

Un poco de física cuántica para chicos listos de primero (del grado de física o matemáticas)

Fernando Chamizo

23 de julio de 2015

Versión preliminar

Índice


1. Algunas ideas básicas de física cuántica y matemáticas	2
1.1. Las bases creíbles de la física cuántica	3
1.2. Un ejemplo con el que jugar	5
1.3. Analizando el ejemplo y soñando con el álgebra lineal	6
1.4. Un ejemplo del ejemplo	8
1.5. Experimentos con átomos	11
1.6. Lo que no te vas a creer de la física cuántica	14
1.7. ¿Filosofía cuántica?	17
1.8. Energías, momentos y posiciones como operadores	18
1.9. Observables, mediciones e incertidumbre	20
1.10. Algunos problemas resueltos	22
2. El espín con álgebra lineal	24
2.1. Un poco de historia alrededor del espín	25
2.2. Máquinas de Stern-Gerlach	27
2.3. El espín con vectores y matrices	29
2.4. Productos tensoriales y entrelazamiento	32
2.5. Acciones fantasmagóricas a distancia	34
2.6. Teletransporte	38
2.7. Algunos problemas resueltos	40
3. Otros temas relacionados de física y matemáticas	42
3.1. Todo es una onda	42
3.2. Análisis funcional: el álgebra lineal a lo grande	44
3.3. La famosa ecuación de Schrödinger	46
3.4. La ecuación de Dirac	49


Motivación


Las matemáticas son una ciencia utilitaria y así lo demuestra que los programas de los grados de ciencias incluyan en sus primeros cursos asignaturas de álgebra, cálculo, estadística o matemáticas generales. Un problema habitual es que estas asignaturas tratan los temas de manera genérica, sin referencia al grado en el que se imparten. En esta línea, un motivo para escribir este documento es que los buenos estudiantes de primero de física vean una conexión entre lo que estudian en primero, sobre todo en la asignatura de álgebra lineal, y temas que seguro que han llamado su atención a través de la literatura de divulgación, y que dentro de algún tiempo formarán parte de sus estudios. Sin embargo, la principal motivación es seguir batallando en la difícil tarea de acercar a los estudiantes de matemáticas temas de física y hacerles entender la gran ventaja de sus capacidades frente a otros estudiantes de ciencias que encuentran insuperable un razonamiento matemático medianamente abstracto.

Leyenda:

 Guía de lectura de la sección.


 Prohibido creérselo a pie juntillas. Es opinión del autor y tu profesor de física puede no estar de acuerdo.

 Comentario para los que tengan conocimientos matemáticos un poco más avanzados.

 Comentario para los que tengan conocimientos físicos un poco más avanzados.

Cosas que hay que saberse antes de empezar: Números complejos, momento lineal, energía, vectores, producto escalar, matrices, bases, autovalores, autovectores, derivadas parciales, integrales.

1. Algunas ideas básicas de física cuántica y matemáticas

 Esta sección es dura y debes ser paciente. Si has leído mucha divulgación de física cuántica, rara vez te habrás encontrado con fórmulas y eso impone serias limitaciones a lo que se puede sacar en claro. Después de una ligera introducción, aquí estudiaremos con cierto detalle un ejemplo que llevará a unas fórmulas bastante complicadas. La ventaja frente a la divulgación es que ahí estará toda la información, sin tener que aceptar sin rechistar conclusiones a cada instante. Sobre todo para los estudiantes de matemáticas, también será importante ver cómo se intuyen y crean fórmulas físicas sin el seguro apoyo de los axiomas, las definiciones y el rigor.

La historia de los albores de la física cuántica es bastante azarosa y no es demasiado fácil dar una visión breve y veraz que conecte con los conceptos actuales. En definitiva, que si estás muy interesado por los orígenes detallados de la física cuántica, preferirás leer [SR05] y quizá consultar algunos de los artículos originales en [vdW67].

1.1. Las bases creíbles de la física cuántica

La mecánica cuántica fue durante algún tiempo sobre todo una mecánica ondulatoria (en realidad competían una mecánica de matrices y una de ondas, pero la de ondas venció). Varios fenómenos sugerían que a pequeña escala las partículas tienen un comportamiento ondulatorio, así por ejemplo los electrones se difractan al pasar por una malla microscópica (aunque este decisivo experimento, de 1927, es relativamente tardío). Con una combinación de experimentos y suposiciones, se infirió que, en una dimensión espacial, la onda básica que corresponde a momento lineal p y energía E es

$$(1.1) \quad \varphi(x, t) = e^{i(px - Et)/\hbar}$$

donde $\hbar \approx 1.05457 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ es la *constante de Planck reducida*, que por alguna misteriosa razón es más habitual en la literatura moderna que la *constante de Planck* original, $h = 2\pi\hbar$. Esta expresión resume dos fórmulas famosas: $E = h\nu$, introducida por M. Planck, y $p = h/\lambda$, introducida por L. de Broglie. Recordemos que en física ν y λ son las notaciones habituales para la frecuencia (el número de oscilaciones por unidad de tiempo) y la longitud de onda (el espacio que ocupa una oscilación). Por otro lado, x y t indican posición y espacio. Los números complejos en (1.1) no deben asustarnos, podemos interpretar que indican una *polarización* (un ángulo) de la onda o que son una manera cómoda de no estar distinguiendo todo el rato en senos y cosenos, gracias a la *fórmula de Euler*

$$(1.2) \quad e^{ix} = \cos x + i \operatorname{sen} x.$$

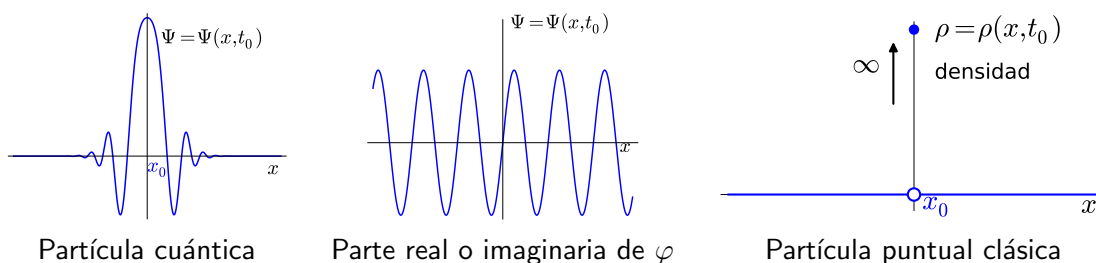
Aunque el significado de esta fórmula va más allá, uno puede entenderla como un convenio práctico: Si siempre me hago un lío con las reglas de adición $\cos(x \pm y) = \cos x \cos y \mp \operatorname{sen} x \operatorname{sen} y$, $\operatorname{sen}(x \pm y) = \operatorname{sen} x \cos y \pm \cos x \operatorname{sen} y$, me puedo olvidar de ellas aprendiendo sólo la fórmula de Euler y usando que $e^{i(x \pm y)} = e^{ix} e^{\pm iy}$.

Aunque (1.1) tenga casi 100 años, no por eso parece que a uno se le pueda ocurrir sentado en el sillón de su casa. ¿Por qué debemos aceptar las fórmulas de Planck y de Broglie? La respuesta fácil es que así se comportan la naturaleza y punto. Sin embargo esto tiene mucho de confundir la realidad con los modelos matemáticos y supuestamente en una ciencia deductiva estos modelos deben provenir de algún sitio.

Parte del origen de la física cuántica estuvo en el estudio de la interacción de las ondas electromagnéticas (por ejemplo la luz) con la materia. Curiosamente los experimentos sugerían que estas ondas se comportaban como colecciones de partículas primarias llamadas *fonones*. Dos fenómenos fundamentales en este sentido son el *efecto fotoeléctrico*, descubierto por H. Hertz en el siglo XIX y estudiado por A. Einstein en el XX y, su extensión, el *efecto Compton* introducido por A. Compton [SR05]. En pocas palabras lo que se observó es que cuando una onda electromagnética incidía sobre un electrón y cambiaba su energía, lo hacía proporcionalmente a la frecuencia, de ahí $E = h\nu$, que enlazaba con el estudio anterior de Planck sobre

la *radiación del cuerpo negro* [Mor10], además el cambio de frecuencia de la luz saliente es coherente con la conservación del momento lineal. Para conciliar la dinámica de las partículas y las ondas, de Broglie introdujo $p = \hbar/\lambda$, que de alguna forma generaliza lo que se observa en estos experimentos y que, como mencionaremos más adelante, estaba relacionado con los primeros modelos atómicos.

Siguiendo a nuestros primeros padres cuánticos, pensamos que una partícula material tiene asociada una *función de onda* $\Psi = \Psi(x, t)$. De Broglie diría que son *ondas de materia* (un nombre trasnochado). Idealmente una partícula clásica es puntual, está en un x concreto pero una onda no. La explicación de que hasta el siglo XX nadie pensase en las partículas como ondas, es que sus ondas están muy concentradas en la práctica. Por ejemplo, la onda de un electrón de un átomo de hidrógeno es bien notable en una esfera de radio, un poco convencional, $5.29 \cdot 10^{-11} m$, llamado *radio de Bohr*, lo que contrasta con el radio “clásico” de $2.8 \cdot 10^{-15} m$ asignado al electrón sin la visión cuántica.



Pero entonces las funciones de onda en las que estamos pensando, las de la primera figura, no tiene mucho ver con (1.1) o con su parte real o imaginaria (la segunda figura), que no están concentradas en absoluto.

Pues bien, un hecho matemático fantástico con multitud de aplicaciones en física e ingeniería, es que cualquier función se puede escribir como superposición de “tonos puros”, como suma de simples senos y cosenos. Éste es el tema principal del *análisis armónico*, también conocido como *análisis de Fourier*, ya que J. Fourier en su famosa memoria de 1822 sobre el calor [Fou88] fue uno de los matemáticos que más apoyó esta tesis. En nuestro caso, para cada tiempo t fijo las funciones de onda, concentradas o no, serán superposiciones de ondas (1.1) y para ver la evolución en tiempos posteriores, basta dejar el tiempo correr.

Cómo se calcula esta superposición y cómo se ajusta a las condiciones físicas, requiere conocer el análisis de Fourier y la ecuación de Schrödinger. Si tienes interés, te puedes pasar más tarde por §3.1 y §3.3. Pero no te asustes, sin saber nada de estos temas, simplemente con algo de mecánica y álgebra lineal, podrás entender con bastante profundidad en apartados posteriores cómo funcionan las cosas en un ejemplo concreto.

1.2. Un ejemplo con el que jugar

Nuestro objetivo es deducir (un matemático sólo aceptaría “intuir”) la forma de la posible función de onda Ψ de una partícula de masa m sobre la que no actúa ninguna fuerza y que está confinada en el intervalo $x \in [0, 1]$ con paredes infranqueables en sus extremos.

Por si sabes que “infranqueable” cuántico no es lo mismo que clásico, aquí es infranqueable del todo. El término técnico es *pozo de potencial infinito*. Y sí, tienes razón, lo de “ninguna fuerza” no se aplica a las paredes, que tienen que ejercer alguna para que no las traspasen.

En términos clásicos, una partícula de este tipo tendrá velocidad constante (no hay fuerza) y al chocar contra la pared rebotará (la conservación de la energía sólo permite un cambio de sentido).



En primer lugar, si la partícula no sale de $[0, 1]$, es natural imponer que $\Psi(x, t) = 0$ para todo tiempo si $x \notin [0, 1]$. También, al decir que Ψ es una onda, esperamos que Ψ tenga cierta regularidad. En general uno piensa en que sea infinitamente derivable pero este ejemplo es una idealización (por la infranqueabilidad de las paredes) y sólo apelaremos a la continuidad (hay más detalles en §3.3) para postular

$$(1.3) \quad \Psi(0, t) = \Psi(1, t) = 0.$$

Cuando no hay fuerzas (debidas a un potencial), toda la energía es cinética, $E = \frac{1}{2}mv^2$, y con $p = mv$ se tiene $E = p^2/2m$. Esto significa que para cada energía fijada hay dos posibles momentos $p_E = \sqrt{2mE}$ y $-p_E$, ir a la derecha o a la izquierda. Consideramos primero superposiciones de ondas (1.1) de la misma energía, esto es,

$$(1.4) \quad Ae^{i(p_E x - Et)/\hbar} + Be^{i(-p_E x - Et)/\hbar} \quad \text{con} \quad A, B \in \mathbb{C}.$$

La función de onda Ψ que buscamos, será suma de muchas ondas de este tipo. Una forma fácil de que tal Ψ cumpla (1.3) es que cada una de estas ondas lo haga (y se puede probar matemáticamente que esto cubre todas las posibilidades, pero no es fácil §3.1), lo que conduce al sistema $A + B = 0$, $Ae^{ip_E} + Be^{-ip_E} = 0$. Para que tenga solución no trivial, el determinante $e^{-ip_E} - e^{ip_E} = -2i \sin p_E$ debe anularse. Con ello los momentos p_E y por tanto las energías, sólo pueden tomar un conjunto discreto de valores:

$$(1.5) \quad p_n = n\pi\hbar \quad \text{y} \quad E_n = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2m} \quad \text{con} \quad n \in \mathbb{N}.$$

El sistema nos dice además que en (1.4) podemos tomar $B = -A$ con A arbitrario. Elijamos $A = 1/\sqrt{2}$ sólo para que cierto cálculo posterior quede bonito pero nada impide escoger otro

valor. Con todo ello, al superponer ondas (1.4) llegamos a la forma genérica de las posibles funciones de onda, restringidas a $x \in [0, 1]$, de la partícula considerada:

$$(1.6) \quad \Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x, t) \quad \text{donde} \quad \Psi_n(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} (e^{i(p_n x - E_n t)/\hbar} - e^{i(-p_n x - E_n t)/\hbar})$$

y los coeficientes c_n son números complejos arbitrarios que se ajustan dependiendo de las condiciones iniciales, como veremos en el siguiente apartado. Por cierto, no te preocupes si las unidades no te cuadran en (1.5) y (1.6), porque hemos impuesto que la partícula está confinada en longitud 1 sin especificar que medimos en metros.

Cada Ψ_n tiene una energía E_n bien definida. Lo curioso, frente al mundo clásico, es que las energías posibles (al igual que los momentos) recorren un conjunto discreto de valores: están *cuantizadas*. De ahí proviene el nombre de mecánica *cuántica*, que históricamente nació para explicar fenómenos en los que parecía que las transiciones de un estado a otro se llevaban a cabo de manera discontinua con variaciones primitivas llamadas *cuantos* (el término ha caído en desuso). Hay algo casi aritmético en ello, por ejemplo, según (1.5), $3\pi^2\hbar^2/2m$ no es un valor lícito de la energía porque $\sqrt{3} \notin \mathbb{N}$.

¿Por qué no vemos la cuantización en nuestra experiencia mecánica diaria? Porque \hbar es muy, muy, pero que muy pequeño, entonces los múltiplos enteros de \hbar son casi indistinguibles de todos los números reales. En el mundo macroscópico (¿una pelota confinada a una pista de pádel?) las energías “importantes” no son infinitesimales con lo cual esperamos que n sea del orden de \hbar^{-1} y es imposible notar o medir experimentalmente una variación de 1 en un número de 34 cifras.

1.3. Analizando el ejemplo y soñando con el álgebra lineal

La fórmula (1.6) establece que, para el ejemplo del apartado anterior, Ψ es una combinación lineal de las Ψ_n . Esto sugiere suponer que las funciones de onda posibles correspondientes a la situación física descrita, forman un espacio vectorial generado por $\{\Psi_n\}_{n=1}^{\infty}$. Tu profesor de álgebra lineal fruncirá el ceño y no te dejará ir por ese camino pero lo más probable es que, a no ser que entiendas la observación siguiente, a ti no te importe.

▼ La definición de espacio vectorial, ya sea de dimensión finita o infinita, conlleva que las combinaciones lineales sean siempre finitas, por tanto (1.6) no está en el negociado del álgebra lineal, sino en una extensión suya mucho más compleja que se menciona en §3.2. En pocas palabras, el álgebra lineal en dimensión infinita no es la que corresponde a sistemas lineales infinitos.

Según la notación matemática común, los vectores llevan una flecha y no es antinatural escribir $\vec{e}_n = \Psi_n$. Sin embargo, cuando los vectores son funciones de onda, en física está muy extendido escribir $|\Psi_n\rangle$, una notación introducida por P.A.M. Dirac [BM08]. Ni \vec{e}_n ni $|\Psi_n\rangle$ indican nada distinto de Ψ_n , sólo hacen hincapié en su naturaleza vectorial.

Enseguida veremos que $|\Psi_n\rangle$ son linealmente independientes (sobre \mathbb{C}) y por tanto una base del subespacio que generan. Rememorando las clases de matemáticas, reservemos la notación \vec{e}_n para expresiones con coordenadas. Escribiendo estos vectores en su propia base, $\vec{e}_1 = (1, 0, 0, \dots)$, $\vec{e}_2 = (0, 1, 0, \dots)$, etc. De esta forma, si el profesor de álgebra lineal antes mencionado no anda cerca, (1.6) nos dice que $|\Psi\rangle$, el vector asignado a Ψ , es el vector infinito (c_1, c_2, c_3, \dots) . Recordemos que el producto escalar de dos vectores en \mathbb{C}^N , digamos $\vec{a} = (a_1, \dots, a_N)$ y $\vec{b} = (b_1, \dots, b_N)$, se define como $\vec{a} \cdot \vec{b} = \bar{a}_1 b_1 + \dots + \bar{a}_N b_N$ (la “boina” significa el conjugado complejo, para que $\vec{a} \cdot \vec{a} \geq 0$ incluso si \vec{a} no está en \mathbb{R}^N). La definición se extiende a $N = \infty$ siempre y cuando no haya problemas de convergencia. Por ejemplo, con la expresión en coordenadas asignadas a \vec{e}_n ,

$$(1.7) \quad \vec{e}_n \cdot \vec{e}_m = 0 \quad \text{si} \quad n \neq m \quad \text{y} \quad \vec{e}_n \cdot \vec{e}_n = 1.$$

Sí, esto es una tontería, simplemente multiplicar y sumar unos y ceros, pero ahora ocurre una cosa milagrosa: este producto escalar pedestre coincide en nuestro ejemplo con el producto escalar de funciones. ¿Y qué es el producto escalar de funciones? Una función $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{C}$ se puede considerar como un montón (infinito) de valores, algo así como el límite cuando $N \rightarrow \infty$ de $(f(\frac{1}{N}), \dots, f(\frac{N}{N}))$. Esto sugiere que el producto escalar usual de funciones sea el límite de $\sum_{k=1}^N \bar{f}(\frac{k}{N})g(\frac{k}{N})$. Dividiendo por N para que converja (¿cambiar de escala?), el resultado tiende a la integral $\int_0^1 \bar{f}g$. En el contexto de la física cuántica esto se suele denotar con $\langle f|g \rangle$. A fin de cuentas es el producto escalar de siempre cambiando sumas por integrales. Por resumir, los productos escalares naturales para vectores con coordenadas y para vectores que son funciones, vienen dados respectivamente por

$$(1.8) \quad \vec{a} \cdot \vec{b} = \sum \bar{a}_n b_n \quad \text{y} \quad \langle f|g \rangle = \int \bar{f}g.$$

En nuestro ejemplo, usando $\Psi_n = i\sqrt{2} \text{sen}(\pi n x) e^{-iE_n t/\hbar}$, por la definición (1.6) y (1.2), se tiene que para cualquier t ,

$$(1.9) \quad \langle \Psi_n | \Psi_m \rangle = 0 \quad \text{si} \quad n \neq m \quad \text{y} \quad \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle = 1.$$

El coeficiente raro $1/\sqrt{2}$, se escogió para que aquí salga un 1 y sean *ortonormales* en vez de sólo *ortogonales*. En cualquier caso, de ello se deduce que son linealmente independientes. Comparando (1.7) y (1.9), se tiene que se pueden hacer productos escalares con coordenadas o con integrales. Aplicando esto a la función de onda $|\Psi\rangle = (c_1, c_2, c_3, \dots)$ de (1.6), se deduce

$$(1.10) \quad \int_0^1 |\Psi|^2 dx = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 \quad \text{para cualquier } t.$$

En particular, que la integral no depende del tiempo porque los c_n son constantes. Más adelante daremos uso a esta inesperada ley de conservación.

Si multiplicamos ahora \vec{e}_n por $|\Psi\rangle = (c_1, c_2, c_3, \dots)$ se obtiene c_n y la igualdad de productos escalares con coordenadas e integrales lleva a $c_n = \langle \Psi_n | \Psi \rangle$. Recordando de nuevo que los c_n son constantes, podemos fijar $t = 0$ para hacer el cálculo. Con $\Psi_n(x, 0) = i\sqrt{2} \sin(\pi nx)$, se llega a una forma más concreta de (1.6):

$$(1.11) \quad \Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n(x, t) \quad \text{con} \quad c_n = -i\sqrt{2} \int_0^1 \psi_0(s) \sin(\pi nx) dx \quad \text{y} \quad \psi_0(x) = \Psi(x, 0).$$

Es más concreta, porque dada la onda inicial ψ_0 , somos capaces de hallar la función de onda $\Psi(x, t)$ en cualquier tiempo. En (1.6) los coeficientes c_n eran constantes indeterminadas y ahora vemos que están completamente determinados por lo que ocurre en $t = 0$.

1.4. Un ejemplo del ejemplo

En el mundo clásico, a uno le daban el espacio inicial y la velocidad inicial y sacaba la ecuación de movimiento en cualquier tiempo resolviendo una *ecuación diferencial* (algo que involucra derivadas). Ahora le dan la función de onda inicial y calcula la función de onda en cualquier tiempo mediante (1.11) haciendo unas integrales y series raras. Es el precio que hay que pagar por entender fenómenos muy finos. ¿Pero qué relación hay entre ambos mundos? ¿Qué funciones de onda iniciales corresponden a condiciones clásicas iniciales?

