

Consideraciones muy básicas sobre la ecuación de Schrödinger

FERNANDO CHAMIZO LORENTE

Notación: La normalización de la transformada de Fourier es $\hat{f}(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e(-x\xi) dx$ con $e(t) = e^{2\pi it}$, que es la habitual en matemáticas pero no tanto en física.

Antes de comenzar, vamos a repasar o introducir alguna de la terminología habitual sobre las ondas en Física [FLS63, §29.3]. Supongamos una onda sinusoidal en una dimensión:

$$u(x, t) = A \operatorname{sen}(2\pi(kx - \nu t)) \quad \text{con } k, \nu > 0.$$

Esta función es solución de la *ecuación de ondas* $u_{tt} = v_p^2 u_{xx}$ con $v_p = \nu/k$. Al argumento de la onda, esto es, a $2\pi(kx - \nu t)$, se le llama *fase* y al coeficiente A , *amplitud*. Además de ello se tienen las siguientes cantidades básicas:

Not.	Significado	Unid.
ν	<i>Frecuencia</i> : el número de oscilaciones por segundo	\mathbb{T}^{-1}
T	<i>Periodo</i> : lo que tarda en repetirse un ciclo, coincide con ν^{-1}	\mathbb{T}
k	<i>Número de ondas</i> : las oscilaciones que hay para un tiempo fijado por unidad de espacio	\mathbb{L}^{-1}
λ	<i>Longitud de onda</i> : separación entre dos oscilaciones para tiempo fijado (periodo espacial), coincide con k^{-1}	\mathbb{L}
v_p	<i>Velocidad de fase</i> : lo que avanzan las crestas de la onda por unidad de tiempo, coincide con ν/k	$\mathbb{L}\mathbb{T}^{-1}$

Se han indicado las unidades de la manera habitual, \mathbb{L} significa longitud y \mathbb{T} tiempo. Hay que aclarar que la mayoría de las veces en Física el número de ondas se define como $2\pi k$ y para abreviar del todo la fórmula se define la *frecuencia angular* $\omega = 2\pi\nu$. En tres dimensiones la situación es similar salvo que k y x son vectores porque hay que señalar una dirección, de hecho ya en el caso unidimensional hay dos posibilidades para el signo k , correspondientes a las dos direcciones que hay en \mathbb{R} . La ecuación de ondas en tres dimensiones es $u_{tt} = v_p^2 \Delta u$.

La historia de la física cuántica en sus inicios fue bastante azarosa [SR01]. En un primer periodo, del que deriva su nombre, no era un procedimiento demasiado sistemático, se resolvían problemas clásicamente y se imponía que ciertas cantidades físicas tomaran valores enteros, es decir, que estuvieran cuantizadas (cuantificadas sería quizá más correcto pero apenas se ha usado este término [GP90]).

El gran triunfo de este periodo fue el modelo atómico propuesto por N. Bohr. Imaginemos un átomo de hidrógeno como una bolita pequeña de carga negativa, el electrón, girando alrededor de una grande de carga positiva, el protón. La electrodinámica afirma que una carga en movimiento circular debe radiar energía y esa pérdida de energía se traduce en que el radio de su órbita se reducirá paulatinamente. Haciendo los cálculos, cualquier átomo debería colapsar en un tiempo infinitesimal. Entonces ¿por qué no nos desintegramos? El modelo atómico de Bohr postula que el *momento angular* (masa por velocidad por radio) está cuantizado de forma que al multiplicarlo por $2\pi/h$ da un entero. Aquí y en toda esta sección h es la *constante de Planck*, una cantidad fundamental en física cuántica que en el sistema internacional tiene el valor aproximado:

$$h = 6.62606 \cdot 10^{-34} J_s.$$

Sólo cambios en la energía tan grandes como para permitir pasar de un entero a otro provocan cambios en la órbita. Planteado así, parece que podríamos haber hecho innumerables hipótesis alocadas para justificar la estabilidad del átomo. Lo bueno de ésta es que entraba dentro de cierta mínima teoría y que explicaba con notable precisión el *espectro de emisión* de los átomos [Fon05], es decir, las frecuencias emitidas por un átomo cuando se le comunica energía (por cierto, el método usado en astrofísica para saber la composición y velocidad de estrellas y galaxias es analizar estas frecuencias).

