi_2(\mathbf{r})|^2$ y $B(\mathbf{r}) = 2|c_1c_2||\psi_1(\mathbf{r})\psi_2(\mathbf{r})|$. Resulta evidente que el aumento de la probabilidad en ese punto necesariamente significa la disminución de la misma en otros puntos, debido a la normalización de las funciones de onda, y recíprocamente. Por tanto lo que se produce es un desplazamiento global de la partícula (oscilación), que tiene carácter periódico.

La oscilación cesa en el momento en que se localiza la partícula, o se mide su energía. Nótese que, durante el proceso de oscilación, la energía no se encuentra bien definida ($\Delta E \neq 0$). Es un ejercicio interesante calcular ΔE de forma explícita, y comprobar que $\Delta E = |c_1c_2|(E_2 - E_1)$.

La medida de la energía se logra, para partículas cargadas, al detectar el fotón emitido, lo cuál proporciona evidencia de que la partícula se encuentra ya en el estado bajo. En este caso, el tiempo promedio que tarda en emitirse el fotón Δt puede estimarse a partir del principio de indeterminación $\Delta E \Delta t \sim \hbar$ ⁴².

Existen también ejemplos de oscilación con partículas eléctricamente neutras, siendo especialmente interesante el caso relativista de las oscilaciones de sabor de los neutrinos de momento p con masas (energías) distintas $m_1 \neq m_2$. El cese de la oscilación lo provoca en este caso la observación en el laboratorio del neutrino con un sabor determinado⁴³.

Un ejemplo en 3D de oscilación cargada lo tenemos cuando el electrón en el átomo de Hidrógeno adopta un estado cuántico que es una superposición entre el estado fundamental con $n = 1$ (orbital $1s$) y el primer excitado con $n = 2$, $l = 1$ y $m = 1$ (orbital $2p$). Estas funciones de onda se obtienen de resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con el potencial coulombiano, y se estudiarán más adelante. En coordenadas esféricas, tienen la forma genérica: $\psi = R_{nl}(r)Y_m^l(\theta, \phi)$. La densidad electrónica en el plano horizontal se ha representado en la Figura 12 en función del tiempo, viéndose cómo gira alrededor del núcleo. Se ha supuesto $c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$ y la densidad se ha dividido por la suma de las densidades electrónicas de ambos orbitales, representadas también independientemente en dicha figura.

El fenómeno anterior se llama **emisión espontánea** y la superposición de las funciones de onda ocurre debido a la acción del campo electromagnético del vacío en esa frecuencia (recordar lo visto en la Sección 2.6, fórmula (13)). El tiempo de vida promedio es calculable en la Electrodinámica Cuántica a partir de las funciones de onda.

14. La Mecánica Cuántica en el marco relativista

Hemos abordado una parte del estudio de las leyes de la física cuántica suponiendo que la velocidad de la partícula es pequeña en comparación con la velocidad de la luz c , a pesar de que la extensión al dominio relativista de todas las ideas expuestas se logró históricamente casi al mismo tiempo. No tratar el formalismo plenamente relativista como materia troncal se justifica por dos razones:

- Para el electrón, la ecuación de Schrödinger $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$ es plenamente relativista, con una adecuada definición del operador H . Se la conoce en la literatura como *ecuación de Dirac*. Sus soluciones para el movimiento libre siguen siendo ondas planas (llamadas *espinores*) pero éstas contienen nuevos grados de libertad internos (el *espín*), así como la posibilidad de representar a las antipartículas (el *positrón*), lo cuál está íntimamente relacionado con sus propiedades de propagación espacial hacia atrás en el tiempo. El formalismo exige cálculos algo más largos.
- La mayor parte de las aplicaciones en Física Atómica, Física Molecular, Física de la Materia Condensada, e incluso Física Nuclear, tienen lugar a velocidades no relativistas, y el cálculo con la ecuación de Dirac resulta innecesario (excepto para fenómenos de precisión, como los relacionados con la polarización del vacío). Además, el tratamiento de muchos cuerpos se complica notablemente. Únicamente en Física de Partículas está generalizado el tratamiento relativista.

⁴²este tiempo Δt no debe confundirse con el periodo de la oscilación $T = 2\pi/\omega$.

⁴³para analizar este caso, sugerimos resolver el ejercicio propuesto en el Curso.

Recapitulando, nos damos cuenta de que en el formalismo tratado anteriormente, sólo el propagador de Feynman y el Hamiltoniano de la ecuación de Schrödinger fueron expresados de forma no relativista (basados en la ecuación $E = \frac{p^2}{2m}$). En cambio, son esencialmente relativistas las relaciones de De Broglie, el principio de indeterminación de Heisenberg (relacionado con éstas últimas), el conjunto ortogonal de estados estacionarios, y la dependencia temporal (47) asociada con la descomposición sobre ellos. Teniendo esto presente, las ideas anteriores pueden ser aplicadas en la resolución de todo tipo de problemas con velocidades próximas a c , a condición de utilizar correctamente la cinemática relativista.

Es claro que no corresponde a este curso profundizar más en el tema. Simplemente añadir que una de las consecuencias más notables de la Relatividad en la Mecánica Cuántica es hacer el principio de indeterminación un poco más restrictivo: se hace imposible la localización completa de la posición de una partícula, con independencia de la indeterminación en su momento.

La máxima localización espacial (Δx mínima) que puede tener una partícula de masa en reposo m viene dada en Relatividad por la llamada **longitud de onda de Compton**:

$$\lambda_C = \frac{h}{mc}$$

y ningún experimento puede determinar la posición de una partícula con mayor precisión que ésta. Para el electrón, $\lambda_C = 0.024 \text{ \AA}$.

Es preciso señalar que en un marco totalmente relativista, adecuado para describir datos de colisiones en aceleradores de partículas, la Mecánica Cuántica ya no se mantiene como teoría enteramente consistente, y debe ser sumergida en otra teoría más perfecta, llamada Teoría Cuántica de Campos. Dicha teoría extiende a la Mecánica Cuántica también en aplicaciones no necesariamente relativistas, en la física de la Materia Condensada. En Electromagnetismo, recibe el nombre de Electrodinámica Cuántica.