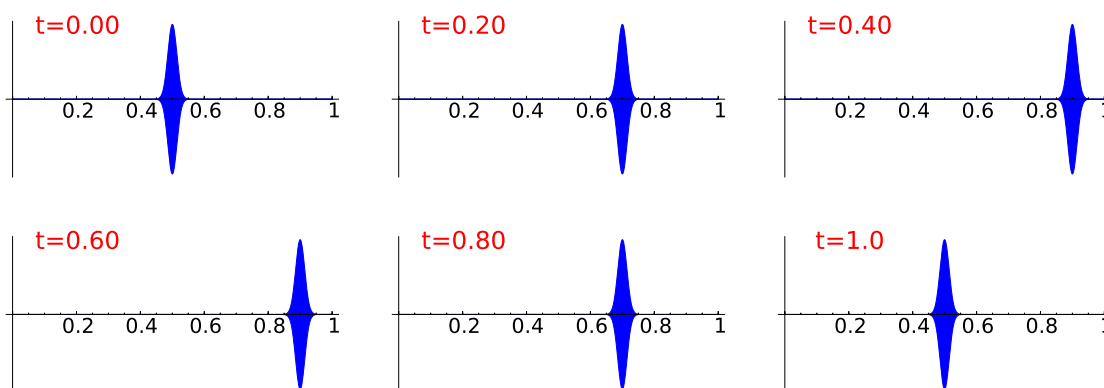
Si uno pusiera como función de onda inicial ψ_0 una función picuda suave soportada en $[-0.49, 0.51]$, intentando que represente una partícula clásica en $x = 1/2$, después de aplicar (1.11) se llevaría un chasco, porque $\Psi(x, t) \approx \psi_0(x)$ para tiempos razonables ¡no hay movimiento! Para llegar a esta conclusión sin hacer ninguna cuenta concreta, hay que notar que en cuanto n crezca, la integral en (1.11) se va a empezar a hacer pequeña porque el integrando oscila mucho (una manera de verlo es integrar por partes). Entonces sólo los c_n con n pequeño serán relevantes, pero entonces $e^{-iE_n t/\hbar}$ no habrá oscilado hasta que t sea del orden de $m\hbar^{-1}$. Tu profesor de física te dirá que eso es normal porque tales ψ_0 corresponden a partículas en reposo.

Con este comecón, vamos a intentar buscar una función de onda que pudiera corresponder a una partícula de masa 1 que parte de $x = 1/2$ con velocidad 1. Pensemos físicamente: si el momento clásico es $p = mv = 1$, hay que primar en (1.6) a los p_n de (1.5) con $n\pi$ parecido a \hbar^{-1} . Escojamos con este fin $c_n = \exp(-((n\pi - \hbar^{-1})/100)^2)$. Ni la exponencial ni el 100 son críticos, uno puede pensar en general en $\phi((n\pi - \hbar^{-1})/K)$ donde ϕ decae fuera del origen, en breve entraremos en esta generalidad. Al sustituir en (1.6) y “dibujar” el resultado (no exactamente, oscila demasiado), se ve un bulto estrecho muy oscilatorio que se mueve a la derecha partiendo de la pared $x = 0$. Hemos tenido suerte. Como queríamos que comenzase en $x = 1/2$, cambiamos t por $t + 1/2$ y entonces la función de onda que consideramos es el

formulón

$$(1.12) \quad \Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(n\pi - \hbar^{-1})^2/10^4} \Psi_n(x, t + 1/2) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(n\pi - \hbar^{-1})^2/10^4 - in^2\pi^2\hbar/4} \Psi_n(x, t).$$

Los siguientes gráficos muestran que las cosas cuadran ya que la función de onda rebota en la pared y vuelve al punto de partida en un segundo, como cabe esperar con una partícula clásica. El dibujo es similar para las partes real e imaginaria de Ψ . Las ondas se representan rellenas porque tienen una “frecuencia interna” \hbar^{-1} . ¡Prueba a dibujar $\cos(x/\hbar)$ en $[0, 1]$ con un ordenador!



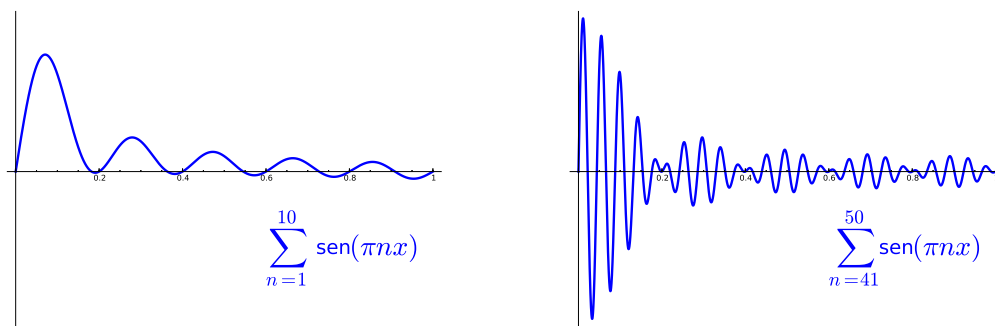
Si quieres hacer experimentos por tu cuenta con (1.12) en el ordenador, es mejor que tomes valores de \hbar como 10^{-3} ó 10^{-4} , al igual que se ha hecho aquí, suponiendo un cambio de unidades. Será una buena aproximación siempre que \hbar^{-1} sea bastante mayor que el 100 que hemos elegido arbitrariamente. Físicamente, las energías y momentos al cambiar \hbar por $M\hbar$ son las mismas que al cambiar la longitud inicial 1 por $1/M$. Por tanto, escoger valores mayores de \hbar actúa como una lupa que nos aleja de la escala clásica y hace más visibles los efectos cuánticos.

Para que todo esto no parezca una casualidad, vamos ahora a generalizar el ejemplo del ejemplo, usando de nuevo argumentos físico-matemáticos.

Notemos que, de acuerdo con su definición (1.6), cada Ψ_n tiene momento p_n y $-p_n$. Esto significa que al pasar el tiempo se descompone en dos partes (¿partículas?) una que va a la derecha y otra a la izquierda. Supongamos que para algunos c_n conseguimos que Ψ sea un bulto cerca de la pared izquierda $x = 0$, entonces tras el rebote de las ondas (el previsto por la mecánica clásica) las dos partes viajarán juntas y no veremos ninguna separación.

Para conseguir este bulto, antes no hicimos nada especial. Esencialmente tomamos c_n que se anulase salvo en cierto intervalo que tenía que ver con el momento, no con la posición. Estudiemos la situación matemáticamente. Cuando sumamos $\sin(\pi n x)$ para $1 \leq n \leq N$ y para $M+1 \leq n \leq M+N$ los resultados dan un abultamiento alrededor del origen de tamaño comparable a N^{-1} y parece que M simplemente contribuye a crear oscilaciones internas que

no alteran significativamente esta propiedad. Esto no es tan misterioso como parece si tenemos en cuenta la fórmula de Euler (1.2). Con ella hasta podemos dar una fórmula exacta para cualquier suma $\sum_{n=A}^B \text{sen}(\pi n x)$, ya que $\text{sen}(\pi n x) = \text{Im}(e^{i\pi n x})$ y para sumas de exponenciales se puede emplear la fórmula de la suma de una progresión geométrica.



Una vez que sabemos que hay interferencias constructivas en un pequeño intervalo y comparativamente destructivas en el resto, es de esperar que este comportamiento no se altere al multiplicar por una función de n con variaciones (derivadas) pequeñas. De hecho, matemáticamente es de esperar que tal propiedad se exagere cuando la función se anula o es pequeña en los límites de sumación. El lector interesado o incrédulo puede insertar dentro de los sumatorios de las figuras anteriores los factores $f((n-5)/10)$ y $f((n-45)/10)$ con $f(x) = (1/4 - x^2)^2$, respectivamente y dibujar el resultado.

▼ Hay fórmulas de sumación con las de *Euler-Maclaurin* o la de *Poisson* que dan explicaciones precisas de ello. Por ejemplo, un resultado en este sentido es que si f se anula fuera de $[0, 1]$ y tiene K derivadas continuas, entonces $|\sum f(n/N) \text{sen}(\pi n x)| \leq CN(1 + Nx)^{-K}$ para $x \in [0, 1]$ y cierta C que depende de f y K .

Si queremos que la velocidad sea $v_0 > 0$, los momentos $p_n \approx mv_0$ deberían ser especialmente relevantes, lo que significa que $n\pi\hbar$ no difiere de mv_0 muchos múltiplos de \hbar . Esto lleva a considerar coeficientes de la forma $\phi((n\pi\hbar - mv_0)/K\hbar)$ con ϕ alguna función suave que decae fuera del origen y K una constante. Si, como antes, cambiamos t por $t + t_0$, comenzaremos en $x_0 = v_0 t_0$. En definitiva, un modelo cuántico para partículas con velocidad v_0 (hacia la derecha) y posición inicial x_0 es

$$(1.13) \quad \Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \phi\left(\frac{n\pi\hbar - mv_0}{K\hbar}\right) e^{-in^2\pi^2\hbar x_0/2mv_0} \Psi_n(x, t).$$

Hay, por tanto, infinitas posibilidades para Ψ , lo que en principio indica una mayor riqueza del mundo cuántico frente al clásico, aunque la triste realidad es que la siguiente sección pone limitaciones serias acerca de lo que de verdad podemos detectar.

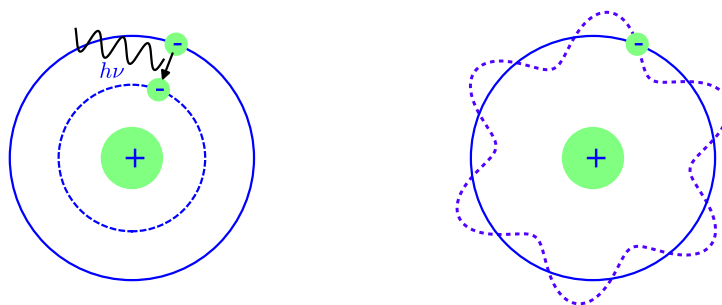
La función ϕ indica la forma de la función de onda y, como hemos mencionado antes al estudiar sumas de senos, K^{-1} indica el orden de la “anchura” de la onda en espacio (porque ϕ es significativa en un rango del orden de K valores de n). Pero un vistazo a (1.13) nos dice que $K\hbar$ también es el orden del rango de momentos que participan significativamente en (1.13). Si tomásemos K gigantesco, intentando así que una partícula subatómica estuviera muy localizada, como una clásica, tendría un rango de momentos también gigantesco y esta indefinición del momento la aleja de la interpretación clásica. En definitiva, en (1.13), el producto de la “anchura en espacio” y la “anchura en momento” (quiera lo que quiera decir esto) es comparable a \hbar . Ésta es una forma particular del *principio de incertidumbre*. De nuevo, el valor minúsculo de \hbar hace que sea imposible percibir anchuras no nulas y sus limitaciones en el mundo macroscópico.

¿Es lógico que haya muchas energías y momentos y posiciones no definidas? Sí, cuando postulamos la naturaleza ondulatoria. Si pensamos en una ola, nadie se escandaliza porque no tenga una posición bien definida y que cada una de las partículas que la componen tengan distintos momentos y energías.

Si te estás preguntando acerca de qué significa la función de onda, o qué es lo que se transmite en la onda de una partícula, enhorabuena, pero tendrás que ser un poco paciente.

1.5. Experimentos con átomos

Ya hemos mencionado que en gran medida el origen de la física cuántica estuvo en experimentos relacionados con la interacción de ondas electromagnéticas y materia. En este sentido, se conocía desde el siglo XIX que la materia emite o absorbe sólo ciertas frecuencias específicas que caracterizan los elementos que la componen. Este fenómeno es de importancia capital en varias áreas pues permite saber de qué están hechas las cosas y las técnicas para estudiarlo se recogen bajo el nombre genérico de *espectroscopía*.



Después del trabajo experimental de E. Rutherford en 1911, se tenía una idea del átomo como un núcleo con electrones orbitando a su alrededor. El problema de este modelo es que se sabía que una partícula cargada irradia energía al girar en torno a un punto (emite ondas

electromagnéticas) y por tanto los electrones deberían caer hacia el núcleo en una fracción de segundo infinitesimal. Para resolver este problema, Bohr “decretó” en 1913 que los electrones se movían siempre en órbitas de radio r tales que mvr era un múltiplo entero positivo de \hbar . Un salto de una órbita a otra implica emisión o absorción de energía y esta ley explicaba muy bien los resultados de la espectroscopía del hidrógeno, aunque más bien, fueron los datos experimentales de la espectroscopía los que explicaban cómo se le ocurrió esta ley arbitraria a Bohr, pero en esa ambigüedad se mueve siempre la física. De paso, implicaba que los electrones no caían en el núcleo.

A propósito, las órbitas de Bohr son las que permiten pegar sobre ellas ondas de la longitud de onda propuesta por de Broglie, con un número entero de oscilaciones y ésta fue una motivación para sus “ondas de materia”. Con sus propias palabras: “La aparición, en las leyes del movimiento cuantificado de los electrones en los átomos, de números enteros me parecía que indicaba la existencia, para estos movimientos, de interferencias análogas a las que se encuentran en todas las ramas de la teoría de las ondas, en las que intervienen de manera natural números enteros” [SR05, p.401].

El problema era que con análisis espectroscópicos bajo campos magnéticos (*efecto Zeeman*) y eléctricos (*efecto Stark*) y de elementos más complicados, las cosas no admitían explicaciones tan sencillas. Extendiendo el modelo de Bohr, A. Sommerfeld introdujo nuevos números enteros que relacionaba con la posición y la forma de la órbita, permitiendo que fuera elíptica. Con ellos explicaba de manera bastante fiel el desdoblamiento de las *líneas espectrales* (las líneas que en espectroscopía indican las frecuencias emitidas y absorbidas) que se produce en el efecto Zeeman.

La visión actual de estos temas, desde el trabajo de Schrödinger, es que, con unos cálculos muy complejos (cf. §3.3) se prueba que las funciones de onda del electrón ligado al átomo de hidrógeno (sin tener en cuenta el espín) son de la forma

$$(1.14) \quad \Psi(\vec{x}, t) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^l c_{nlm} \Psi_{nlm}, \quad \text{donde} \quad \Psi_{nlm} = r^l e^{im\phi - r/r_0} P_{lm}(\cos\theta) Q_{ln}(r/r_0) e^{-iE_n t/\hbar}.$$

Después de tomar aliento para recuperarnos del susto, digamos que (r, θ, ϕ) son las coordenadas esféricas de \vec{x} y es natural, en comparación con (1.6), que haya una suma triple porque el problema es tridimensional. Respecto a los elementos que aparecen aquí, los c_{nlm} vuelven a ser constantes complejas arbitrarias y

$$(1.15) \quad r_0 = \frac{\hbar^2}{Zm_e e^2}, \quad E_n = -\frac{Z^2 m_e e^4}{2\hbar^2 n^2}$$

donde las constantes físicas son $m_e = 9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$, la masa del electrón; $e = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$, la carga del electrón (pero en Ψ_{nlm} , es el número e); Z el número de protones en el núcleo,

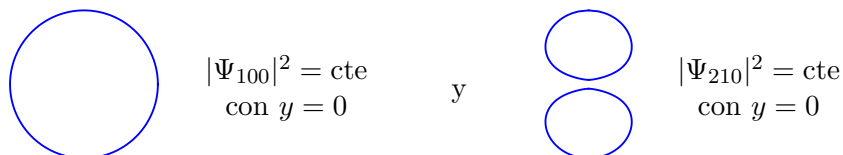
esto es, $Z = 1$ para el hidrógeno pero la fórmula es válida para iones con Z mayor y un solo electrón. Finalmente, P_{lm} y Q_{ln} son ciertas familias de polinomios.

El producto $e^{im\phi} P_{lm}(\cos\theta)$ en (1.14) son los *armónicos esféricos* $Y_{lm}(\theta, \phi)$ que aparecen en otros problemas de la física matemática, de este modo P_{lm} son los *polinomios asociados de Legendre*. Los Q_{ln} tienen que ver con los *polinomios de Laguerre*. La constante r_0 es el radio de Bohr, que ya mencionamos antes, $r_0 = 5.29 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ para $Z = 1$. Como los sumandos de (1.14) decaen exponencialmente cuando r es mucho más grande que r_0 , da una suerte de “radio medio” del átomo.

Para que esto parezca un poco más tangible, dos ejemplos explícitos con energías E_1 y E_2 , son:

$$(1.16) \quad \Psi_{100} = (\pi r_0^3)^{-1/2} e^{-r/r_0 - iE_1 t/\hbar} \quad \text{y} \quad \Psi_{210} = (32\pi r_0^5)^{-1/2} r e^{-r/2r_0 - iE_2 t/\hbar} \cos\theta.$$

Las constantes raras son de nuevo para asegurar la normalización. Con la terminología habitual, corresponden a los *orbitales atómicos* denominados $1s$ y $2p$, y seguramente has visto algún dibujo de superficies de nivel del segundo, para el primero son esferas. En ambos casos son superficies de revolución alrededor del eje Z , pues no dependen de ϕ . Sus intersecciones con el plano XZ tienen el aspecto:



En general, las letras s , p , d y f que se utilizan en la denominación de los orbitales más comunes corresponden a $l = 0, 1, 2$ y 3 en (1.14). Los nombres vienen de palabras en inglés relacionadas con la espectroscopia (*sharp*, *principal*, *diffuse* y *fundamental* o *fine*)

La energía E_n en (1.15) sólo depende de n , por ello el modelo de Bohr funcionaba muy bien con un solo entero. Los números de Sommerfeld, estaban asociados indirectamente a los índices de sumación en (1.14) aunque su interpretación física era incorrecta.

La única función Ψ_{nlm} que tiene la energía mínima E_1 es Ψ_{100} , se dice que es el *estado fundamental* y corresponde a la configuración más estable. Sin embargo Ψ_{200} , Ψ_{21-1} , Ψ_{210} y Ψ_{211} tienen todas energía E_2 . En general, hay n^2 funciones básicas con energía E_n (basta contar sumando una progresión aritmética). Al aplicar campos magnéticos o eléctricos la fórmula para E_n se modifica y pasa a depender también de l y m , con ello las líneas espectrales se desdoblan [GP78, §1.9].

Como colofón, mencionaremos que éste no es el fin de la historia para el átomo de hidrógeno (y mucho menos para átomos más complicados). Aparte del efecto Zeeman anómalo que mencionaremos más adelante y que desconcertó durante mucho tiempo a los fundadores de la

física cuántica, con observaciones muy precisas se constataba que las líneas espectrales estaban compuestas por otras más finas muy próximas. Es decir, que la fórmula para la cuantización de la energía (1.15) no es completamente correcta y hay cuantizaciones más finas. Una de las desviaciones del modelo es lo que se llama *estructura hiperfina* y se deduce al estudiar el acoplamiento magnético entre el electrón y el protón (ambos se comportan como imanes). Posiblemente la última corrección en ser entendida es una infinitesimal descubierta en 1947, llamada *efecto Lamb* (*Lamb shift*). Su explicación requiere de manera esencial la participación de una compleja teoría cuántica relativista que, hasta donde conocemos hoy, es responsable de todos los fenómenos subatómicos.

1.6. Lo que no te vas a creer de la física cuántica

Hasta aquí, las cosas no han sido conceptualmente tan extrañas, sólo matemáticamente difíciles. Ya antes habíamos oído hablar de ondas y de la disputa desde tiempo inmemoriales de si la luz era onda o partículas. Ahora llevamos la contraria radicalmente al gran I. Newton y decimos que todo son ondas, C. Huygens saltaría de alegría. Los problemas conceptuales comienzan cuando uno intenta dar un significado a las funciones de onda y, sobre todo, de las mediciones físicas. Todo empieza a ser rarísimo.

Lo que vamos a ver a continuación es la interpretación oficial de la mecánica cuántica que ha perdurado desde que se enunciara en 1927 hasta nuestro días. Es la llamada *interpretación de Copenhague*, liderada por N. Bohr, que trabajó en ella en Copenhague, su ciudad natal. También contribuyeron de manera decisiva M. Born y especialmente W. Heisenberg. Es algo muy extraño y si te parece increíble, quizá te alegre saber que Einstein nunca creyó en esta interpretación. Esto es bastante notable, teniendo en cuenta que murió en 1955 cuando ya estaba muy asentada, había bastantes experimentos y nuevas direcciones apasionantes de la física cuántica que continuaban por esta senda.

Si pensamos en una ola o en una onda de sonido, podemos detectarla en todos y cada uno de los puntos en los que tiene una influencia significativa. En unos puntos notaremos “más onda” y en otros menos. En diferentes contextos de la física de las ondas, la *intensidad* viene dada por el cuadrado de la amplitud, es decir, que de alguna forma una onda expansiva del doble de amplitud nos hace cuatro veces más daño. De este modo, cuando E. Schrödinger introdujo las funciones de onda para electrones y las ecuaciones que las regulan §3.3, pensó que $|\Psi|^2$ estaba relacionada con la densidad de carga. Además una ley de conservación como (1.10) se interpretaría como que la carga total se conserva a lo largo del tiempo.

Con esta idea, uno esperaría que construyendo instrumentos muy precisos pudiéramos detectar la función de onda de un electrón. Sin embargo la extraña realidad es que esta detección siempre está radicalmente cuantizada. O se detecta un electrón o no se detecta. Un valor de la intensidad $|\Psi|^2$ de la función de onda doble en una región que en otra, no significa que haya el “doble de la partícula” en la primera región sino que repitiendo el experimento muchas veces,

será el doble de frecuente detectarla en la primera región. En definitiva, se da la paradoja de que para explicar ciertos fenómenos, la incipiente mecánica cuántica ondulatoria consideró que las partículas son ondas pero al detectar esas ondas, se obtienen partículas. Es la llamada *dualidad onda-corpúsculo*.

Como seguro que conocerás por la literatura de divulgación, por las películas de ciencia ficción y hasta por los argumentos de los parapsicólogos, se da una interpretación probabilista de la función de onda. Fijado un tiempo $t = t_0$, Born postuló en 1926 que $|\Psi(x, t_0)|^2$ es proporcional a la probabilidad de encontrar la partícula en x .

▼ En términos más precisos y matemáticos, lo que significa esto es que la función de densidad de esta probabilidad viene dada por

$$(1.17) \quad f(x) = \frac{|\Psi(x, t_0)|^2}{\|\Psi\|_2^2} \quad \text{con} \quad \|\Psi\|_2^2 = \int |\Psi(x, t_0)|^2 dx.$$

Si intentamos seguir en la aséptica seguridad matemática, nos puede dar reparo que la integral que define $\|\Psi\|_2^2$ no converja. A fin de cuentas es lo que ocurre con φ en (1.1). Pero estos problemas no asustarán a ningún físico, simplemente, si lo necesita, supondrá que trabaja en una región acotada. Habitualmente se *normalizan* las funciones de onda, es decir se multiplican por alguna constante para que $\|\Psi\|_2 = 1$ y de esta manera la función de densidad es exactamente igual a la intensidad $|\Psi|^2$ de la función de onda.

La interpretación probabilista es satisfactoria para explicar un problema del ejemplo de §1.1 (y de cualquier otro similar) que hemos ocultado abusando de la confianza del lector. Resulta que si esperamos muchísimo tiempo, la onda representada en los dibujos, se dispersa: se va volviendo más ancha, ocupando todo el intervalo. Es decir, que la partícula representada por (1.13), acaba pareciéndose a una onda pura que está en todos los sitios a la vez. Aunque suena increíble, no lo es tanto en la práctica, lo que significa es que cuando pasa mucho tiempo es muy difícil hacer ninguna predicción y todas las posiciones son equiprobables.

⊖ Aunque filosóficamente sea un cambio mayor la imposibilidad intrínseca de hacer predicciones exactas que implica la interpretación probabilista, habitualmente se exagera mucho. Antes de la física cuántica tampoco los físicos más brillantes sabían si al tirar una moneda iba a salir cara o cruz, ni podían predecir dónde estarían los planetas dentro de un millón de años, incluso suponiendo el Sistema Solar aislado.

Lo esencial e increíble de la interpretación de Copenhague es el *colapso de la función de onda* que en cierto modo generaliza la interpretación probabilista de Born a cualquier medición. Es muy importante para tener una idea clara de la física cuántica pero, por su dificultad, queda a menudo fuera del ámbito de la divulgación. Para entenderla, volvamos al ejemplo (1.6) e intentemos dar un significado a qué es medir la energía. Vamos a suponer que Ψ está *normalizada*, es decir, que $\int_0^1 |\Psi|^2 dx = 1$ lo cual es gratis porque los valores de Ψ en diferentes puntos tienen un valor relativo y por tanto multiplicar Ψ por una constante no cambia su significado físico. La fórmula (1.6) expresa Ψ como superposición de ondas $c_n \Psi_n$,

cada una de ellas con una energía distinta $E_n = (n\pi\hbar)^2/2m$ y una “intensidad” $|c_n|^2$. Además las Ψ_n son ortonormales (1.9), en particular $\int_0^1 \bar{\Psi}_n \Psi_m = 0$ si $n \neq m$, lo que puede interpretarse como que son *independientes*, Ψ_m y Ψ_n no pueden parecerse mucho porque su integral es nula.

Supongamos que tenemos un instrumento suficientemente preciso como para distinguir las energías E_n entre sí. La interpretación de Copenhague propugna que cuando medimos la energía con este instrumento obtendremos la energía de un solo sumando $c_n \Psi_n$ con probabilidad dada por su intensidad $|c_n|^2$ y que además la función de onda original Ψ colapsará (se convertirá por arte de magia) en $c_n \Psi_n$ inmediatamente tras la medición. Es decir, en (1.6) el colapso de la función de onda consiste en la transformación

$$(1.18) \quad \Psi \xrightarrow{\text{medición}} c_n \Psi_n \quad \text{con probabilidad } |c_n|^2 = |\langle \Psi_n | \Psi \rangle|^2.$$

Por cierto, por lo dicho anteriormente, da igual en (1.18) decir que el colapso es a la función de onda normalizada Ψ_n . Con ello $|\langle B | A \rangle|^2$ representa aquí y en otras situaciones la *probabilidad de transición* de pasar de A a B .

Ahora se ve la importancia de la ley de conservación (1.10). Es lo que asegura que la probabilidad total sea uno (recordemos que hemos normalizado Ψ). Es decir, que más que la conservación de la carga que supuso inicialmente Schrödinger, esta ley es la conservación de la probabilidad.

A menudo se presenta este colapso como consecuencia del principio de incertidumbre: la detección de la energía con el hipotético instrumento que hace la medición se producirá interactuando con otra partícula o “mirando” con un fotón, cuyo momento y posición no están estrictamente determinados, por lo cual el resultado será impredecible [FLS65].

❌ Identificar total o parcialmente la interpretación de Copenhague con alguna forma del principio de incertidumbre, puede reducirse a una cuestión de terminología a base de cambiar las definiciones. Sin embargo no parece muy aconsejable porque desvirtúa el significado habitual, y relativamente sencillo, que tiene el principio de incertidumbre para una señal cualquiera sin relación a fenómenos cuánticos. Tampoco deja claro por qué el uso de partículas medidoras que perturben poco (de baja energía) no resolvería el problema.

¿Qué ocurriría al medir con un instrumento que no tenga resolución para distinguir todas las energías? El colapso se produce entonces sobre lo que conseguimos medir. Por ejemplo, si tenemos un aparato binario que es capaz de medir si la energía es menor o igual que E_{n_0} o mayor que esta cantidad, sin dar ninguna otra información, entonces el colapso que se producirá es

$$(1.19) \quad \Psi \xrightarrow{\text{medición}} \begin{cases} \sum_{n \leq n_0} c_n \Psi_n & \text{con probabilidad } \sum_{n \leq n_0} |c_n|^2 \\ \sum_{n > n_0} c_n \Psi_n & \text{con probabilidad } \sum_{n > n_0} |c_n|^2 \end{cases}$$

En general, debemos hacer la proyección, en el sentido del álgebra lineal, del vector correspondiente a la función de onda sobre los subespacios detectables y cada proyección $P\Psi$ tendrá probabilidad $|\langle \Psi_n | \Psi \rangle|^2 = \int_0^1 |P\Psi|^2 dx$.

¿Cómo dar sentido a la medición de otras magnitudes físicas como la posición, el momento lineal o el momento angular? Lo veremos en un próximo apartado al formalizar estas ideas matemáticamente pero avanzamos que cada una de ellas tiene asociada una superposición de ondas como la de (1.6) en la que las ondas básicas tienen esa magnitud bien definida y entonces el colapso se produce de la misma manera que en el caso de la energía.

1.7. ¿Filosofía cuántica?

En términos prácticos, hasta el límite de nuestros experimentos, la física cuántica funciona perfectamente y se han inventado “cacharros” muy útiles, como el *microscopio de efecto túnel*, que funcionan gracias a ella. Además nos da una explicación a veces cualitativa y a veces bastante precisa sobre propiedades químicas y sobre otras físicas que están en la base de la electrónica. Por tanto las dudas que puedan plantearse son en cierto modo de índole filosófica. Eso no impide quejarse y criticar. Por ejemplo, Einstein escribió en 1928 a Schrödinger “La filosofía tranquilizadora –¿o religión?– de Heisenberg-Bohr está elaborada tan delicadamente, por ahora, que proporciona una suave almohada para el verdadero creyente de la cual no puede levantarse con facilidad” [Lal12, p.33].

Aparte de las críticas arbitrarias y opiniones, el hecho inquietante es que hay algo físicamente muy dudoso en la interpretación de Copenhague relacionado con que dota a las bases de la física cuántica de una visión ambivalente que no está claro que no derive en inconsistencia. Es el llamado *problema de la medición* que ha sido motivo de discusión desde los primeros tiempos hasta la actualidad [GP78, Ap.E], [KP09, Ch.19], [Bel90], [Lal12] (eso no quita para que uno pueda leer en algunas fuentes serias que el problema no existe o que ya ha sido resuelto). Las referencias anteriores, especialmente la última, tratan con amplitud el tema. Aquí sólo mencionaremos que el núcleo del problema es que por un lado la función de onda caracteriza a un sistema cuántico de manera determinista, con una ecuación que dadas unas condiciones iniciales evoluciona de manera matemáticamente precisa, mientras que por otro lado, con el colapso de la función de onda, también se postula que esa regla se rompe cuando medimos, modificándose de manera instantánea la evolución. Pero ¿qué es una *medición*? Como se sugiere en [Bel90], un nombre más propio sería *experimento*. Una aguja indicadora apunta en una dirección por la interacción de partículas, representables por una gran función de onda que incluye el aparato que mide ¿la aguja colapsa en una posición cuando la vemos con los fotones que llegan a nuestros ojos? ¿En qué instante hay que abandonar la función de onda original y pasar a la colapsada? ¿es el instante en que tengamos noticia de la observación? ¿Qué es lo que determina que algo sea una medición o que no lo sea?

Por decirlo de una manera más técnica y precisa tomada de [GP78] “a pesar del indudable e impresionante éxito de las predicciones de la Mecánica Cuántica, todavía no sabemos con exactitud cómo y cuándo el régimen evolutivo dado por la ecuación de Schrödinger da paso al colapso y, por tanto, carecemos de una formulación completa e inambigua de nuestra teoría física más fundamental”. Parece ser que ya Bohr [Bel90] notó que la mecánica cuántica necesita

conceptos clásicos, aparatos de medición clásicos, como parte de sus fundamentos.

Para justificar el título, mencionamos dos explicaciones que han tenido bastante recorrido. La primera es que el colapso se produce en último término por la consciencia del observador (el premio Nobel E. Wigner fue muy lejos en esta opinión aunque después se echó un poco atrás). La segunda es la hipótesis de *universos paralelos* que en esencia afirma que la función de onda describe de manera determinista todo, antes y después de la medición, pero el sistema es muy complejo con estados superpuestos que ocurren simultáneamente, unos de ellos con el observador y lo observado en un estado y otros en otro. Es decir, hay “universos” mutuamente inaccesibles en los que ocurren cada una de las posibilidades.

⊖ Ambas explicaciones son metafísicas pues apelan a cosas que no pueden comprobarse experimentalmente. Por ello no hay que buscar mucho para leer críticas duras a estas posturas [Bel90], pero a la vez han tenido y tienen prestigiosos científicos que las apoyan. ¿No deberían los físicos teóricos abstenerse de discutir sobre afirmaciones no falsables recordando la famosa frase final del *Tractatus* de L. Wittgenstein “De lo que no se puede hablar, mejor es callarse”? Uno puede envidiar el oficio del matemático que “sólo” tiene que probar grandes resultados sin pelearse por ellos (al menos por su veracidad). Sin embargo es posible que esta discusión permanente y la importancia del argumento de autoridad, sean lo que le hayan dado a la física teórica un desarrollo tan espectacular y un mayor prestigio social. La sociedad necesita vencedores y vencidos, verdades y mentiras y, por supuesto, héroes.

Desde hace unos 30 años, la explicación que parece estarse volviendo mayoritaria es la llamada *decoherencia cuántica*. Esencialmente lo que postula es que es la acción del entorno lo que provoca el colapso. Los objetos macroscópicos evolucionan rápidamente a un estado clásico porque no puede aislarse de la interacción con el resto del universo.

1.8. Energías, momentos y posiciones como operadores

Volvamos una vez más al ejemplo de §1.2. Según (1.6) cada función de onda válida es “combinación lineal” de unas funciones de onda elementales que podemos considerar como vectores ortonormales $|\Psi_n\rangle$, cada una de ellas con una energía E_n . Según (1.18), suponiendo Ψ normalizada, cada una de estas energías aparece al medir con probabilidad $|c_n|^2$. Si queremos reducir todas las energías a una, sólo podemos hablar de la media $\sum |c_n|^2 E_n$.

Para formalizar estas cosas, introduzcamos el operador lineal de energía H (esta H es de *Hamiltoniano*)

$$(1.20) \quad H|\Psi\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n E_n |\Psi_n\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} E_n |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n | \Psi \rangle.$$

La notación $|\cdot\rangle$ es, por supuesto, prescindible, únicamente para indicarnos que pensamos en las funciones como vectores. La matriz de esta aplicación lineal en la “base” $\{|\Psi_n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$ (si tu profe de álgebra lineal te deja llamarla así) es la matriz diagonal infinita A con $a_{nn} = E_n$

En particular el operador es autoadjunto. A partir del operador H podemos construir todos los conceptos físicos antes citados en términos de otros de álgebra lineal: Las funciones de onda elementales $|\Psi_n\rangle$ son las *autofunciones* (se suele llamar así a los autovectores cuando son funciones) normalizadas de H , las energías son sus autovalores y el valor medio es $\langle\Psi|H|\Psi\rangle$.

¿Qué ganamos con esto? A fin de cuentas la definición (1.20) de este operador ya contiene $|\Psi_n\rangle$ y E_n . Ventajas notacionales aparte, el as en la manga es que podemos definir H sin referencia a ellos. Para ser un poco generales, vamos a dar un pequeño rodeo introduciendo el *operador momento* y el *operador posición*.

Si en (1.1) queremos hacer bajar la p de la exponencial, podemos derivar con respecto de x y ajustar el coeficiente. Es habitual llamar a este operador \hat{p} .

$$(1.21) \quad \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad \text{es decir} \quad \hat{p}|\Psi\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial\Psi}{\partial x}.$$

El operador posición (el que indica el espacio) parece más difícil de definir porque la función φ de (1.1) está por todas partes. Pero para una función de onda “concentrada” todos votaríamos como valor medio de la posición la esperanza que corresponde a la probabilidad $|\Psi|^2$. Es decir, el operador posición \hat{x} es el que cumple $\langle\Psi|\hat{x}|\Psi\rangle = \int x|\Psi|^2 dx$ (cada valor de x va multiplicado por su probabilidad) y esto conduce a

$$(1.22) \quad \hat{x}|\Psi\rangle = x\Psi.$$

Las fórmulas (definiciones) (1.21) y (1.22) son perfectamente generales y dan lugar a operadores autoadjuntos respecto al producto escalar de funciones (los matemáticos cerrarán los ojos para evitar problemas de convergencia). Para comprobar que \hat{p} es autoadjunto hay que integrar por partes y para comprobar que \hat{x} lo es, no hay que hacer nada.

Volvamos ahora al ejemplo. En §1.2 habíamos usado la relación fundamental $E = p^2/2m$. Para hacer bajar dos veces p en (1.1), aplicamos \hat{p} dos veces, en definitiva, $H = (2m)^{-1}\hat{p}\hat{p}$ que en una fórmula es

$$(1.23) \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \text{es decir} \quad H|\Psi\rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}.$$

En otros ejemplos, (1.23) no será válida, depende de la relación entre E y p y x . Veamos que para un tiempo fijado $t = t_0$, este operador nos da la misma información que (1.20), buscando autovalores y autofunciones de H que respeten (1.3):

$$(1.24) \quad \begin{aligned} H\Psi(x, t_0) = \lambda\Psi(x, t_0) \\ \Psi(0, t_0) = \Psi(1, t_0) = 0 \end{aligned} \Rightarrow \begin{aligned} \frac{\partial^2\Psi(x, t_0)}{\partial x^2} + \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\Psi(x, t_0) = 0 \\ \Psi(0, t_0) = \Psi(1, t_0) = 0 \end{aligned} \Rightarrow \begin{cases} \Psi(x, t_0) = C \text{sen}(n\pi x) \\ \lambda = (n\pi\hbar)^2/2m \end{cases}$$

En el último paso se ha usado que las funciones $y = y(x)$ que cumplen $y'' + k^2y = 0$ con $y(0) = 0$ son $y(x) = C \text{sen}(kx)$ y k debe ser un múltiplo entero de π para que $y(1) = 0$.

▼ Una manera de ver esto, es creerse que estas funciones tienen desarrollo de Taylor $y(x) = \sum a_n x^n$ y al sustituir en la ecuación se obtiene el desarrollo de $\sin(kx)$ salvo una constante multiplicativa.

El autovalor λ nos da la energía E_n y la autofunción $\Psi(x, t_0)$ nos da Ψ_n salvo un factor constante y el $e^{-iE_n t/\hbar}$, porque habíamos supuesto t constante, el cual podemos suponer de antemano que aparece por (1.1). De hecho esa suposición es la ecuación de Schrödinger §3.3.

¿Cuáles son las autofunciones del operador momento? La solución de $y' = ky$ es $y(x) = Ce^{kx}$ porque esta ecuación se puede escribir como $(\log y - kx)' = 0$, por tanto las autofunciones de \hat{p} son múltiplos de $e^{ipx/\hbar}$ con p el autovalor, que debe ser real porque el operador es autoadjunto.

¿Y los autovalores del operador posición? Aquí es cuando los textos de física dicen que $\delta(x - x_0)$, con δ la *delta de Dirac* (el “límite” de $\epsilon^{-1}\chi_\epsilon$ con χ_ϵ la función característica de $[-\epsilon/2, \epsilon/2]$), porque $x\delta(x - x_0) = x_0\delta(x - x_0)$ y los matemáticos salen huyendo.

Evidentemente $xy(x) = \lambda y(x)$ se cumple para cualquier x para el que y se anule. Mientras que si no se anula debe ser $x = \lambda$. Es decir, que $xy(x) = \lambda y(x)$ implica que y se anula excepto a lo más en un punto. Esto va en contra de cualquier continuidad supuesta para la función de onda. Este resultado se entiende como una especie de límite: si Ψ vale cero excepto en $(x_0 - \epsilon/2, x_0 + \epsilon/2)$, entonces $\hat{x}\Psi$ será como $x_0\Psi$ con un error relativo del orden de ϵ y si $\epsilon \rightarrow 0$, Ψ se concentrará más y más convirtiéndose en algo tipo delta de Dirac.

▼ Si uno sabe análisis de Fourier un poco avanzado, quizá le ilumine partir de la propiedad de la transformada de Fourier $(\mathcal{F}\Psi)' = -2\pi i\mathcal{F}(x\Psi)$ y decir que $x\Psi = x_0\Psi$ conduce a $(\mathcal{F}\Psi)' = -2\pi i x_0 \mathcal{F}\Psi$, de donde $\mathcal{F}\Psi$ es un múltiplo de $e^{-2\pi i x_0 x}$ que es la transformada de Fourier de $\delta(x - x_0)$.

1.9. Observables, mediciones e incertidumbre

La idea física al considerar el operador \hat{p} es que las autofunciones de \hat{p} son cosas que tienen un momento lineal determinado (en un tiempo fijado), esto es lo mismo que indica (1.1) salvo que añade la evolución temporal. De la misma forma, las autofunciones de \hat{x} son las cosas que tienen una posición determinada. Además los autovalores son los valores determinados que pueden alcanzar momento y posición.

Al igual que ocurre con la energía, cuando medimos el momento lineal de una partícula, la función de onda colapsa a una autofunción de \hat{p} , a algo con momento definido, concretamente a Ce^{ipx} si tal valor medido es p , y a partir de ahí comenzará una nueva evolución temporal. Lo mismo ocurre con la posición: al medir la función de onda colapsará a una especie de delta de Dirac. Como la posición (y a veces el momento) es una cantidad continua, ésta es una situación idealizada y en realidad nunca se mide una posición sino un rango de ellas y hay que considerar la proyección sobre las autofunciones como en el caso de la energía.

Dentro de esta situación en que energías, momentos y posiciones son una infinidad de

posibles valores, cobra importancia definir valores medios y las desviaciones esperadas con respecto de ellos. Para entender mejor las ideas y todavía conservar cierta generalidad situémonos en el escenario del álgebra lineal considerando un operador lineal $A : \mathbb{C}^N \rightarrow \mathbb{C}^N$ que es autoadjunto con el producto escalar usual. Según la teoría, diagonaliza en una base ortonormal $\{\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_N\}$. Sea $\vec{x} = \sum c_i \vec{v}_i$ unitario, $\|\vec{x}\| = 1$, se tiene $A\vec{x} = \sum c_i \lambda_i \vec{v}_i$ con λ_i los autovalores. Si pensamos en A como en H del apartado anterior, $|c_i|^2$ son probabilidades y $\vec{x} \cdot A\vec{x} = \sum \lambda_i |c_i|^2$ es la esperanza, la media, de los autovalores. Si los λ_i son muy dispares, la esperanza no es muy representativa y nos podemos percatar de ello considerando la varianza $\sum (\lambda_i - \bar{\lambda})^2 |c_i|^2 = \|(A - \bar{\lambda}I)\vec{x}\|^2$ con $\bar{\lambda} = \vec{x} \cdot A\vec{x}$. Por ser autoadjunto, esta varianza es

$$(1.25) \quad \vec{x} \cdot (A - \bar{\lambda}I)^2 \vec{x} = \vec{x} \cdot A^2 \vec{x} - 2\bar{\lambda} \vec{x} \cdot A\vec{x} + \bar{\lambda}^2 = \vec{x} \cdot A^2 \vec{x} - \bar{\lambda}^2.$$

Con esta idea, en el ámbito de la física cuántica, para un operador A que actúa sobre una función de onda normalizada Ψ se define el *valor medio* de A y la *incertidumbre* de A , que es el análogo de la desviación típica, como

$$(1.26) \quad \langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle \quad \text{y} \quad \Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}.$$

A veces se escribe $\langle A \rangle_\Psi$ y $(\Delta A)_\Psi$ si se quiere indicar la dependencia en Ψ .

Tras estas definiciones y una vez que hemos entendido las energías, momentos y posiciones como operadores, vamos a extender la interpretación de Copenhague postulando que los *observables* en física cuántica, lo correspondiente a las magnitudes físicas clásicas para un tiempo fijado, son operadores autoadjuntos que actúan sobre el espacio de funciones de onda con las siguientes propiedades:

- Los resultados de las mediciones son los autovalores.
- En una medición, la función de onda colapsa a la autofunción correspondiente a un autovalor (o las combinaciones lineales de ellas, si el autovalor es múltiple).
- La probabilidad de una medición es el módulo al cuadrado del producto escalar de la función de onda y la autofunción normalizada correspondiente al autovalor.

En caso de que la medición englobe varios autovalores o uno múltiple, la probabilidad es el módulo al cuadrado de la proyección de la función de onda sobre el subespacio de las autofunciones involucradas.

- Se cumple la relación de indeterminación $2\Delta A \cdot \Delta B \geq |\langle AB - BA \rangle|$ para cualquier par de observables A y B .

La última afirmación es un hecho puramente matemático que admite una prueba parecida a la de la *desigualdad de Cauchy-Schwarz*. Partimos de que $\langle (A - i\mu B)(A + i\mu B) \rangle \geq 0$ para

cualquier $\mu \in \mathbb{R}$, con la notación de (1.26), ya que este valor medio es igual que la norma la cuadrado de $A + i\mu B|\Psi\rangle$. Desarrollando, se tiene

$$(1.27) \quad \langle A^2 \rangle + \mu^2 \langle B^2 \rangle + \mu \langle iAB - iBA \rangle \geq 0.$$

Si elegimos $\mu = -\langle iAB - iBA \rangle / 2\langle B^2 \rangle$, se deduce

$$(1.28) \quad 4\langle A^2 \rangle \langle B^2 \rangle \geq \langle iAB - iBA \rangle.$$

Quizá cambiando A por $-A$ se puede hacer que el último término sea no negativo y sustituirlo por $|\langle AB - BA \rangle|$. Esta expresión es invariante por $A \mapsto A - \langle A \rangle I$ y $B \mapsto B - \langle B \rangle I$, por consiguiente la desigualdad anterior implica

$$(1.29) \quad 2\Delta A \Delta B \geq |\langle AB - BA \rangle|.$$

El ejemplo más importante y conocido corresponde a tomar $A = \hat{p}$, $B = \hat{x}$. Usando las definiciones (1.21) y (1.22)

$$(1.30) \quad (\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p})|\Psi\rangle = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}(x\Psi) - x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} = -i\hbar|\Psi\rangle.$$

Es decir, $\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}$ es el operador identidad salvo multiplicar por $-i\hbar$ y (1.29) implica la *desigualdad de Heisenberg*

$$(1.31) \quad \Delta \hat{p} \Delta \hat{x} \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Esta relación nos dice que ninguna función de onda puede estar a la vez muy concentrada en momento y en espacio. Éste es un fenómeno que ya habíamos observado de manera imprecisa en (1.13).

1.10. Algunos problemas resueltos

Después de tantos resultados teóricos, son de agradecer ejemplos en los que se hagan cálculos concretos.

Ejemplo 1. La función de ondas del electrón del átomo de hidrógeno en su estado fundamental viene dada por la primera fórmula de (1.16). Comprobemos que realmente está normalizada. Lo que hay que ver es que $|\Psi_{100}|^2$ integra 1 en \mathbb{R}^3 y para ello lo mejor es pasar a esféricas

$$(1.32) \quad \iiint_{\mathbb{R}^3} |\Psi_{100}|^2 = \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{e^{-2r/r_0}}{\pi r_0^3} r^2 \sin^2 \theta \, d\phi d\theta dr = \frac{4}{r_0^3} \int_0^\infty e^{-2r/r_0} r^2 \, dr = 1,$$

donde la última integral se sigue integrando por partes (o porque uno conoce la función Γ).

Ejemplo 2. En §1.1 se mencionó que la función de onda del electrón de un átomo de hidrógeno (sobrentendido en el estado fundamental), era poco perceptible mucho más allá del radio de Bohr r_0 . Calculemos la probabilidad de detectar el electrón a distancia del núcleo mayor que seis veces el radio de Bohr.

Habrà que repetir el cálculo anterior pero el radio se moverá en $(6, \infty)$, por tanto la probabilidad es

$$(1.33) \quad \iiint_{r>6} |\Psi_{100}|^2 = \frac{4}{r_0^3} \int_6^\infty e^{-2r/r_0} r^2 dr = \frac{85}{4e^{12}} = 0.000130\dots$$

por tanto sólo alrededor de 13 de cada 100000 veces, detectaremos el electrón allí.

Ejemplo 3. El *tritio* es un isótopo raro del hidrógeno con un núcleo con un protón y dos neutrones. Supongamos que está en su estado fundamental. La *desintegración beta* es una manifestación de la *fuerza nuclear débil* que permite que uno de los neutrones se desintegre en un protón, un electrón y un *neutrino*, de manera que el electrón queda libre y el átomo se transforma en un ion de helio que tiene dos protones y un neutrón en el núcleo y un electrón. Supongamos que sabemos que ha ocurrido la desintegración beta, ¿qué probabilidad hay de que el ion de helio esté en su estado fundamental?

Consideremos en (1.15) la definición de r_0 con $Z = 1$. Entonces, debemos ver la probabilidad de que la función de onda del electrón ligado haya pasado de ser $\Psi_{100}^1 = e^{-r/r_0}/\sqrt{\pi r_0^3}$ a ser $\Psi_{100}^2 = e^{-2r/r_0}/\sqrt{\pi r_0^3}/8$, por tanto el cálculo es

$$(1.34) \quad |\langle \Psi_{100}^2 | \Psi_{100}^1 \rangle|^2 = 8 \left| \frac{4}{r_0^3} \int_0^\infty e^{-3r/r_0} r^2 dr \right|^2 = \frac{512}{729}.$$

Esto es, hay alrededor de un 70 % de posibilidades.

Ejemplo 4. Supongamos una partícula de masa 2 representada por la función de onda (1.13). Si $\langle \hat{p} \rangle = 6$ para cierto instante $t = t_0$, ¿cuánto vale $\left. \frac{d}{dt} \right|_{t=t_0} \langle \hat{x} \rangle$?

Nuestra intuición clásica nos dice que la derivada de la posición es el momento entre la masa (la velocidad), Por tanto, la respuesta debería ser, y de hecho es, $6/2 = 3$. Sin embargo, esta sencilla división en el lenguaje cuántico corresponde a la igualdad entre las siguientes integrales:

$$(1.35) \quad \frac{\langle \hat{p} \rangle}{2} = \frac{\hbar}{2i} \int_0^1 \bar{\Psi}(x, t_0) \frac{\partial \Psi}{\partial x}(x, t_0) dx \quad \text{y} \quad \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=t_0} \langle \hat{x} \rangle = \left. \frac{d}{dt} \right|_{t=t_0} \int_0^1 x |\Psi(x, t_0)|^2 dx.$$

Un cálculo directo usando (1.13) es factible pero largo. En su lugar notemos que, por (1.6), se tiene $\frac{\partial \Psi_n}{\partial t} = \frac{i\hbar}{4} \frac{\partial^2 \Psi_n}{\partial x^2}$, por tanto Ψ cumple la misma relación y la segunda de las fórmulas

anteriores es igual a

$$(1.36) \quad \int_0^1 x \left(\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \Psi + \bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) dx = -\frac{i\hbar}{4} \int_0^1 x \left(\frac{\partial^2 \bar{\Psi}}{\partial x^2} \Psi - \bar{\Psi} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \right) dx.$$

La última integral es

$$(1.37) \quad \int_0^1 x \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x} \Psi - \bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dx = - \int_0^1 \left(\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x} \Psi - \bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) dx = 2 \int_0^1 \bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx$$

donde se ha integrado por partes empleando (1.3). Con ello queda probada la igualdad buscada.

El ejemplo anterior está relacionado con lo que se llama la *interpretación de Heisenberg* (y el cálculo es un caso particular del *teorema de Ehrenfest*). Con lo visto en apartados anteriores, que es la *interpretación de Schrödinger*, las funciones de onda dependen del tiempo mientras que los operadores posición y momento (1.22), (1.21) actúan para cada tiempo fijo. Con la interpretación de Heisenberg, las funciones de onda indican estados iniciales y posición y momento pasan a ser operadores que dependen del tiempo, con ello se gana la intuición que da el paralelismo con las fórmulas de la mecánica clásica como $p = m\dot{x}$.

2. El espín con álgebra lineal

Una propiedad inesperada es que diversas partículas subatómicas, especialmente el electrón, el neutrón y el protón (los componentes básicos del átomo), se comportan como imanes. De alguna forma uno puede justificar que un electrón esté cargado para que, con la imagen clásica, orbite alrededor del núcleo, también cargado pero ¿para qué sirve que sea un imán? ¿por qué lo hace? En un hito de la física teórica, Dirac respondió a esta pregunta interpretando este imán como una consecuencia de su teoría cuántica relativista del electrón (hay algunos indicios en §3.4). Dar una aproximación teórica cuantitativa precisa a su fuerza requirió unas décadas más y para el protón y el neutrón es algo todavía por completar.

A pesar de que el descubrimiento relativamente tardío de estas propiedades magnéticas pudiera sugerir que son casi irrelevantes, lo cierto es que son útiles en diversos sentidos y no sólo porque perfeccionan los modelos atómicos sino que tienen consecuencias macroscópicas como la existencia de imanes permanentes y la posibilidad de que el médico nos pueda ver los entresijos con una *resonancia magnética nuclear*. En ella se utilizan los imanes de los protones, núcleos de átomos de hidrógeno, porque los de los electrones son demasiado fuertes para ser controlados eficientemente con campos externos.

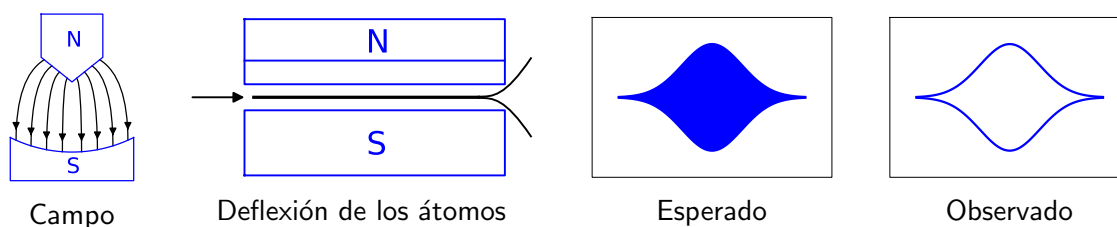
➡ Describiremos primero un experimento que despistó bastante a los físicos de principios del siglo XX mientras se desarrollaba la teoría cuántica. Conocer el experimento concreto no es necesario para entender la sección pero te servirá para no quedar como un ignorante en los debates de café de mecánica cuántica. Más importante que el experimento real en sí, son sus variantes idealizadas que hemos llamado *máquinas de Stern-Gerlach*. Con ellas es más fácil entender algunas sutilezas cuánticas.

El modelo es fundamentalmente de álgebra lineal y nos entretendremos un rato haciendo cuentas con matrices 2×2 que serán tan tontas como las que haríamos resolviendo ejercicios de sistemas de ecuaciones de dos ecuaciones con dos incógnitas pero ahora cuando tu aburrido alumno de clases particulares pregunte “¿y esto para qué sirve?” podrás contestar ufano, “para entender el espín del electrón”. Por si fuera poco, siempre se puede apelar al teletransporte, aunque es mejor usar esta baza tan fuerte con moderación.

2.1. Un poco de historia alrededor del espín

Habitualmente se presenta una famosa y sorprendente experiencia realizada en 1922 por W. Gerlach y por O. Stern como la confirmación experimental de la existencia del *espín* del electrón. Sin embargo, ateniéndose a la historia, se puede ironizar diciendo que el espín es la explicación actual del resultado de este experimento que durante años se interpretó mal y confundió a los físicos. Hasta 1927 nadie lo relacionó con el momento magnético del electrón e históricamente el concepto de espín vino por otro camino. Aun así, trabajar sobre versiones idealizadas del experimento de Stern-Gerlach, como haremos aquí, es la manera más expeditiva de introducir el espín.


En breve, el experimento consistía en lanzar un haz muy fino de átomos de plata a través de un campo magnético no homogéneo, en el que las líneas de fuerza estaban más concentradas en uno de los polos (el norte, en la primera figura). El sorprendente resultado fue que los átomos, después de atravesar el campo se desviaban a dos posiciones bien determinadas, “arriba” y “abajo” (segunda figura). En el experimento real es imposible evitar del todo desviaciones horizontales y el esquema que se obtenía sobre una placa tenía una forma parecida a la indicada en la última figura.



Si los átomos, que son neutros, se desvían, es que se están comportando como pequeños imanes. En principio eso no es tan raro con los modelos clásicos porque un electrón que gira alrededor del núcleo actúa como un imán elemental, aunque también hay razones para pensar que los diferentes imanes de cada átomo se cancelan. Lo sorprendente desde el punto de vista clásico es que haya sólo dos líneas. Si imaginamos que lanzamos muy rápido un imán infinitesimal que tiene el polo norte arriba, entonces será repelido hacia abajo porque el campo no es homogéneo y, con el esquema de las figuras, el imán siente más el polo norte del aparato. De la misma forma, si lo lanzamos con el norte abajo, será atraído hacia arriba. Girándolo poco a poco


entre estas dos posiciones iniciales, por continuidad, se debería cubrir todo el espacio entre abajo y arriba, es decir, cabría esperar detectar algo como lo de la tercera figura. Sommerfeld pensó que el experimento de Stern-Gerlach era la prueba de la cuantización espacial de las órbitas en su modelo (en la que pocos físicos creían [SR05]), por la cual los electrones debían orbitar en ciertos planos determinados por números enteros.

Actualmente se explica el resultado del experimento a partir del espín del electrón “más externo” del átomo de plata. ¿Y qué es el *espín*? Es un momento angular intrínseco que tiene el electrón y otras partículas. Esto es, en la imagen clásica, un giro sobre sí mismo, y como el electrón tiene carga, lo convierte en un pequeñísimo imán.

 Por cierto, el experimento directo con electrones libres no es viable porque sería muy difícil compensar la *fuerza de Lorentz* que ejercen los campos magnéticos sobre las cargas. La imagen del electrón girando sobre sí mismo tiene varias limitaciones, y como regla general, pensar en el momento angular a escala cuántica extrapolando del concepto clásico, lleva fácilmente a error. Por ejemplo, hay una relación sencilla (la *fracción giromagnética*) entre el momento angular de algo cargado y el imán que se genera, pero en el caso del electrón aparece un factor extra, su *factor-g* que está cerca de 2 y cuya explicación requiere física muy avanzada.

Con esto sólo explicamos dónde está el imán pero no el resultado del experimento. Para hacerlo, debemos aceptar que el momento angular que indica el espín sólo puede tomar dos valores en la dirección vertical. Con las unidades y convenios habituales, estos dos valores son $\hbar/2$ y $-\hbar/2$. Es decir, al igual que en (1.5) o en (1.15) teníamos energías cuantizadas ahora tenemos momentos angulares verticales cuantizados. El hecho de que salgan dos valores en lugar de infinitos, permitirá pasar en el tratamiento matemático de dimensión infinita a álgebra lineal de verdad en dimensión dos. También nos permitirá pensar mejor en las sutilezas de la interpretación de Copenhague.

¿Cómo se descubrió el espín del electrón en realidad? Ya hemos mencionado el efecto Zeeman por el cual las líneas espectrales se desdoblaban bajo la acción de un campo magnético [Mor10, §4.3.7]. De esta forma para cada l en (1.14) uno podía “ver” los $2l + 1$ valores $m = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$. El *efecto Zeeman anómalo* [GP78, §1.9] consistía en que a veces se veían grupos pares de líneas, como si l pudiera ser semientero. Fue R. Kronig quien en 1924 tuvo la idea de que habría una explicación suponiendo que cada electrón tenía un l propio igual a $1/2$ y por tanto $m = -1/2, 1/2$. En la teoría, $\hbar m$ corresponde a la proyección vertical del momento angular, de ahí los valores $-\hbar/2$ y $\hbar/2$ antes mencionados.

 Con estas ideas, es posible entender mejor el experimento de Stern-Gerlach. La configuración electrónica de la plata es $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^1$. Recordemos que las letras s, p y d corresponden a $l = 0, 1$ y 2 en (1.14), para cada electrón, el número que los precede es n y los exponentes indican el número de electrones con estos valores. Entonces un átomo de plata tiene 47 electrones y el de energía mayor, $5s^1$, corresponde a $l = 0$, eso significa que no tiene momento angular orbital que se vea afectado por el campo magnético. Los otros 46 electrones tienen espines en direcciones opuestas por parejas. De esta forma sus “imanes” se compensan y todo el efecto se debe al espín, al

momento angular intrínseco, del electrón de energía mayor.

Kronig tuvo la mala suerte de exponerle sus ideas a W. Pauli que ya entonces tenía gran prestigio, quien le dijo: “Ésa es una idea muy inteligente, pero la naturaleza no funciona así”. Por ello, Kronig decidió no intentar publicarlo. Al contrario ocurrió algo después con otros dos jóvenes físicos que son oficialmente los “descubridores” del espín con una idea similar a la de Kronig: S. Goudsmit y G. Uhlenbeck. Ellos se lo contaron al ya jubilado pero activo H. Lorentz quien puso una seria objeción (relacionada con la fracción giromagnética) pero también se lo habían expuesto a otra autoridad, P. Ehrenfest, quien envió él mismo el trabajo a publicar en nombre de ellos y les dijo “Los dos sois jóvenes, podéis permitir os una estupidez” [SR05]. Aunque Pauli en esta ocasión no fue nada constructivo, sus habituales duras críticas y su propia contribución fueron muy positivas para el desarrollo del fundamento teórico de la física cuántica.

Aparte del espín del electrón, que es lo que se llama espín $1/2$, por los valores $\pm\hbar/2$, hay otros espines “más grandes”, todos ellos enteros o semienteros. Aquí, para abreviar, desde el propio título de la sección, entendemos el espín como el espín $1/2$, el del electrón.

2.2. Máquinas de Stern-Gerlach

Después de haber descrito la historia y mínimamente el experimento real, es conveniente pensar de una manera idealizada en una máquina, que denotaremos con SG_z , en la que entran electrones y salen clasificados dependiendo de si el espín del electrón detectado como momento angular en la dirección vertical (eje z), sea $\hbar/2$ o $-\hbar/2$. Según la teoría de §1.9, estos dos valores medidos son los autovalores de cierto *operador de espín* en la dirección z , que llamaremos S_z y corresponden a dos autofunciones normalizadas $|z+\rangle$ y $|z-\rangle$ que son los posibles estados que detectamos con la máquina SG_z .

$$(2.1) \quad \begin{array}{c} \text{---} \boxed{\text{SG}_z} \begin{array}{l} \text{---} \text{+} \\ \text{---} \text{-} \end{array} \begin{array}{l} +\hbar/2 \\ -\hbar/2 \end{array} \end{array} \quad \left\{ \begin{array}{l} S_z|z+\rangle = +\frac{\hbar}{2}|z+\rangle \\ S_z|z-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|z-\rangle \end{array} \right.$$

Si reorientamos los imanes o simplemente giramos la máquina, tendremos máquinas, que llamaremos SG_x y SG_y , para decidir el momento angular en las direcciones x e y . La simetría asegura, por supuesto, que sigue habiendo sólo dos valores $\pm\hbar/2$ (si no te crees que el eje OZ es arbitrario, trata de convencer a los australianos). Habrá entonces operadores de espín S_x y S_y con autofunciones normalizadas $|x\pm\rangle$ y $|y\pm\rangle$, totalmente análogos:

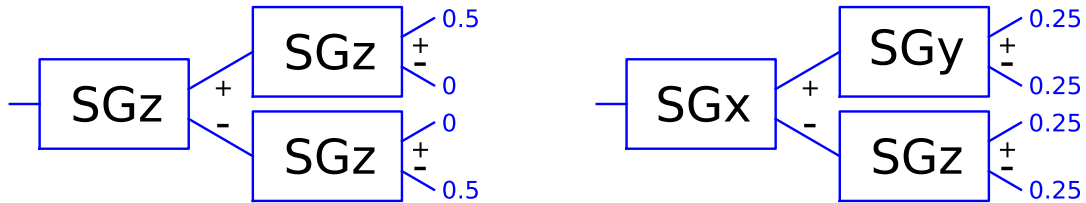
$$(2.2) \quad \left\{ \begin{array}{l} S_x|x+\rangle = +\frac{\hbar}{2}|x+\rangle \\ S_x|x-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|x-\rangle \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} S_y|y+\rangle = +\frac{\hbar}{2}|y+\rangle \\ S_y|y-\rangle = -\frac{\hbar}{2}|y-\rangle \end{array} \right.$$

Ahora vamos a plantear una serie de experimentos con estos instrumentos que llamaremos *máquinas de Stern-Gerlach*. Son más mentales que reales, al igual que los de doble rendija que aparecen con frecuencia en los textos (especialmente bien explicados en [FLS65]), pero como ellos, muy ilustrativos de las ideas de la física cuántica.

⊖ Hay una concepción errónea respecto al poder del método científico aplicado a la física (en particular a la teórica). Muchas veces uno tiene la impresión de que cuando dos físicos tienen opiniones distintas sobre algo, van al laboratorio, hacen el experimento y se acaba la discusión. Lo que no se tiene en cuenta es que los experimentos son a menudo muy difíciles de hacer y en absoluto inapelables. Por ejemplo, según [KP09] no fue hasta 1989 cuando se hicieron los experimentos de doble rendija con electrones [TEM⁺89] (a pesar de que los autores del trabajo no parecen estar muy de acuerdo). Todavía más, algunos temas de la física teórica actual son tan abstractos que ni siquiera hay experimentos factibles, lo que los transforma en una especie de matemáticas sin demostraciones (o matemáticas teóricas [JQ93]).

Además los experimentos que consideraremos son más simples que los de doble rendija porque son discretos y no hay que pensar en interferencias. Consisten en conectar varias de estas máquinas (en la práctica podría ser difícil redirigir los electrones o átomos en diversas direcciones). Escribiremos en las salidas finales la proporción de electrones que se detectan en cada una de ellas. Supondremos además que a la entrada de la primera máquina siempre llegan electrones “al azar” sin espín fijado. En el experimento de Stern-Gerlach original esto estaba asegurado porque los átomos procedían de un horno y el calor desordena.

Comencemos con los dos esquemas siguientes:

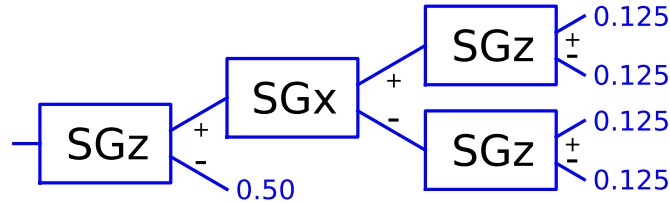


El primero no es nada sorprendente desde el punto de vista clásico: una vez que tenemos los “imanes” de los electrones en una dirección, no se modificarán por mucho que midamos. La explicación cuántica es más rara: los electrones iniciales estarán en estados de la forma $|\Psi\rangle = c_1|z+\rangle + c_2|z-\rangle$ y tras la medición con la primera máquina, la función de onda $|\Psi\rangle$ colapsará a $|z+\rangle$ o a $|z-\rangle$, con probabilidades respectivas $|c_1|^2$ y $|c_2|^2$. Una vez que ha colapsado, permanecerá invariable al pasar por máquinas similares.

El segundo esquema es un poco más raro, por alguna razón, que el “imán” esté orientado en el eje z no es incompatible con que lo esté en la dirección x o y (una razón más para no pensar el espín como un giro real). Esta perplejidad es similar a la del experimento original ¿por qué no hay átomos que se desvíen poco o nada? ¿por qué sólo dos resultados? Lo que estamos afirmando es que en una máquina de Stern-Gerlach, un eje no ve al otro. Introduciendo muchos $|x+\rangle$ la

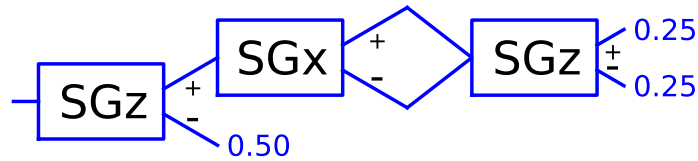
mitad se detectarán como $|y+\rangle$ y la otra mitad como $|y-\rangle$, y lo mismo pasará con cualquier otro par de ejes, siempre que sean distintos. Consideremos esto como un hecho experimental (aunque se sigue de propiedades del momento angular cuántico).

Una vez que pensamos que entendemos la idea, nos encontramos con algo muy poco intuitivo con nuestra mentalidad clásica:



Los electrones que salen por arriba de la primera máquina están orientados hacia arriba y, como sugería el segundo esquema, por alguna razón pueden también estarlo simultáneamente en las dos direcciones x , pero entonces ¿de dónde salen los electrones finales orientados hacia abajo? La explicación cuántica es que en la parte superior de la primera máquina se tendrá $|z+\rangle$ que al pasar por la segunda colapsará a $|x+\rangle$ o a $|x-\rangle$ con la misma probabilidad (como en el segundo esquema) y por tanto no se guarda ninguna memoria de la orientación inicial.

Para insistir más sobre este punto, consideremos ahora:



La segunda máquina en teoría no hace nada, simplemente clasifica los electrones y los vuelve a juntar, sin embargo ponerla o no ponerla produce un cambio total en el resultado. La salida no depende de cómo sea la máquina intermedia, de si su campo magnético es lo suficientemente débil como para apenas alterar a los electrones, el caso es que si hemos hecho una medida que nos da información acerca del momento angular en una dirección, afectamos significativamente el resultado.

2.3. El espín con vectores y matrices

Tenemos una propiedad física, el espín, que cuando la medimos da lugar a dos posibles resultados: espín arriba $|z+\rangle$ y espín abajo $|z-\rangle$. Con el lenguaje del álgebra lineal, eso significa que los posibles estados correspondientes (las funciones de onda) forman un espacio vectorial de dimensión 2 con base ortonormal $\mathcal{B}_z = \{|z+\rangle, |z-\rangle\}$. Girando el aparato de medición podemos emplear también las bases ortonormales $\mathcal{B}_x = \{|x+\rangle, |x-\rangle\}$ y $\mathcal{B}_y = \{|y+\rangle, |y-\rangle\}$, para describir cada estado.

Lo que nos proponemos es, a la luz de los resultados del experimento, calcular la relación entre las tres formas de ver el espacio vectorial. Es decir, las matrices de cambio de base. Una vez hecho esto, buscaremos las matrices de los operadores de espín S_x , S_y y S_z .

Un aviso previo es que multiplicar los elementos de estas bases por números de módulo 1 preserva la ortonormalidad y no cambia para nada la física. Recordemos que todo lo que se puede detectar de una función de onda es una probabilidad dada por $|\Psi|^2$. Sobre todo los estudiantes de matemáticas, encontrarían más natural conservar todos los posibles parámetros pero en física a menudo la libertad se usa para elegir soluciones convenientes, mientras que en matemáticas se tiende más a dar resultados lo más generales posibles. Si encuentras otra solución coherente con el experimento, lo cual es fácil, no intentes que la pongan en los libros y no te quejes porque será en cierto sentido equivalente.

La tradición es tomar \mathcal{B}_z como base principal y referir todo a ella. En coordenadas respecto a \mathcal{B}_z se tiene la tontería

$$(2.3) \quad |z+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |z-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{es decir} \quad \begin{cases} |z+\rangle = 1|z+\rangle + 0|z-\rangle \\ |z-\rangle = 0|z+\rangle + 1|z-\rangle \end{cases}$$

La matriz de cambio de base C_{xz} que pasa coordenadas respecto de \mathcal{B}_x a coordenadas respecto de \mathcal{B}_z es

$$(2.4) \quad C_{xz} = \begin{pmatrix} a & c \\ b & d \end{pmatrix} \quad \text{si} \quad |x+\rangle = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}, \quad |x-\rangle = \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix}.$$

El experimento (segundo esquema de §2.2) nos dice que $|x-\rangle$ se detecta como $|z+\rangle$ la mitad de las veces y como $|z-\rangle$ la otra mitad. Lo mismo ocurre con $|x+\rangle$. De aquí $|a|^2 = |b|^2 = |c|^2 = |d|^2 = 1/2$. Con la observación anterior, es lícito cambiar $|x+\rangle$ y $|x-\rangle$ por $e^{-i\alpha}|x+\rangle$ y $e^{-i\gamma}|x-\rangle$ con α y γ los argumentos (ángulos) de a y c . Así conseguimos $a = c = 1/\sqrt{2}$.

Por otro lado, la ortogonalidad de \mathcal{B}_x nos dice $1/2 + \bar{b}d = 0$ que con $|b|^2 = |d|^2 = 1/2$ conduce a $b = e^{i\beta}/\sqrt{2}$ y $d = -e^{i\beta}/\sqrt{2}$. Con β arbitrario. Para limpiar más el resultado, notemos que $|x+\rangle = a|z+\rangle + b|z-\rangle = a|z+\rangle + be^{-i\beta}(e^{-i\beta}|z-\rangle)$. Entonces redefiniendo $|z-\rangle$ como $e^{-i\beta}|z-\rangle$ nos libramos del β en las coordenadas de $|x\pm\rangle$ y tenemos finalmente

$$(2.5) \quad C_{xz} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad \text{es decir} \quad \begin{cases} |x+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z+\rangle + |z-\rangle) \\ |x-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z+\rangle - |z-\rangle) \end{cases}$$

Si nombramos de la misma forma los elementos de la matriz C_{yz} , un razonamiento similar nos permite elegir $a = c = 1/\sqrt{2}$ y llegar a $b = e^{i\beta}/\sqrt{2}$ y $d = -e^{i\beta}/\sqrt{2}$, pero ahora una redefinición de $|z-\rangle$ no está claro que elimine simultáneamente esta β y la anterior. De hecho no puede hacerlo porque eso llevaría a $\mathcal{B}_x = \mathcal{B}_y$ que no es coherente con el experimento. Una

vez gastada la redefinición de $|z-\rangle$, nos vemos obligados a conservar momentáneamente este β . Para determinarlo, consideremos la matriz del cambio de base de \mathcal{B}_x a \mathcal{B}_y :

$$(2.6) \quad C_{yx} = C_{zx}C_{yz} = C_{xz}^{-1}C_{yz} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ e^{i\beta} & -e^{i\beta} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + e^{i\beta} & 1 - e^{i\beta} \\ 1 - e^{i\beta} & 1 + e^{i\beta} \end{pmatrix}.$$

Ahora bien, $|y\pm\rangle$ se detecta como $|x\pm\rangle$ con probabilidad $1/2$, por tanto, de nuevo los módulos de todos los elementos de C_{yx} son $1/\sqrt{2}$. Resolviendo $|(1 \pm e^{i\beta})/2| = 1/\sqrt{2}$ se sigue $e^{i\beta} = \pm i$. Consideremos $+i$, la elección $-i$ sólo intercambiaría las definiciones de $|y+\rangle$ y $|y-\rangle$. En este sentido, la elección corresponde a especificar una orientación. En definitiva

$$(2.7) \quad C_{yz} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ i & -i \end{pmatrix}, \quad \text{es decir} \quad \begin{cases} |y+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z+\rangle + i|z-\rangle) \\ |y-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|z+\rangle - i|z-\rangle) \end{cases}$$

Ahora vamos a calcular las matrices de los operadores de espín. En términos matemáticos, son las matrices que tienen los vectores antes hallados como autovectores con autovalores $\hbar/2$ y $-\hbar/2$ pero habitualmente se calculan primero las que tienen autovalores 1 y -1 , que son también importantes desde el punto de vista teórico. Esto es, para cada uno de los ejes $E = x, y, z$, buscamos una matriz cuyos autovectores sean $|E+\rangle$ y $|E-\rangle$ con autovalores respectivos 1 y -1 . Trabajando en la base canónica (2.3), se sigue por la fórmula de cambio de base

$$(2.8) \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = C_{xz} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} C_{xz}^{-1}, \quad \sigma_y = C_{yz} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} C_{yz}^{-1}.$$

Sustituyendo (2.5) y (2.7) se obtienen las *matrices de Pauli*.

$$(2.9) \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Los operadores de espín S_x, S_y, S_z , están representados por estas matrices multiplicadas por $\hbar/2$ para que los autovalores 1 y -1 pasen a $\hbar/2$ y $-\hbar/2$.

Las humildes matrices de Pauli poseen muchas propiedades matemáticas. Desde el punto de vista del álgebra lineal, son matrices unitarias que determinan una base del espacio vectorial sobre \mathbb{R} formado por las matrices hermíticas 2×2 de traza cero.

En el experimento de Stern-Gerlach nada obliga a una orientación a lo largo de los ejes cartesianos, a fin de cuentas, éstos son arbitrarios. ¿Qué cabe esperar con otras orientaciones? Si por ejemplo tomamos una dirección \vec{n} muy próxima al eje OZ , lo natural es que al conectar la salida superior de una máquina SG n orientada en la dirección \vec{n} a la entrada de una máquina SG z , la salida tenga una gran mayoría en el estado $|z+\rangle$ y pocos en $|z-\rangle$. Lo que intentamos es desarrollar la teoría matemática para averiguar la proporción.

El punto de partida va a ser un hecho físico que deriva de que el espín es un momento angular y el momento angular depende linealmente del “eje”, con lo cual supondremos que el operador que corresponde a una dirección unitaria $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$ es $n_x S_x + n_y S_y + n_z S_z$.

En términos clásicos, $\vec{L} = \vec{p} \times \vec{r} = (L_x, L_y, L_z)$. La función $\vec{r} \mapsto \vec{L}$ es lineal y L_x se puede interpretar como el producto escalar de \vec{L} por $(1, 0, 0)$ o lo que es lo mismo, como su proyección sobre él. Físicamente es la parte del momento angular que depende de giros alrededor del eje x . De la misma forma, la contribución del momento angular en la dirección unitaria \vec{n} es $\vec{n} \cdot \vec{L}$ y en términos clásicos, representa lo que se gira alrededor de \vec{n} . En el mundo cuántico, \vec{L} pasa a ser un vector de operadores y por tanto $\vec{n} \cdot \vec{L}$ es una combinación lineal de operadores.

Su matriz en la base \mathcal{B}_z es $\hbar/2$ por la matriz $n_x \sigma_x + n_y \sigma_y + n_z \sigma_z$ que se suele denotar $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$ (lo cual gustará poco a los matemáticos porque $\vec{\sigma}$ es un “vector de matrices”, pero es bastante útil). Con las definiciones (2.9)

$$(2.10) \quad \vec{n} \cdot \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} n_z & n_x - in_y \\ n_x + in_y & -n_z \end{pmatrix}$$

Hallemos ahora los autovectores. Para que el resultado quede un poco más simétrico, parametrizaremos el vector unitario \vec{n} en las coordenadas esféricas habituales como $n_x = \cos \phi \sin \theta$, $n_y = \sin \phi \sin \theta$, $n_z = \cos \theta$. Las ecuaciones que define los autovectores para los autovalores 1 y -1 , son respectivamente

$$(2.11) \quad \begin{pmatrix} \cos \theta - 1 & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta - 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \begin{pmatrix} \cos \theta + 1 & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta + 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Las soluciones, únicas salvo multiplicación por constantes, son $|\vec{n}+\rangle$ y $|\vec{n}-\rangle$ con

$$(2.12) \quad |\vec{n}+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad |\vec{n}-\rangle = \begin{pmatrix} -e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \quad \text{es decir} \quad \begin{cases} |\vec{n}+\rangle = \cos \frac{\theta}{2} |z+\rangle + e^{i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |z-\rangle \\ |\vec{n}-\rangle = -e^{-i\phi} \sin \frac{\theta}{2} |z+\rangle + \cos \frac{\theta}{2} |z-\rangle \end{cases}$$

Las expresiones para $|x\pm\rangle$ de (2.5) corresponden a tomar $\theta = \pi/2$ y $\phi = 0$. De la misma forma, las fórmulas de (2.7) son coherentes con (2.12) para $\theta = \pi/2$ y $\phi = \pi/2$ (los factores extra de módulo 1 son irrelevantes).

2.4. Productos tensoriales y entrelazamiento

Las funciones de onda que habíamos indicado en (1.14) para los electrones del átomo de hidrógeno no tienen en cuenta el espín. ¿Cómo podríamos indicarlo? Para simplificar consideremos que sólo hubiera tres orbitales atómicos, esto es, tres sumandos en (1.14) de manera que las funciones de onda fueran de la forma $|\Psi\rangle = c_1|\Psi_1\rangle + c_2|\Psi_2\rangle + c_3|\Psi_3\rangle$. Tras una medición, Ψ colapsará en una de las Ψ_k y queremos indicar también el espín que detectamos, por ejemplo

en la dirección OZ , que puede ser $+$ ó $-$. Para ello simplemente añadimos este signo al nombre de Ψ_k y escribimos la expresión formal

$$(2.13) \quad |\Psi\rangle = c_1|\Psi_{1+}\rangle + c_2|\Psi_{2+}\rangle + c_3|\Psi_{3+}\rangle + c_4|\Psi_{1-}\rangle + c_5|\Psi_{2-}\rangle + c_6|\Psi_{3-}\rangle$$

y, por ejemplo, un estado superpuesto $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\Psi_{1+}\rangle + |\Psi_{1-}\rangle)$ correspondería, según (2.5) a $|\Psi_1\rangle$ con espín $|x+\rangle$.

Esto es muy simple, lo que no impide que los matemáticos tengan una estructura que cuadre con estas ideas. Dados dos espacios vectoriales V y W con bases respectivas $\{\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_n\}$ y $\{\vec{w}_1, \dots, \vec{w}_m\}$ se llama *producto tensorial* de V y W al espacio vectorial $V \otimes W$ que tiene como base $\{\vec{v}_1 \otimes \vec{w}_1, \vec{v}_1 \otimes \vec{w}_2, \dots, \vec{v}_n \otimes \vec{w}_m\}$ donde $\vec{v}_k \otimes \vec{w}_l$ son, en principio, expresiones formales. Si son formales ¿por qué no escribir $\vec{z}_{k,l}$? ¿por qué usar una notación que recuerda al producto? Porque queremos que sea distributivo y sacar escalares, así cuando en vez de $|\Psi_{1\pm}\rangle$ escribamos $|\Psi_1\rangle \otimes |z\pm\rangle$ (indicando lo mismo), la siguiente igualdad se sigue de la notación:

$$(2.14) \quad \frac{1}{\sqrt{2}}|\Psi_1\rangle \otimes |z+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\Psi_1\rangle \otimes |z-\rangle = |\Psi_1\rangle \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{2}}|z+\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|z-\rangle \right) = |\Psi_1\rangle \otimes |x+\rangle.$$

Para los que se extasién con las estructuras y sus propiedades, y para posterior referencia, aquí van unas píldoras de material: Es obvio que $\dim(V \otimes W) = \dim V \cdot \dim W$, en contraste con $\dim(V \times W) = \dim V + \dim W$ para el producto cartesiano; hay una manera simple de pasar un operador A sobre V y otro B sobre W a uno sobre $V \otimes W$ denotado $A \otimes B$, definiendo $(A \otimes B)(\vec{v} \otimes \vec{w}) = (A\vec{v}) \otimes (B\vec{w})$, lo que corresponde al *producto de Kronecker* de matrices; por dualidad, \otimes corresponde al producto usual, en el sentido de que todo elemento de $(V_1 \otimes \dots \otimes V_N)^*$ es de la forma $F(\vec{v}_1 \otimes \dots \otimes \vec{v}_N) = \prod_{k=1}^N f_k(\vec{v}_k)$ con $f_k \in V_k^*$. En relación con esto, productos escalares en V y W inducen un producto escalar natural en $V \otimes W$ dado por $(\vec{v} \otimes \vec{w}) \cdot (\vec{a} \otimes \vec{b}) = (\vec{v} \cdot \vec{a})(\vec{w} \cdot \vec{b})$.

Aparte de para añadir el espín, el producto tensorial se utiliza en física cuántica para representar sistemas de partículas. Si tenemos dos partículas independientes en estados $|\Psi_1\rangle$ y $|\Psi_2\rangle$, diremos que el estado del sistema es $|\Psi_1\rangle \otimes |\Psi_2\rangle$. En términos probabilistas, la independencia se traduce en que la probabilidad de detectar la primera partícula en A y la segunda en B es

$$(2.15) \quad \iint_{A \times B} |\Psi_1(x_1)\Psi_2(x_2)|^2 dx_1 dx_2 = \int_A |\Psi_1(x_1)|^2 dx_1 \int_B |\Psi_2(x_2)|^2 dx_2,$$

lo cual está relacionado con la dualidad entre \otimes y el producto usual, antes mencionada.

En algunos procesos una partícula de espín cero se desintegra en dos con espines opuestos, por ejemplo un *mesón* sin espín se desintegra en dos *muones*. El estado resultante se representa mediante

$$(2.16) \quad |s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \otimes |-\rangle - |-\rangle \otimes |+\rangle).$$

Esto indica que hay dos posibilidades (forzadas por la conservación del momento angular): primera partícula con espín $+$ y segunda con espín $-$ o viceversa. Cada una de ellas ocurre con probabilidad $(1/\sqrt{2})^2 = 1/2$. En principio uno podría considerar algo más general que (2.16) para representar esta situación, algo de la forma $(|+\rangle \otimes |-\rangle + e^{i\alpha}|-\rangle \otimes |+\rangle)/\sqrt{2}$, pero la simetría entre las partículas implica que al intercambiarlas $|s\rangle$ debe pasar a ser $\pm|s\rangle$ (porque una simetría al cuadrado es la identidad), lo que fuerza $e^{i\alpha} = \pm 1$. Hay razones de física teórica por las cuales el -1 aparece para partículas como las que tenemos en mente (en otros casos no relacionados con el espín aparece un $+$).

Hemos escrito $|+\rangle$ en lugar de $|z+\rangle$ porque en realidad ¡da igual! La dirección del espín no cambia (2.16). Para comprobarlo, usando (2.12) se tiene que $|\vec{n}+\rangle \otimes |\vec{n}-\rangle$ es

$$(2.17) \quad \frac{1}{2}(|z-\rangle \otimes |z-\rangle - |z+\rangle \otimes |z+\rangle)e^{-i\phi} \cos \theta + \cos^2 \frac{\theta}{2}|z+\rangle \otimes |z-\rangle - \sin^2 \frac{\theta}{2}|z-\rangle \otimes |z+\rangle$$

y, de la misma forma, $|\vec{n}-\rangle \otimes |\vec{n}+\rangle$ es

$$(2.18) \quad \frac{1}{2}(|z-\rangle \otimes |z-\rangle - |z+\rangle \otimes |z+\rangle)e^{-i\phi} \cos \theta - \sin^2 \frac{\theta}{2}|z+\rangle \otimes |z-\rangle + \cos^2 \frac{\theta}{2}|z-\rangle \otimes |z+\rangle.$$

Al restar se obtiene $|z+\rangle \otimes |z-\rangle - |z-\rangle \otimes |z+\rangle$.

El estado $|s\rangle$ no corresponde a dos partículas independientes porque

$$(2.19) \quad |s\rangle \neq (a|+\rangle + b|-\rangle) \otimes (c|+\rangle + d|-\rangle)$$

cualesquiera que sean $a, b, c, d \in \mathbb{C}$. Se dice que las partículas que representan $|s\rangle$ están *entrelazadas* y se habla de *entrelazamiento cuántico*.

Hay dos temas relacionados con el entrelazamiento que, convenientemente mitificados, han tenido gran difusión y nos ocuparán los dos siguientes apartados. El formalismo anterior no es necesario para entender intuitivamente de qué tratan pero sí para darles un tratamiento matemático. Todo lo paradójico en ellos radica en que la interpretación de Copenhague es muy difícil de creer. Desde el punto de vista clásico, da igual que dos partículas tengan espines opuestos debido a que se generaron a partir de una sin espín. Si no interactúan cada una hará su vida por separado. Pero la interpretación de Copenhague postula que las funciones de onda colapsan y en situaciones de entrelazamiento, como el anterior, el colapso afecta a ambas partículas.

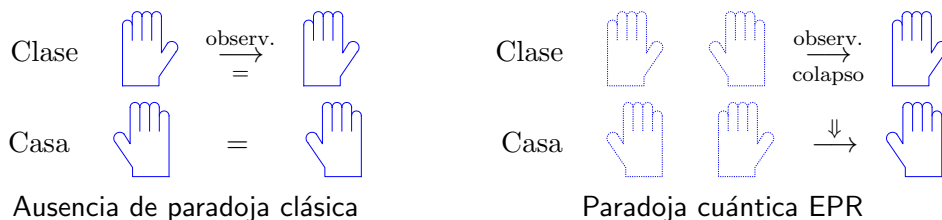
2.5. Acciones fantasmagóricas a distancia

Probablemente el tema más famoso y básico relacionado con el entrelazamiento sea la llamada *paradoja EPR*, llamada así por un breve artículo de Einstein, B. Podolsky y N. Rosen [EPR35] en el que criticaban la interpretación de Copenhague. Según dijo sarcásticamente

Einstein, ésta conducía a “acciones fantasmagóricas a distancia” (se suele citar erróneamente como fuente de esta frase [EPR35] pero es años anterior y no aparece allí).

Comencemos con la versión clásica. Si me dejo un guante en casa y veo en clase que sólo tengo el de la mano derecha, es que en casa está el de la izquierda. Si una partícula se ha desintegrado en una de espín $+$ y en otra de espín $-$, y me llevo una a clase y dejo otra en casa, sabiendo el espín de una, sabré el de la otra.

La paradoja EPR (en su versión actual común, no en la de [EPR35]) consiste en que, de acuerdo con la interpretación de Copenhague es la medición la que produce el colapso a un estado definido, de $a|+\rangle + b|-\rangle$ a $|+\rangle$ o a $|-\rangle$. Entonces cuando medimos el espín de la partícula que tenemos en clase y resulta ser $+$, la medición que hacemos de ella tiene que “convertir” también la partícula de casa en una de espín $-$, porque el momento angular se conserva, pero ¿cómo puede tener una acción en un punto un efecto instantáneo sobre otro lejano? Esto suena muy raro y los autores de [EPR35] no se lo creen.



Esto parece una mera opinión que está en los límites de la filosofía. Si yo digo que mi guante no existe hasta que alguien lo percibe, todos dirán que soy tonto o raro pero nadie puede demostrar experimentalmente que miento.

En [EPR35] se sugiere que la mecánica cuántica es incompleta en el sentido de que hay propiedades físicas desconocidas, llamadas *variables ocultas*, que explican la mecánica de forma determinista (clásica). Al no considerar esas presuntas propiedades que distinguen partículas que nos parecen iguales, los resultados de los experimentos son estadísticos. De nuevo, esta sugerencia parece meramente filosófica, ¿cómo vamos a demostrar que no existen propiedades físicas desconocidas que se pueden integrar en la física clásica y niegan la cuántica? Pues curiosamente J.S. Bell en 1964 ideó un ingenioso experimento, en principio mental, para comprobar este extremo, y una versión de tal experimento fue puesta en marcha en 1972 con un resultado contrario a las variables ocultas.

⊖ Teniendo en cuenta que la paradoja EPR es parte de prácticamente la totalidad de los cursos de mecánica cuántica y que se ha revitalizado con la aparición de la *computación cuántica*, la opinión siguiente es con mucho la más incendiaria que aparece en estas notas y su contribución más original. Dicha opinión es que el artículo [EPR35] es famoso fundamentalmente porque Einstein es su primer firmante (quien redactó el artículo fue Podolsky) y su contenido científico objetivo se ha exagerado. Por supuesto, una opinión tan frontalmente contraria a la historiografía de la física moderna, merece una serie de argumentos.

1) Siempre se cita el artículo [EPR35] pero rara vez su contenido. Casi todas las veces lo que se cita es realmente de Bell o de D. Bohm o de autores posteriores. Si [EPR35] es tan revolucionario ¿qué sentido

tiene no mencionar qué dice? El artículo (de 4 páginas) tiene un contenido científico escaso, se entretiene demasiado en divagaciones filosóficas y en mencionar hechos muy básicos de mecánica cuántica. El propio Einstein criticó en privado la redacción de Podolsky por considerar que divagaba y un año después en un artículo generalista incluyó la misma información científica que [EPR35] pero en pocas líneas.

2) El artículo de Bell [Bel64], que ahora es citado inseparablemente a [EPR35] elevado a *Teorema de Bell* y a la solución de la paradoja, a pesar de ser física y matemáticamente mucho más profundo, apenas recibió atención cuando se publicó.

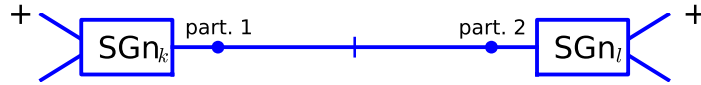
3) Hay algo un poco circular en la manera de presentar la argumentación en [EPR35]. Desde el principio se contradice la interpretación de Copenhague, por ejemplo ya en el abstract se dice “Una condición suficiente para la realidad física de una cantidad es la posibilidad de predecirla con certeza sin perturbar el sistema”. Después de leer muchas afirmaciones que ningún físico cuántico actual aceptaría, se presenta la paradoja y se concluye el artículo diciendo que la “función de onda no proporciona una descripción completa de la realidad”. En parte eso ya estaba implícito desde el principio.

4) El trabajo fue mencionado en un titular ¡de primera página! del New York Times bajo el epígrafe “Einstein ataca la teoría cuántica”, lo cual claramente contribuyó a su fama instantánea. No era la primera vez que la prensa común reflejaba trabajos de física teórica de Einstein (quien a su pesar fue desde joven precedido por su fama) pero esta vez le sentó mal y envió unas líneas un poco feas al periódico. De hecho, parece que retiró la palabra a Podolsky por haber mencionado el trabajo a la prensa. Es de suponer que estas reacciones y sus críticas privadas no le hacían sentir muy cómodo con el artículo. En un físico de la talla de Einstein eso debería significar algo.

Pasemos ahora al simple e ingenioso argumento de Bell. Supongamos que tenemos dos partículas en el estado descrito por (2.16). Consideremos tres máquinas de Stern-Gerlach $SG_{\vec{n}_1}$, $SG_{\vec{n}_2}$ y $SG_{\vec{n}_3}$ orientadas con los vectores $\vec{n}_1 = (0, 0, 1)$, $\vec{n}_2 = (\sqrt{3}/2, 0, 1/2)$ y $\vec{n}_3 = (\sqrt{3}/2, 0, -1/2)$. Es decir, la primera es SG_z y las otras consisten en girarla 60° y 120° alrededor del eje OY . Según (2.12), en la base $\{|z+\rangle, |z-\rangle\}$, se tiene

$$(2.20) \quad \begin{aligned} |\vec{n}_1+\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} & |\vec{n}_2+\rangle &= \begin{pmatrix} \sqrt{3}/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} & |\vec{n}_3+\rangle &= \begin{pmatrix} 1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix} \\ |\vec{n}_1-\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} & |\vec{n}_2-\rangle &= \begin{pmatrix} -1/2 \\ \sqrt{3}/2 \end{pmatrix} & |\vec{n}_3-\rangle &= \begin{pmatrix} -\sqrt{3}/2 \\ 1/2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Calculemos la probabilidad p_{kl} de que al hacer pasar la primera partícula por $SG_{\vec{n}_k}$ y la segunda por $SG_{\vec{n}_l}$, ambos resultados sean +.



Hallemos primero p_{12} . Como ya hemos visto, si lo preferimos podemos escribir (2.16) como

$$(2.21) \quad |s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\vec{n}_1+\rangle \otimes |\vec{n}_1-\rangle - |\vec{n}_1-\rangle \otimes |\vec{n}_1+\rangle).$$

Haciendo el producto escalar con $|\vec{n}_1+\rangle \otimes |\vec{n}_2+\rangle$ se obtiene

$$(2.22) \quad p_{12} = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot 1 \cdot \langle \vec{n}_2 + | \vec{n}_1 - \rangle \right|^2 = \frac{1}{8}.$$

De la misma forma

$$(2.23) \quad p_{13} = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot 1 \cdot \langle \vec{n}_3 + | \vec{n}_1 - \rangle \right|^2 = \frac{3}{4} \quad \text{y} \quad p_{23} = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot 1 \cdot \langle \vec{n}_3 + | \vec{n}_2 - \rangle \right|^2 = \frac{1}{8}.$$

Aunque no usaremos el resto de los p_{kl} , es fácil ver que la simetría $p_{kl} = p_{lk}$ y $p_{kk} = 0$ permite hallar los demás sin ningún cálculo.

Supongamos ahora que la interpretación de Copenhague es falsa porque hay ciertas propiedades físicas desconocidas, las variables ocultas, que hacen que cada partícula tenga unos valores determinados del espín en las direcciones \vec{n}_1 , \vec{n}_2 y \vec{n}_3 independientes de la medición y previos a ella.

Dado un conjunto muy grande de parejas de partículas llamemos f_{+++} a la frecuencia relativa de los pares en los que la primera partícula tiene espín + en las tres direcciones y definamos frecuencias relativas similares para las otras combinaciones de signos, siempre referidas a la primera partícula.

Aunque no tengamos un método para estimar f_{+++} (según la mecánica cuántica esta cantidad no tiene sentido porque medir el primer + afecta a los otros), simplemente por ser cantidades no negativas, se cumple:

$$(2.24) \quad (f_{++-} + f_{+--}) \leq (f_{+-+} + f_{+--}) + (f_{++-} + f_{--+}).$$

Cuando el número de partículas es muy grande, el primer paréntesis aproxima la probabilidad de que el espín sea + en la dirección \vec{n}_1 y - en la \vec{n}_3 , pero esto último es lo mismo que decir que la segunda partícula tiene espín + en la dirección \vec{n}_3 . En resumen, el primer paréntesis aproxima p_{13} . Identificando de la misma forma los otros dos paréntesis, se tiene

$$(2.25) \quad p_{13} \leq p_{12} + p_{23}.$$

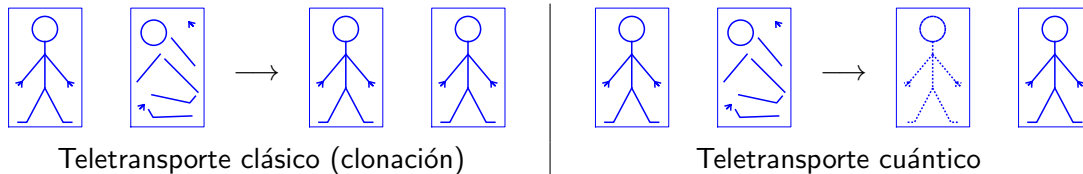
Éste es un ejemplo de *desigualdad de Bell* o *teorema de Bell* (curioso nombre para algo falso). Pero esto no es coherente con los cálculos anteriores $p_{13} = 3/4$ y $p_{12} = p_{23} = 1/8$ bajo la interpretación de Copenhague. Entonces, comprobando experimentalmente que (2.25) no es cierto con nuestra elección de los ejes (que no es crítica, valen otras) se descarta la posibilidad de que haya variables ocultas en el sentido indicado.

En principio el experimento es tan simple como usar muchas veces dos máquinas de Stern-Gerlach de la manera indicada en el esquema. Sin embargo, ya hemos indicado que a menudo los experimentos famosos de la mecánica cuántica son más mentales que reales. Una versión del experimento de verdad se llevó a cabo por primera vez ocho años después del artículo de Bell (aunque también es cierto que inicialmente este artículo recibió muy poca atención) y se empleó la polarización del fotón en lugar del espín de partículas.

2.6. Teletransporte

Muchas veces se dice que el *teletransporte* es un fenómeno cuántico imposible dentro de la física clásica pero eso es más bien fruto de nuestros prejuicios morales porque teletransportar a alguien conlleva un asesinato. Si quiero teletransportar a una persona P a la Luna, llevamos primero allí reservas de todos los átomos de los elementos que componen el cuerpo humano en todos los posibles estados. Después examinamos la posición y el estado de cada uno de los átomos que componen P , que son del orden de 10^{28} , enviamos esos datos a los operarios de la Luna y allí colocan átomos de sus reservas en las posiciones y estados indicados. Con ello se obtiene una persona P' en la Luna idéntica a P y sólo queda eliminar a P .

¿Lo anterior suena a broma? Pues recuérdalo cuando te hablen de teletransporte cuántico, porque es mucho más complicado desde el punto de vista práctico. Las mediciones alteran fundamentalmente los sistemas cuánticos y por tanto es imposible crear copias idénticas (incluso se enuncia un “teorema” de no clonación cuántica [NO08, §4.4]). Lo curioso es que usando de manera ingeniosa estados entrelazados de tres partículas se puede hacer que la tercera adquiera el estado de la primera antes de la medición, a pesar de que la medición destruye (colapsa) el estado de la primera. Además ¡el experimento se ha llevado a cabo en la práctica! (con fotones o partículas subatómicas). Es importante insistir en que, a pesar de lo que se lee a menudo, el teletransporte cuántico no es el teletransporte de la ciencia ficción: hay que tener previamente en el lugar de destino una partícula como la que se quiere teletransportar y hay que llamar a los operarios para darles información que permita modificar su estado. Si llamo a alguien para explicarle una receta ¿he teletransportado el plato que hay en mi mesa? Pues el teletransporte cuántico es como si tuviera que comerme primero mi plato para que otro lo pueda cocinar en otro lugar con mis indicaciones, incluso si yo no he aprendido la receta.



Vamos a centrarnos en la situación siguiente: Tenemos en la Tierra una partícula, la partícula 1, con cierto estado de espín

$$(2.26) \quad |\Psi\rangle = a|+\rangle + b|-\rangle$$

donde aquí y en lo sucesivo $|\pm\rangle$ abrevia $|z\pm\rangle$, y queremos que alguien en la Luna consiga poner una partícula 2 en el mismo estado (todo esto es teórico, todavía en los experimentos no se ha llegado a distancias tan largas, pero se han superado los 100 km).

El mundo cuántico va en nuestra contra para seguir el camino fácil porque cualquier medición hace que $|\Psi\rangle$ colapse a $|+\rangle$ o a $|-\rangle$ y entonces es imposible conocer a y b y mandárselos al compañero de la Luna.

El procedimiento requerirá desintegrar un mesón como en (2.16) de manera que salgan dos partículas de espín opuesto (en la práctica no se usan mesones), una de ellas se quedará en la Luna y será la partícula 2 y otra nos la quedamos en la Tierra, digamos que es la partícula 0. Preservando la ordenación 0, 1, 2, el estado del sistema de las tres partículas es

$$(2.27) \quad |T\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \otimes |\Psi\rangle \otimes |-\rangle - |-\rangle \otimes |\Psi\rangle \otimes |+\rangle),$$

donde se ha tomado en cuenta (2.16) y se supone que la partícula 1 es independiente de las otras.

Ahora nos inventamos los siguiente cuatro estados de espín para el sistema formado por las partículas 0 y 1:

$$(2.28) \quad \begin{aligned} |B_0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \otimes |-\rangle - |-\rangle \otimes |+\rangle), & |B_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \otimes |+\rangle - |-\rangle \otimes |-\rangle), \\ |B_2\rangle &= -\frac{i}{\sqrt{2}}(|+\rangle \otimes |+\rangle + |-\rangle \otimes |-\rangle), & |B_3\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle \otimes |-\rangle + |-\rangle \otimes |+\rangle). \end{aligned}$$

Estos estados son una base ortonormal del espacio de estados posibles de las partículas 0 y 1. No hay nada raro ni profundo en esta afirmación. Si los escribiéramos en coordenadas con respecto a la base ortonormal natural $\{|+\rangle \otimes |+\rangle, |+\rangle \otimes |-\rangle, |-\rangle \otimes |+\rangle, |-\rangle \otimes |-\rangle\}$, serían

$$(2.29) \quad |B_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |B_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad |B_2\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad |B_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ -1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

y está claro que estos son cuatro vectores de \mathbb{C}^4 ortonormales y por tanto forman una base ortonormal.

Un cálculo aburrido muestra que

$$(2.30) \quad |T\rangle = \frac{1}{2}(|B_0\rangle \otimes |\Psi\rangle + |B_1\rangle \otimes \sigma_1|\Psi\rangle + |B_2\rangle \otimes \sigma_2|\Psi\rangle + |B_3\rangle \otimes \sigma_3|\Psi\rangle)$$

donde σ_k son las matrices de Pauli (2.9), de hecho la manera de inventar (2.28) es para que se cumpla esta igualdad. Que sea aburrido da una excusa para no reproducirlo aquí pero al menos mostraremos el desarrollo del segundo sumando:

$$(2.31) \quad |B_1\rangle \otimes \sigma_1|\Psi\rangle = |B_1\rangle \otimes (b|+\rangle + a|-\rangle) = b|B_1\rangle \otimes |+\rangle + a|B_1\rangle \otimes |-\rangle$$

porque σ_1 intercambia coordenadas en (2.26). Sustituyendo la definición de $|B_1\rangle$ se obtiene

$$(2.32) \quad \frac{b}{\sqrt{2}}|+\rangle \otimes |+\rangle \otimes |+\rangle - \frac{b}{\sqrt{2}}|-\rangle \otimes |-\rangle \otimes |+\rangle + \frac{a}{\sqrt{2}}|+\rangle \otimes |+\rangle \otimes |-\rangle - \frac{a}{\sqrt{2}}|-\rangle \otimes |-\rangle \otimes |-\rangle.$$

Aunque no pruebe nada, nótese que el segundo y el tercer sumando de esta expresión aparecen al sustituir (2.26) en (2.27). Los otros dos sumandos se cancelarían si hiciéramos el resto de las operaciones en (2.30).

Por ser (2.28) una base, todos los estados posibles de las partículas 0 y 1 son de la forma $|E\rangle = \sum_{n=0}^3 c_n |B_n\rangle$. Pensemos que (2.28) son las autofunciones de un observable que se puede medir en la práctica y para el cual $|B_n\rangle$ tiene autovalor n , entonces al hacer una medición de $|E\rangle$, colapsará a algún $|B_n\rangle$ y nuestro aparato de medida marcará n . De esta forma, la consecuencia de que nosotros en la Tierra hagamos una medición sobre las partículas 0 y 1 que dé n es que el estado $|T\rangle$ colapsará a $|B_n\rangle \otimes |\Psi\rangle$ de acuerdo con (2.30).

Ahora llamamos a la Luna y decimos el n que hemos medido. Si es 0, la partícula 2 tendrá el estado $|\Psi\rangle$ y se ha terminado el teletransporte. Si es $n \neq 0$, le decimos a nuestro compañero en la Luna que aplique σ_n a su partícula, de esta forma $\sigma_n \sigma_n |\Psi\rangle = |\Psi\rangle$. Con ello la partícula 2, la suya, ha adquirido el estado (2.26) mientras que la que estaba en la Tierra, ha quedado alterada por la medición (pero no se desmaterializa como en la ciencia ficción).

Hay dos puntos que quedan poco claros para ser llevados a la práctica y son la existencia de un observable que permita medir en la base (2.28) y la posibilidad de que nuestra compañero pueda aplicar σ_n al estado de su partícula.

Pensemos en una partícula en un estado inicial arbitrario $a_0|+\rangle + b_0|-\rangle$ que evoluciona por la acción de algún campo y en un segundo pasa a ser $a_1|+\rangle + b_1|-\rangle$. La matriz que aplica (a_0, b_0) en (a_1, b_1) debe ser unitaria porque la probabilidad total $|a_k|^2 + |b_k|^2$ debe conservarse. Es posible imitar con precisión todas las matrices unitarias en la práctica usando campos adecuados. En particular, la aplicación de σ_n es factible. Dicho sea de paso, esto es de importancia capital en la *computación cuántica* pues la acción de ciertas matrices unitarias sustituye a las puertas lógicas de la computación tradicional (la segunda parte de [NO08] se dedica a la realización física de la computación cuántica). El problema con el observable es en realidad similar. Con una matriz unitaria, la base (2.28) se puede aplicar en la base ortonormal natural $\{|+\rangle \otimes |+\rangle, |+\rangle \otimes |-\rangle, |-\rangle \otimes |+\rangle, |-\rangle \otimes |-\rangle\}$ y en ella es fácil medir. Basta pasar cada una de las dos partículas por máquinas de Stern-Gerlach para decidir si son $|+\rangle$ o $|-\rangle$.

2.7. Algunos problemas resueltos

Ejemplo 1. El operador de espín en la dirección \vec{n} es $S_{\vec{n}} = \frac{\hbar}{2} \vec{n} \cdot \vec{\sigma}$ con la notación de (2.10). Veamos que realmente el espín en cualquier dirección sólo puede tomar los valores $\pm\hbar/2$.

En términos matemáticos esto significa que los autovalores de $S_{\vec{n}}$ son $\hbar/2$ y $-\hbar/2$ o, equivalentemente, que los de $\vec{n} \cdot \vec{\sigma}$ son 1 y -1 . Si miramos a la matriz de (2.10) vemos que tiene traza nula y determinante uno (porque el vector \vec{n} es unitario), entonces el polinomio característico es $\lambda^2 - 0\lambda - 1$ y por tanto $\lambda = \pm 1$ son los autovalores.

Ejemplo 2. Si dos vectores unitarios, \vec{a} y \vec{b} forman un ángulo de 10° , ¿cuál es la probabilidad de una partícula en el estado $|\vec{a}+\rangle$ sea detectada como $+$ por una máquina de Stern-Gerlach en la dirección \vec{b} ?

Por simetría se puede suponer que $\vec{b} = (1, 0, 0)$ y que \vec{a} tiene coordenadas esféricas con $\theta = 10^\circ$ y $\phi = 0$. Entonces, (2.12) implica $|\vec{a}+\rangle = \cos 5^\circ |z+\rangle + \sin 5^\circ |z-\rangle$ que al pasar por una máquina SGz dará $+$ con probabilidad $\cos^2 5^\circ = 0.996$.

En general, si forman ángulo α , el resultado será $\cos^2(\alpha/2)$ que es lo mismo que $(1 + \cos \alpha)/2$ y que $(1 + \vec{a} \cdot \vec{b})/2$. De este modo, la probabilidad depende del producto escalar.

Ejemplo 3. ¿Es el estado $2|z+\rangle \otimes |z+\rangle + |z+\rangle \otimes |z-\rangle + 4|z-\rangle \otimes |z+\rangle + 2|z-\rangle \otimes |z-\rangle$ un estado entrelazado? ¿Y el estado $2|z+\rangle \otimes |z+\rangle + |z+\rangle \otimes |z-\rangle + |z-\rangle \otimes |z+\rangle + 2|z-\rangle \otimes |z-\rangle$?

El primero se puede escribir como $(|z+\rangle + 2|z-\rangle) \otimes (2|z+\rangle + |z-\rangle)$, por tanto no está entrelazado. El segundo está entrelazado porque no se pueden ajustar los coeficientes de ninguna “factorización”. En general, $a_{11}|z+\rangle \otimes |z+\rangle + a_{12}|z+\rangle \otimes |z-\rangle + a_{21}|z-\rangle \otimes |z+\rangle + a_{22}|z-\rangle \otimes |z-\rangle$ es un estado entrelazado si y sólo si el determinante de la matriz $A = (a_{ij})_{i,j=1}^2$ es no nulo. Esto se puede comprobar directamente con cálculos con los coeficientes y también de la siguiente manera avanzada: Por dualidad, no es entrelazado si y sólo si la forma bilineal $f(\vec{u}, \vec{v}) = \vec{u} \cdot (A\vec{v})$ factoriza. esto significa que para alguna dirección \vec{v}_0 , $f(\vec{u}, \vec{v}_0)$ es idénticamente nula y esto equivale a que A no tenga núcleo.

Ejemplo 4. Hallar la matriz, en la base $\{|+\rangle \otimes |+\rangle, |+\rangle \otimes |-\rangle, |-\rangle \otimes |+\rangle, |-\rangle \otimes |-\rangle\}$, del observable empleado en el teletransporte que hace que se obtenga la medición n para cada $|B_n\rangle$ de (2.28).

Esto es lo mismo que encontrar una matriz M que tenga autovectores (2.29) con autovalores respectivos 0, 1, 2 y 3. Sea U la matriz unitaria formada por las coordenadas (2.29), entonces $M = UDU^{-1}$ donde D es la matriz con diagonal (0, 1, 2, 3). Utilizando que la traspuesta conjugada coincide con la inversa para matrices unitarias,

(2.33)

$$M = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & -i & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & -i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 \\ i & 0 & 0 & i \\ 0 & -1 & -1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 3 & 3 & 0 \\ 0 & 3 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}.$$

Ejemplo 5. ¿Qué afirma la relación de incertidumbre para los operadores S_x y S_y ?

Tomando $A = S_x$, $B = S_y$,

$$(2.34) \quad AB - BA = \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \frac{\hbar^2}{4} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{i\hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Esto es $i\hbar S_z$, por tanto la conclusión es $2\Delta S_x \Delta S_y \geq \hbar \langle S_z \rangle$.

3. Otros temas relacionados de física y matemáticas

➡ Si te has quedado con ganas de más, ésta es tu sección. No necesitas saber mucha más física o matemáticas, simplemente que te interesen los temas. Si estás dentro del grado de matemáticas verás detalles muy finos de ellos en diferentes cursos. Desafortunadamente, por la alergia de los matemáticos a la imprecisión, es poco probable que en esos cursos se ocupen demasiado de las ideas intuitivas y las motivaciones.

3.1. Todo es una onda

El *análisis armónico* o *análisis de Fourier* es una parte del análisis matemático que en diferentes contextos se ocupa de la descomposición de funciones en ondas elementales, a veces conocidas como *armónicos* o *tonos puros*, sobre todo en la literatura física.

Para ilustrar diferentes manifestaciones de esta idea partimos de la humilde igualdad que se reduce a sumar una serie geométrica:

$$(3.1) \quad \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N e^{2\pi i m n / N} = \delta(n) \quad \text{donde} \quad \delta(n) = \begin{cases} 1 & \text{si } n \equiv 0 \pmod{N} \\ 0 & \text{si } n \not\equiv 0 \pmod{N} \end{cases}$$

Consideremos una función $f : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{C}$ de periodo N , sustituyendo esta relación en la fórmula trivial $f(n) = \sum_{m=1}^N f(m) \delta(n - m)$, tras invertir el orden de sumación, se concluye

$$(3.2) \quad f(n) = \frac{1}{N} \sum_{m=1}^N \hat{f}(m) e^{2\pi i m n / N} \quad \text{donde} \quad \hat{f}(n) = \sum_{m=1}^N f(m) e^{-2\pi i m n / N}.$$

Con ello conseguimos escribir cualquier $f : \mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{C}$ de periodo N como superposición de ondas discretas. Aunque esto parezca demasiado simple, es crucial en muchísimas aplicaciones ingenieriles, sobre todo con la ubicuidad de las señales digitales. Muchas de ellas utilizan un filtrado de frecuencias para limpiar la señal o comprimirla.

Si ahora suponemos que N es muy grande, m/N dará lugar a puntos muy próximos en el intervalo unidad y cabe esperar que en el límite estén bien representados por una variable continua. Esta idea, junto con la aproximación de integrales mediante sumas de Riemann, sugiere que “toda” $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ de periodo 1 tiene un *desarrollo de Fourier*

$$(3.3) \quad f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{f}(n) e^{2\pi i n x} \quad \text{donde} \quad \hat{f}(n) = \int_0^1 f(x) e^{-2\pi i n x} dx.$$

La duplicidad de la notación $\hat{f}(n)$ con (3.2) es habitual e intencionada y enseguida se agravará. Durante parte del siglo XIX y del XX se estuvo delimitando cuál era el conjunto natural en

el que trabajar para que “todas” las funciones fueran desarrollables, lo que llevó a plantearse el propio concepto de función. Todavía en los cursos actuales de análisis de Fourier [DM72], [Kör88], desempeña un papel central, entender hasta qué punto se puede estirar la veracidad del desarrollo de Fourier. No es muy conocido que la contribución fundamental de Heisenberg a la mecánica cuántica estuvo inicialmente ligada a una operación algebraica de multiplicación de series de Fourier [SR05] [vdW67].

La integral de (3.3) se pueden calcular sobre $[-1/2, 1/2]$ en lugar de sobre $[0, 1]$ porque el integrando tiene periodo 1. Con un cambio $x \mapsto x/T$ el intervalo de integración de integración será $[-T/2, T/2]$ y si pensamos que para T grande los valores de n/T están representados por una variable continua ξ , un argumento como el anterior sugiere que para $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ se tiene

$$(3.4) \quad f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{f}(\xi) e^{2\pi i \xi x} d\xi \quad \text{donde} \quad \widehat{f}(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-2\pi i \xi x} dx.$$

A esta fórmula se le llama *fórmula de inversión* y a \widehat{f} se le llama *transformada de Fourier* de f y fue introducida por el propio Fourier en [Fou88]. Por supuesto, aunque f sea muy suave, simplemente para que $\widehat{f}(\xi)$ tenga sentido ya se necesita algún decaimiento.

▼ Obviamente, (3.2) se cumple incondicionalmente pues es una identidad algebraica. Fourier no supo probar (3.3) ni (3.4), con el rigor actual, aunque dio serios indicios para esta fórmulas. Como resumen de algunos resultados [DM72], (3.3) es cierta para $f \in C^1$ con convergencia uniforme de la serie, si $f \in C^2$ la convergencia es de hecho absoluta. Respecto a (3.4) es cierta por ejemplo para $f \in C^2$ tal que $|f^{(k)}(x)| |x|^{1+\epsilon} \rightarrow 0$, $k = 0, 1, 2$ cuando $x \rightarrow \infty$. En el lado malo, hay funciones continuas para las que la igualdad en (3.3) falla para infinitos valores. Parte del juego matemático es cambiar el sentido de la suma o de la convergencia para que los contraejemplos desaparezcan. Así (3.3) es cierta para toda $f \in L^2[0, 1]$ si se entiende la convergencia de la serie en sentido L^2 y es verdad para cualquier f continua si calculamos la suma haciendo promedios de sumas parciales.

Las fórmulas (3.2), (3.3) y (3.4) son diferentes maneras de decir que “todo” es una onda, con diferentes “todos”. Pero no son ni mucho menos generales, no pasan de ser ejemplos de un fenómeno más general en el que los armónicos son autofunciones de ciertos operadores sencillos.

Para finalizar, descartando las sutilezas de la regularidad, veamos cómo deducir de (3.3) que las funciones $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{C}$ con $f(0) = f(1) = 0$ se escriben como una “combinación lineal” de $\sin(\pi n x)$, un hecho que apareció en §1.2 a través de (1.6).

Consideremos la función $g(x)$ de periodo 1 que cumple $g(x) = f(2x)$ si $x \in [0, 1/2]$ y $g(x) = -f(-2x)$ si $x \in [-1/2, 0]$. De la antisimetría no es difícil deducir que $\widehat{g}(n) = -\widehat{g}(-n)$. Entonces por (3.3) y utilizando (1.2), se tiene

$$(3.5) \quad g(x) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \widehat{g}(n) \sin(2\pi n x) \quad \text{que implica} \quad f(x) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \widehat{g}(n) \sin(\pi n x) \quad \text{para } x \in [0, 1].$$

Si siguiéramos el rastro a la fórmula para $\widehat{g}(n)$ llegaríamos a la obtenida para c_n en (1.11).

3.2. Análisis funcional: el álgebra lineal a lo grande

Las exposiciones modernas más formales del álgebra lineal no excluyen el caso de dimensión infinita pero evitando posibles problemas de convergencia: las combinaciones lineales admisibles siguen siendo finitas. Cuando no se eluden estos problemas, necesariamente hay que contemplar temas de análisis y el álgebra lineal se transforma en *análisis funcional*.

Un ámbito de estudio común en el análisis funcional son los *espacios de Banach* que son espacios vectoriales con una *norma* (una manera de medir con ciertas propiedades básicas) y que tienen la propiedad de que sucesiones de vectores que se apalotan siempre tienen un límite (se dice que el espacio es *completo* porque significa algo así como que al espacio no le falten vectores que puedan ser límites de sucesiones). Dentro de los espacios de Banach, los operadores importantes son los operadores lineales acotados, aquí la acotación significa que existe una constante K tal que $\|A\vec{x}\| \leq K\|\vec{x}\|$ para todo \vec{x} , donde $\|\cdot\|$ representa la norma.

En el ámbito de los espacios de Banach sobre \mathbb{C} , que para algunos matemáticos es ya demasiado específico, una gran parte de los resultados que cabría esperar con la intuición del álgebra lineal fallan (por ejemplo que todo operador tenga al menos un autovector), esencialmente por culpa de la dimensión infinita. Incluso con tan poca estructura, el análisis funcional ha tenido éxito en sus aplicaciones, especialmente en las ecuaciones en derivadas parciales. Gracias, sobre todo, a J. von Neumann su formalismo entró de lleno en la formulación de la física cuántica desde muy temprano [VH58].

En el ámbito cuántico lo natural es trabajar en *espacios de Hilbert*, que son espacios de Banach en los que la norma viene de un producto escalar. La razón para ello es que en física cuántica, como hemos visto, queremos que los operadores tengan autovalores y autofunciones y justamente en espacios de Hilbert tenemos un *teorema espectral*. Esto significa que hay un análogo del resultado que afirma que toda matriz simétrica, o hermitica en el caso complejo, diagonaliza en una base ortonormal. Además los autovalores son reales. Si $\{\vec{v}_1, \dots, \vec{v}_n\}$ es la base ortonormal de autovectores con autovalores respectivos $\{\lambda_1, \dots, \lambda_n\}$, entonces se debe tener

$$(3.6) \quad A\vec{x} = \sum_{k=1}^n \lambda_k (\vec{v}_k \cdot \vec{x}) \vec{v}_k.$$

De esta forma $A\vec{v}_k = \lambda_k \vec{v}_k$. El teorema espectral generaliza esta igualdad.

Antes de seguir, para no engañar a nadie, hay que dejar claro que, a pesar de los esfuerzos de von Neumann, rara vez en física se apela a enunciados concretos del teorema espectral verificando sus hipótesis. Simplemente se da por hecho que en los casos con relevancia física las cosas van bien (en [GP78] hay un esfuerzo por preservar el rigor), al igual que nadie para calcular la velocidad estudia si el espacio es derivable. Por otro lado, el análisis funcional tiene

multitud de contraejemplos y sutilezas por su estrecha relación con el infinito. Estas razones motivan que aquí nos contentemos con un par de ejemplos simples para ilustrar el teorema espectral.

Un operador en un espacio de Hilbert es autoadjunto (los observables de la física cuántica) si $(A\vec{x}) \cdot \vec{y} = \vec{x} \cdot (A\vec{y})$. En realidad hay una diferencia entre simétrico y autoadjunto pero una anécdota entre el matemático K. Friedrichs y Heisenberg muestra que este último no sabía la diferencia y por tanto no es crucial para el tema que nos ocupa. Una versión del teorema espectral afirma que (3.6) funciona con $n = \infty$ para A autoadjunto si además A es un *operador compacto*, esto significa que es límite de operadores de rango finito, algo así como un límite de matrices. Si A no es compacto, el teorema espectral asegura que todavía se salva algo parecido a (3.6) pero trabajando con una especie de autovectores que no están en el espacio de Hilbert de partida y que obligan a cambiar la suma por una integral.

Veamos dos ejemplos que involucran el operador derivada segunda, $Af = f''$. Si trabajamos con las funciones de periodo uno (ya aquí surge un problema, el espacio de Hilbert debería ser $L^2[0, 1]$ pero ahí casi nada es derivable, el matemático antes citado, Friedrichs inventó una solución general a este problema). Las autofunciones son $f_n(x) = e^{2\pi i n x}$ con $n \in \mathbb{Z}$ y autovalores $\lambda_n = -4\pi^2 n^2$. A pesar de que A no es compacto, ni siquiera es acotado, (3.6) se generaliza a este caso obteniéndose

$$(3.7) \quad Af = f'' = -4\pi^2 \sum_{n \in \mathbb{Z}} n^2 \langle f_n | f \rangle f_n,$$

lo cual es una consecuencia de (3.3), de hecho equivalente.

Pensemos ahora en el mismo problema pero trabajando sin la condición de periodicidad. Entonces $f_\xi(x) = e^{2\pi i \xi x}$ con $\xi \in \mathbb{R}$ son en algún sentido autofunciones con autovalor $\lambda_\xi = -4\pi^2 \xi^2$ pero como $\langle f_\xi | f_\xi \rangle = \int_{\mathbb{R}} 1 dx = \infty$ no están en el espacio de Hilbert. Tampoco hay manera de respetar la suma de (3.6) porque los autovalores forman un conjunto no numerable. Sin embargo, derivando dos veces (3.4), se tiene que al menos para f “buena”,

$$(3.8) \quad Af = f'' = -4\pi^2 \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 \langle f_\xi | f \rangle f_\xi d\xi.$$

Esto es similar a (3.6) sustituyendo sumas por integrales.

En los casos como el del primer ejemplo, en que hay un conjunto discreto de autovalores y autovectores “de verdad”, se dice que hay *espectro discreto*, mientras que en el segundo se dice que hay *espectro continuo*. Ambas situaciones pueden coexistir y esto es lo que ocurre en el átomo de hidrógeno: cuando el electrón deja de estar ligado al átomo todas las energías son posibles.

▼ Sin entrar en detalles, el artificio matemático que utiliza la formulación del teorema espectral para contemplar al tiempo sumas e integrales y no hablar de autovectores que no están en el

espacio, es la *medida espectral*. El enunciado del teorema es $A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE_{\lambda}$ donde E_{λ} es una proyección ortogonal. En el espectro discreto E_{λ} varía a saltos y la integral se transforma en una suma. Esto es análogo a que si s es la función signo, $f(\pm\infty) = 0$ y confiamos ciegamente en la integración por partes, $\int_{-\infty}^{\infty} f ds = -\int_{-\infty}^{\infty} s df = \int_{-\infty}^0 df - \int_0^{\infty} df = 2f(0)$. Así que ds debiera representar el doble de la delta de Dirac. Con más saltos se obtiene la suma de f en más puntos.

3.3. La famosa ecuación de Schrödinger

Aunque Schrödinger no la inventó exactamente de esta forma [GP78], lo que expresa su famosa ecuación es el convencimiento de que todas las “ondas de materia” Ψ , o como queramos llamarlas, son superposiciones de (1.1) que satisfacen la conservación de la energía. ¿Recuerdas qué era eso? Sí, lo de energía cinética más energía potencial igual a energía total, que se escribe como

$$(3.9) \quad E = \frac{p^2}{2m} + V \quad (\text{nota: } \frac{p^2}{2m} = \frac{(mv)^2}{2m} = \frac{1}{2}mv^2 = E_c).$$

Si $\Psi = \sum_n c_n e^{i(p_n x - E_n t)/\hbar}$, derivando una vez con respecto del tiempo hacemos que baje la energía y derivando dos con respecto del espacio, que baje el cuadrado del momento. Empleando (3.9) con $p = p_n$ y $E = E_n$ (la energía potencial V indica el campo en el espacio ambiente y debería ser común) se tiene la *ecuación de Schrödinger*

$$(3.10) \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi.$$

En tres dimensiones se sustituye $\partial^2 \Psi / \partial x^2$ por el laplaciano $\Delta \Psi$. Ésta es una flamante *ecuación en derivadas parciales* que tiene de peculiar, con respecto a otras que se estudian en los grados de matemáticas, un coeficiente complejo. No hay que hacer filosofía barata de ello (¿los números complejos existen?), porque si nos empeñamos, podríamos escribir dos EDP reales separando partes reales e imaginarias y olvidarnos de i totalmente. El problema es que todo sería más feo.

Ahora surge una pregunta natural: si sólo queremos decir $\Psi = \sum_n c_n e^{i(p_n x - E_n t)/\hbar}$, ¿qué necesidad hay de escribir esta ecuación tan complicada? Pues porque, aunque no lo parezca, (3.10) es más manejable y contiene una información más precisa. Por ejemplo, la función

$$(3.11) \quad \Psi(x, t) = \frac{e^{i(x-t)/\hbar}}{(2\pi)^{1/4} \sqrt{1/2 + i\hbar t}} e^{-(x-t)^2/(1+2i\hbar t)}$$

es una solución de la ecuación de Schrödinger (3.10) con $V = 0$. Es lo que se llama un *paquete de ondas gaussiano* y representa la función de onda de una partícula difusa de tamaño medio comparable a 1 que se mueve con velocidad 1 en la dirección positiva del eje X . ¿Dónde están aquí los p_n y los E_n ? Muy escondidos. Habría que pensar en ellos como cantidades

continuas y en la fórmula anterior como un límite de $\sum c_n e^{i(p_n x - E_n t)/\hbar}$ en el que la suma pasa a ser una integral. Demasiado complicado. Trabajar con desarrollos de este tipo estropearía la información que obtenemos a golpe de vista de que $|\Psi|^2$ es despreciable si x y t son muy distintos, y que cuando t se hace gigantesco, Ψ se extiende por todas partes.

▼ Si el lector ha seguido un curso de ecuaciones en derivadas parciales, quizá encuentre interesante la idea vaga de que la ecuación de Schrödinger es en parte como la ecuación de ondas, porque hay transmisión de ondas, y en parte como la del calor porque a la larga hay difusión. Formalmente es como la ecuación del calor con tiempo imaginario

¿Cómo se resuelve la ecuación de Schrödinger? Hay un procedimiento que en matemáticas se llama *separación de variables* y que permite en ocasiones escribir la solución en una forma simplificada de $\sum c_n e^{i(p_n x - E_n t)/\hbar}$, en cierto modo agrupando todos los p_n que dan la misma E_n . Supongamos que la solución Ψ de (3.10) tuviera una energía E bien definida, esto es, que fuera de la forma $\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-itE/\hbar}$, entonces al sustituir se deduce

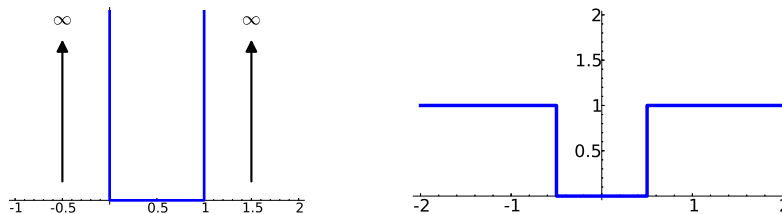
$$(3.12) \quad \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0,$$

que es lo que se llama *ecuación de Schrödinger independiente del tiempo*. Retomando la notación de §1.8 esto se puede escribir como $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$. Entonces sus soluciones son autofunciones de un operador autoadjunto y si el teorema espectral funciona muy bien (ver §3.2), formarían una “base” ortonormal $\{\psi_n\}_{n=1}^{\infty}$ que permitiría generar mediante combinaciones lineales todas las posibles elecciones de condiciones iniciales $\Psi(x, 0)$. Los autovalores E_n darían los valores de la energía E y, en definitiva, la solución general de (3.10) sería

$$(3.13) \quad \Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar},$$

lo cual generaliza (1.6). Por ejemplo, el átomo de hidrógeno (1.14) se obtiene con esta idea tomando como V el potencial de Coulomb correspondiente al campo eléctrico del núcleo.

Para ilustrar el método, vamos a resolver, o más bien esbozar, dos problemas: los llamados *pozo de potencial infinito* y *pozo de potencial finito*. Corresponden, respectivamente a las siguientes elecciones de la función $V = V(x)$



Estos y otros potenciales infinitos o con singularidades no existen en la práctica, sin embargo es muy conveniente considerarlos en la ecuación de Schrödinger porque dan algunas soluciones matemáticas exactas y son idealizaciones de situaciones físicas. Si nos fijamos en (3.12), partiendo de que ψ es más regular que ψ'' , cada singularidad de $V\psi$ debe ser cancelada con una de la derivada segunda. Así cuando V tiene discontinuidades de salto, ψ' debe ser una función con picos como el valor absoluto o ψ debe anularse. Si $V = \infty$ en un intervalo, la derivada segunda no puede compensar la singularidad y debe tenerse $\psi = 0$.

Como curiosidad, en el caso tridimensional, el de verdad, la influencia de las singularidades de V es más crítica, por ejemplo, el pozo de potencial infinito en dimensión 3 se vuelve un problema matemático de difícil interpretación física y se resiste a ser visto como un límite de potenciales crecientes.

En el primer ejemplo, por lo dicho, se debe tener $\psi = 0$ excepto para $0 < x < 1$ y (3.12) y los valores en los extremos conducen a

$$(3.14) \quad \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0, \quad \psi(0) = \psi(1) = 0.$$

Las soluciones son $\psi(x) = A \sin(\pi n x)$ y los posibles valores de E son $E_n = (n\pi\hbar)^2/2m$. Simplemente hemos repetido (1.24) obteniendo de nuevo (1.6).

En el segundo ejemplo, la ecuación es similar en la región central $-1/2 < x < 1/2$ pero ahora no tenemos las condiciones de los extremos y sólo podemos decir que las soluciones son del tipo $A \cos(\beta x)$ y $A \sin(\beta x)$ con $\beta = \sqrt{2mE}/\hbar$ pero sin poder determinar E por ahora (se puede probar que $E < 0$ no corresponde a ninguna solución no trivial). En las regiones $x < -1/2$ y $x > 1/2$, la ecuación es

$$(3.15) \quad \psi'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - 1)\psi = 0.$$

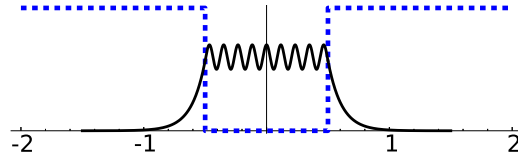
Si $E \geq 1$ las soluciones no decaen en el infinito, entonces suponemos $0 \leq E < 1$ y se tiene que las soluciones de esta ecuación son $Be^{\kappa x}$ para $x < -1/2$ y $Be^{-\kappa x}$ para $x > 1/2$, donde $\kappa = \sqrt{2m(1 - E)}/\hbar$. Pero seguimos sin determinar E , para hacerlo hay que imponer la continuidad de la derivada primera. Por ejemplo, si queremos que los trozos $A \cos(\beta x)$ y $Be^{-\kappa x}$ cuadren en $x = 1/2$, debe cumplirse

$$(3.16) \quad \begin{cases} A \cos(\beta/2) = Be^{-\kappa/2} \\ -A\beta \sin(\beta/2) = -B\kappa e^{-\kappa/2}. \end{cases}$$

De aquí $\beta \tan(\beta/2) = \kappa$. Si uno quiere verlo así, esta ecuación establece que el determinante del sistema anterior lineal en A y B sea nulo para que tenga soluciones no triviales.

Con un ordenador se pueden aproximar los valores de E que resuelven esta ecuación trascendente, a los que hay que unir los que corresponden a $A \sin(\beta x)$, que conduce a $-\beta = \kappa \tan(\beta/2)$.

Aunque no tengamos una solución explícita y no nos entretengamos en hacer aproximaciones, hay una consecuencia que es interesante desde el punto de vista físico. El aspecto cualitativo (no a escala) de las ψ resultantes es:



con un decaimiento exponencial mucho más abrupto del indicado en la figura. Aún así vemos que la función de onda entra en las zonas $|x| > 1/2$ y por tanto es posible detectar la partícula que representa allí. Sin embargo desde el punto de vista clásico, para energías $0 \leq E < 1$ es imposible estar en zonas con $V = 1$ porque la energía cinética en (3.9) es siempre positiva. Es decir, que en el mundo cuántico es posible atravesar barreras de potencial prohibidas clásicamente. Eso es lo que se llama el *efecto túnel* y tiene diversas aplicaciones [Mor10, §3.3.2]. Es tan raro en el contexto clásico como decir que tenemos cierta probabilidad de atravesar un muro al apoyarnos contra él [Gri13].

¿Qué ocurre cuando $E > 1$? clásicamente la partícula puede estar en cualquier sitio y cuánticamente se tiene una situación en la que hay espectro continuo, lo que se traduce en que los valores de la energía dejan de estar cuantizados.

3.4. La ecuación de Dirac

Cuando Schrödinger creó su ecuación para los electrones atómicos, en primer lugar intentó que fuera relativista pero como lo que le salía no cumplía sus expectativas de explicar ciertos resultados de la espectroscopía, se quedó con la ecuación (3.10) que es coherente con la fórmula clásica (3.9).

La forma relativista de la ecuación de Schrödinger para electrones libres fue introducida en 1928 por Dirac (la teoría cuántica relativista genérica es mucho más tardía y depende de a quien preguntes te puede decir que no está terminada). Esta ecuación tiene una importancia capital en el desarrollo posterior de la física cuántica pero entrar en sus implicaciones e interpretaciones físicas sería demasiado complicado. Aquí nos centraremos en algunos problemas algebraicos relacionados con ella.

Si (3.10) salió de (3.9), parece que su versión relativista debería obtenerse análogamente pero reemplazando (3.9) por la fórmula de la energía relativista, que es

$$(3.17) \quad E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$$

con c la velocidad de la luz [Sch09]. Para $p = 0$ esto conduce al $E = mc^2$ que todos conocemos. Si seguimos pensando en $e^{i(px-Et)/\hbar}$ como las ondas básicas y hacemos un argumento similar

al que condujo a (3.10), la ecuación de Schrödinger para electrones libres (el potencial es nulo) sería lo que se llama la *ecuación de Klein-Gordon*

$$(3.18) \quad -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -\hbar^2 c^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + m_e^2 c^4 \Psi.$$

Hay dos cosas malas en esta ecuación. La primera es que conocer la función de onda Ψ en un instante no es suficiente para determinarla en el instante siguiente. La derivada segunda con respecto del tiempo indica que debemos conocer también su “velocidad” $\partial\Psi/\partial t$ en dicho instante para saber como evoluciona, lo cual choca con la interpretación anterior que teníamos de función de onda. El segundo problema con (3.18) es más drásticamente incompatible con esta interpretación y consiste en que $\int |\Psi|^2 dx$ no se conserva. Eso impide que $|\Psi|^2$ represente una probabilidad. La solución natural es preguntar a alguien que sepa suficientes matemáticas, qué se conserva en (3.18) y tomarlo como probabilidad total. La cantidad conservada es

$$(3.19) \quad \int \left(\bar{\Psi} \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} \right) dx.$$

Buen intento, pero nada asegura que el integrando sea positivo. ¿Cómo podríamos aceptar probabilidades negativas? Además la dependencia en la derivada con respecto del tiempo se muestra de nuevo extraña.

Dirac tuvo una idea alucinante para resolver estos problemas que a pesar de ser totalmente algebraica y artificial, funciona y cuadra con resultados experimentales (insistimos en que más que en sus implicaciones físicas, que son importantes pero complicadas, nos fijamos aquí en el problema algebraico). Por lo anterior, parece que las dificultades de (3.18) provienen de la derivada segunda con respecto de t , entonces Dirac pensó (según la leyenda mientras estaba mirando al fuego en Cambridge) que podía *factorizar* la ecuación para obtener otra con derivadas primeras. El gran problema es que (3.18) no se puede factorizar con “números normales”, pero a Dirac no le importó inventar “números raros”.

El álgebra nació de la necesidad de resolver ecuaciones. En algún momento se consideró interesante que $x^2 + 1 = 0$ tuviese soluciones imaginarias $\pm i$, correspondientes a la factorización $x^2 + 1 = (x - i)(x + i)$. Con \mathbb{C} uno puede factorizar todos los polinomios de una variable (teorema fundamental del álgebra) y eso parece que acaba con nuestras necesidades numéricas. Sin embargo, hay números más “imaginarios” todavía, a veces llamados *números hipercomplejos*. Los más famosos son los *cuaterniones* de W.R. Hamilton, expresiones del tipo $a + b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k}$ sujetas a las leyes asociativa y distributiva con $a, b, c, d \in \mathbb{R}$ y donde \mathbf{i} , \mathbf{j} y \mathbf{k} son símbolos formales que satisfacen $\mathbf{i}^2 = \mathbf{j}^2 = \mathbf{k}^2 = \mathbf{ijk} = -1$. Hamilton pensó que los cuaterniones revolucionarían la física matemática e hizo un gran esfuerzo por introducirlos, especialmente en óptica y mecánica, pero perdieron la batalla frente a los vectores de la posterior álgebra lineal.

Cuanto más números tengamos, más podemos factorizar. Por ejemplo, $x^2 + y^2$ se factoriza en $\mathbb{C}[x, y]$ como $(x - iy)(x + iy)$ pero no hay una factorización con números complejos de

$x^2 + y^2 + z^2 + t^2$. Sin embargo, utilizando cuaterniones se tiene

$$(3.20) \quad x^2 + y^2 + z^2 + t^2 = (x + y\mathbf{i} + z\mathbf{j} + t\mathbf{k})(x - y\mathbf{i} - z\mathbf{j} - t\mathbf{k}).$$

A pesar de que los cuaterniones se inventaron en 1843, esta relación está estrechamente ligada a otra con consecuencias aritméticas introducida en 1748 por L. Euler.

Todo esto de los números imaginarios que no se ven la vida corriente suena muy místico, pero hay una forma de hablar de ellos a un estudiante de álgebra lineal empleando sólo números reales. Consideremos por ejemplo las matrices

$$(3.21) \quad \mathcal{U} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathcal{I} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Se cumple $\mathcal{I}^2 = -\mathcal{U}$ y en general $(a\mathcal{U} + b\mathcal{I})(c\mathcal{U} + d\mathcal{I}) = (ac - bd)\mathcal{U} + (ad + bc)\mathcal{I}$. Entonces se tiene un isomorfismo entre \mathbb{C} y la imagen de la siguiente aplicación, que da el isomorfismo,

$$(3.22) \quad \phi : x + yi \mapsto x\mathcal{U} + y\mathcal{I} = \begin{pmatrix} x & -y \\ y & x \end{pmatrix}.$$

En palabras menos técnicas, me puedo olvidar de los números complejos y trabajar siempre con matrices como las indicadas y no notaré la diferencia. En el caso de los cuaterniones el isomorfismo es el que pasa 1, \mathbf{i} , \mathbf{j} y \mathbf{k} , respectivamente, a

$$(3.23) \quad \mathbf{1} = \begin{pmatrix} \mathcal{U} & O \\ O & \mathcal{U} \end{pmatrix}, \quad \mathbb{I} = \begin{pmatrix} \mathcal{I} & O \\ O & -\mathcal{I} \end{pmatrix}, \quad \mathbb{J} = \begin{pmatrix} O & \mathcal{U} \\ -\mathcal{U} & O \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \mathbb{K} = \begin{pmatrix} O & \mathcal{I} \\ \mathcal{I} & O \end{pmatrix}$$

donde O es la matriz nula 2×2 . Si admitimos \mathbb{C} , podríamos sustituir \mathcal{U} por 1, \mathcal{I} por i y O por 0. En general, con matrices podemos representar todos los “números raros” que se nos ocurran, incluso todos los grupos finitos (y crear el álgebra que corresponde a cada uno).

Estas ideas nos animan a llevar a cabo el proceso de factorización de (3.18) usando matrices. Ciertamente es arriesgado pensar que sea posible dar significado físico coherente al resultado y el lector tiene que aceptar que esto es así o buscar en la bibliografía [Mor10, §12.3], [KP09, §17.2]. La ecuación (3.18) es un modelo unidimensional en espacio y para que las cosas se ajusten a nuestro espacio físico, la derivada segunda con respecto de x debería sustituirse por $\Delta\Psi$, es decir acompañarse por las derivadas segundas respecto de y y z . Siguiendo una tradición en relatividad, escribiremos $(x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$ y $x_4 = ct$. Con ello tomamos como punto de partida la siguiente versión simétrica (sobre todo si uno sabe relatividad) de (3.18)

$$(3.24) \quad \frac{m_e^2 c^2}{\hbar^2} \Psi + \sum_{\nu=0}^3 \eta_\nu \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_\nu^2} = 0 \quad \text{con} \quad \eta_0 = 1, \quad \eta_1 = \eta_2 = \eta_3 = -1.$$

Queremos que factorice en algo con derivadas de primer orden y preferimos dos factores iguales porque en otro caso tendríamos que decir por qué uno de ellos no es físicamente admisible. Entonces buscamos matrices Γ_ν tales que el primer miembro de (3.24) sea

$$(3.25) \quad \left(\frac{m_e c}{\hbar} I + \sum_{\nu=0}^3 \Gamma_\nu \frac{\partial}{\partial x_\nu} \right) \left(\frac{m_e c}{\hbar} I + \sum_{\nu=0}^3 \Gamma_\nu \frac{\partial}{\partial x_\nu} \right) \Psi$$

interpretando I como la matriz identidad que se asocia a 1. Al desarrollar esta expresión e igualar al primer miembro de (3.24), se siguen las condiciones

$$(3.26) \quad \Gamma_0^2 = -I, \quad \Gamma_1^2 = \Gamma_2^2 = \Gamma_3^2 = I \quad y \quad \Gamma_\nu \Gamma_\mu = -\Gamma_\mu \Gamma_\nu \quad \text{si } \mu \neq \nu.$$

Esto casi permite identificar $i\Gamma_\nu$ para $\nu = 0, 1, 2$ y 3 con $1, \mathbf{i}, \mathbf{j}$ y \mathbf{k} de los cuaterniones y usar (3.23) para formar una solución, pero falla que 1 conmuta con el resto.

Como no nos asustan los números complejos y preferimos dimensiones pequeñas, admitimos que Γ_ν sean matrices complejas. En ese caso, hay soluciones de (3.26) a partir de dimensión 4. Para esta dimensión una de las soluciones más simétricas (el resto son equivalentes) es

$$(3.27) \quad \Gamma_0 = \begin{pmatrix} -i\mathcal{U} & O \\ O & i\mathcal{U} \end{pmatrix}, \quad \Gamma_k = \begin{pmatrix} O & -i\sigma_k \\ i\sigma_k & O \end{pmatrix} \quad \text{con } k = 1, 2, 3$$

donde $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ son las matrices de Pauli (2.9) y \mathcal{U} es como en (3.21).

Sólo unas breves consideraciones acerca de la interpretación física. Ahora la función de onda es un vector en \mathbb{C}^4 (muchas veces se dice que es un *espinor*). Su norma al cuadrado se puede considerar una probabilidad porque hay una ley de conservación para ella (y es positiva). Dos de las coordenadas de Ψ guardan ciertas simetrías con las otras dos, lo que se asimila a la existencia del *positrón*, la *antipartícula* del electrón, mientras que el par de coordenadas que corresponde a cada partícula, frente a la función escalar de la ecuación de Schrödinger, se interpreta como la explicación teórica de la existencia del espín del electrón.

Referencias

- [Bel64] J. Bell. On the Einstein Podolsky Rosen Paradox. *Physics*, 1(3):195–200, 1964.
- [Bel90] J. Bell. Against ‘measurement’. *Physics World*, August:33–41, 1990.
- [BM08] S. Baselga Moreno. *Dirac. La belleza matemática*. Nivola libros y ediciones, 2008.
- [DM72] H. Dym and H. P. McKean. *Fourier series and integrals*. Academic Press, New York-London, 1972. Probability and Mathematical Statistics, No. 14.

- [EPR35] A. Einstein, B. Podolsky, and N. Rosen. Can quantum mechanical description of physical reality be considered complete? *Phys.Rev.*, 47:777–780, 1935.
- [FLS65] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands. *The Feynman lectures on physics. Vol. 3: Quantum mechanics*. Addison-Wesley Publishing Co., Inc., Reading, Mass.-London, 1965.
- [Fou88] J. Fourier. *Théorie analytique de la chaleur*. Éditions Jacques Gabay, Paris, 1988. Reprint of the 1822 original.
- [GP78] A. Galindo and P. Pascual. *Mecánica cuántica*. Alhambra, Madrid, 1978.
- [Gri13] D. J. Griffiths. *Revolutions in twentieth-century physics*. Cambridge University Press, Cambridge, 2013.
- [JQ93] A. Jaffe and F. Quinn. “Theoretical mathematics”: toward a cultural synthesis of mathematics and theoretical physics. *Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.)*, 29(1):1–13, 1993.
- [Kör88] T. W. Körner. *Fourier analysis*. Cambridge University Press, Cambridge, 1988.
- [KP09] K. Konishi and G. Paffuti. *Quantum mechanics. A new introduction*. Oxford University Press, Oxford, 2009.
- [Lal12] F. Laloë. *Do we really understand quantum mechanics?* Cambridge University Press, Cambridge, 2012. With a foreword by Claude Cohen-Tannoudji.
- [Mor10] J. C. Morrison. *Modern Physics for Scientists and Engineers*. Academic Press, 2010.
- [NO08] M. Nakahara and T. Ohmi. *Quantum computing*. CRC Press, Boca Raton, FL, 2008. From linear algebra to physical realizations.
- [Sch09] B. F. Schutz. *A first course in general relativity*. Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2009.
- [SR05] J. M. Sánchez-Ron. *Historia de la física cuántica. vol. 1: El periodo fundacional (1860-1926)*. Drakontos. Crítica, D.L.2001, Barcelona, 2005.
- [TEM⁺89] A. Tonomura, J. Endo, T. Matsuda, T. Kawasaki, and H. Ezawa. Demonstration of single-electron buildup of an interference pattern. *Am. J. Phys.*, 57:117–120, 1989.
- [vdW67] B. L. van der Waerden. *Sources of quantum mechanics*. Dover Publications, Inc., New York, 1967. Classics of Science, Volume V.

- [VH58] L. Van Hove. Von Neumann's contributions to quantum theory. *Bull. Amer. Math. Soc.*, 64:95–99, 1958.

Índice alfabético

- análisis armónico, 4, 42
- análisis funcional, 44
- antipartícula, 52
- armónico, 42, 43
- armónicos esféricos, 13
- autofunción, 19

- Banach, espacio de, 44
- Bell, desigualdad de, 37
- Bell, John S. (1928–1990), 35, 36
- Bell, Teorema, 36
- Bell, teorema de, 37
- Bohm, David (1917–1992), 35
- Bohr, Niels (1885–1962), 12–14, 17
- Bohr, radio de, 4, 13, 23
- Born, Max (1882–1970), 14, 15

- Cauchy-Schwarz, desigualdad de, 21
- colapso de la función de onda, 15, 16
- Compton, Arthur H. (1892–1962), 3
- computación cuántica, 35, 40
- constante de Planck, 3
- constante de Planck reducida, 3
- cuantización, 6, 14
- cuanto, 6
- cuaternión, 50

- de Broglie, Louis (1892–1987), 3, 12
- decoherencia cuántica, 18
- desintegración beta, 23
- Dirac, delta de, 20, 46
- Dirac, Paul A.M. (1902–1984), 6, 24
- dualidad onda-corpúsculo, 15

- ecuación de Schrödinger, 46, 47
- ecuación diferencial, 8
- ecuación en derivadas parciales, 46
- efecto Compton, 3
- efecto fotoeléctrico, 3
- efecto túnel, 49
- Ehrenfest, Paul (1880–1922), 27
- Ehrenfest, teorema de, 24
- Einstein, Albert (1879–1955), 3, 14, 17, 34
- entrelazamiento, 34
- espín, 12, 25, 26
- espín, operador de, 27
- espectro continuo, 45
- espectro discreto, 45, 46
- espectroscopía, 11
- espinor, 52
- estado fundamental, 13, 22
- estructura hiperfina, 14
- Euler, fórmula de, 3
- Euler, L. (1707–1783), 51
- Euler-Maclaurin, sumación de, 10

- fórmula de inversión, 43
- factor- g , 26
- fotón, 3
- Fourier, análisis de, 4, 42
- Fourier, desarrollo de, 42
- Fourier, Joseph (1768–1830), 4, 43
- Fourier, transformada de, 43
- fracción giromagnética, 26
- Friedrichs, Kurt O. (1901–1982), 45
- fuerza nuclear débil, 23
- función de onda, 4

- Gerlach, Walter (1889–1979), 25
- Goudsmit, S. (1902–1978), 27

- Hamilton, William R. (1805–1865), 50
- Hamiltoniano, 18
- Heisenberg, desigualdad de, 22
- Heisenberg, interpretación de, 24
- Heisenberg, Werner (1901–1976), 14, 17, 45

- Hertz, Heinrich (1857–1894), 3
 Hilbert, espacio de, 44
 Huygens, Christiaan (1629–1695), 14
- incertidumbre, 21
 intensidad, 14
 interpretación de Copenhague, 14, 21
- Klein-Gordon, ecuación de, 50
 Kronecker, producto de, 33
 Kronig, Ralph (1904–1995), 26, 27
- líneas espectrales, 12
 Laguerre, polinomios de, 13
 Lamb, efecto, 14
 Legendre, polinomios asociados, 13
 Lorentz, fuerza de, 26
 Lorentz, Hendrik (1853–1928), 27
- medición, problema de la, 17
 medida espectral, 46
 mesón, 33
 microscopio de efecto túnel, 17
 muón, 33
- número hipercomplejo, 50
 neutrino, 23
 Newton, Isaac (1642–1727), 14
 norma, 44
 normalización, 15
- observable, 45
 observables, 21
 ondas de materia, 4, 12
 operador compacto, 45
 operador momento, 19
 operador posición, 19
 orbital atómico, 13
 ortogonal, 7
 ortonormal, 7
- paquete de ondas gaussiano, 46
- paradoja EPR, 34
 Pauli, matrices de, 31, 52
 Pauli, Wolfgang (1900–1958), 27
 Planck, Max (1858–1947), 3
 Podolsky, Boris (1896–1966), 34, 35
 Poisson, sumación de, 10
 polarización, 3
 positrón, 52
 pozo de potencial finito, 47
 pozo de potencial infinito, 5, 47, 48
 principio de incertidumbre, 11
 probabilidad de transición, 16
 producto tensorial, 33
- radiación del cuerpo negro, 4
 resonancia magnética nuclear, 24
 Rosen, Nathan (1909–1995), 34
 Rutherford, Ernest (1871–1937), 11
- Schrödinger, Erwin (1887–1961), 12, 14, 16, 17, 46
 Schrödinger, interpretación de, 24
 separación de variables, 47
 Sommerfeld, Arnold (1868–1951), 12, 13, 26
 Stark, efecto, 12
 Stern, Otto (1888–1969), 25
 Stern-Gerlach, experimento de, 25
 Stern-Gerlach, máquina de, 27, 28
- teletransporte, 38
 teorema espectral, 44
 tonos puros, 42
 tritio, 23
- Uhlenbeck, George (1900–1988), 27
 universos paralelos, 18
- valor medio, 21
 variables ocultas, 35, 37
 von Neumann, John (1903–1957), 44
- Wigner, Eugene P. (1902–1995), 18

Wittgenstein, Ludwig (1889–1951), 18

Zeeman anómalo, efecto, 13, 26

Zeeman, efecto, 12