Hay varios experimentos que motivaron la física cuántica porque contradecían resultados clásicos. Uno de los más representativos es el efecto fotoeléctrico, descubierto por H. Hertz en el siglo XIX. Consiste en que la luz puede hacer que se emitan electrones (corriente eléctrica) al incidir sobre ciertos metales (por este principio funcionan muchos de nuestros mandos a distancia). Lo curioso es que el efecto no depende tanto de la intensidad de la luz como de su frecuencia (en el espectro visible, de su color). Más concretamente, hasta que no se llega a cierta frecuencia no hay ninguna emisión por grande que sea la intensidad y cuando hay emisión, la energía cinética máxima de cada electrón emitido depende linealmente de la frecuencia pero no depende de la intensidad. La solución propuesta por A. Einstein fue que la luz está compuesta por *cuantos*, partículas sin masa llamadas posteriormente *fotones*, cada uno de los cuales tiene energía

$$(1) \quad E = h\nu$$

donde, como antes, ν es la frecuencia. Según este modelo, la luz se comporta como un chorro de partículas y cada una de ellas puede comunicar a lo más la energía $h\nu$ al chocar con un electrón. Cuando la intensidad es grande, hay muchos fotones pero si cada uno es poco energético, no arrancarán ningún electrón.

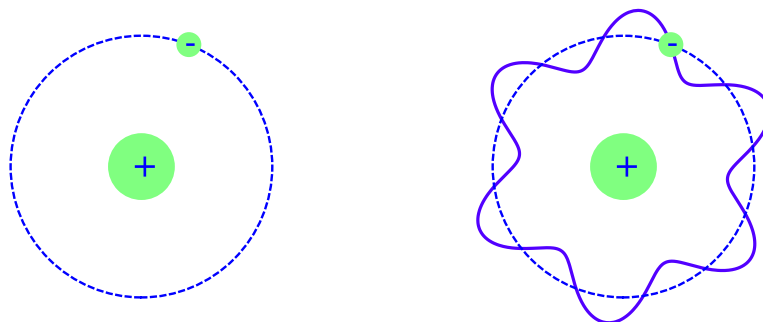
Otro experimento importante, el *efecto Compton* [GP90], mostraba que después de que la luz choca con un electrón libre, cambia su frecuencia de una manera que es compatible con la conservación del momento lineal relativista y (1).

Sin embargo, la difracción y la interferencia y, en suma, las *ecuaciones de Maxwell* [Max98], entran en conflicto con que concibamos la luz como un haz de partículas. Aunque suene paradójico, la idea que triunfó es la hipótesis de L. de Broglie de que la materia era de naturaleza ondulatoria.

Además esta idea surgía a partir de la física clásica, cuando se comparaban ecuaciones de mecánica y de la *óptica geométrica* (la que considera la luz formada por rayos), algo que tiene sus antecedentes en W.R. Hamilton. De Broglie asociaba a una partícula en movimiento con *momento lineal* p (masa por velocidad) la “onda de materia” con longitud de onda

$$(2) \quad \lambda = \frac{h}{p}.$$

Con esto, si pensamos en la onda asociada al electrón al girar alrededor del núcleo describiendo una circunferencia de longitud L , la condición de cuantización de Bohr es equivalente a pedir que su frecuencia sea la de uno de los armónicos (de Fourier) de las funciones L -periódicas. Es decir, que podamos dibujar la onda sobre la trayectoria sin que entre en conflicto con ella misma, que sea estacionaria.



Para radiaciones electromagnéticas (por ejemplo, la luz), la electrodinámica clásica afirma $p = E/c$ donde p es el momento lineal (que ya no se define como masa por velocidad), E la energía y c la velocidad de fase (la velocidad de la luz). Como para cada fotón se cumple (1), se tiene $p = h\nu/v_p = hk = h/\lambda$. Entonces (2) está en concordancia con la electrodinámica clásica. Otra concordancia notable, es que la mecánica clásica se basa en el *principio de mínima acción*, un principio variacional que afirma que las partículas se mueven de forma que la integral del momento lineal en función del espacio es estacionaria (localmente mínima). Por otro lado, el *principio de Fermat* de la óptica geométrica [FLS63, §26], [BW65, §3] afirma algo similar para λ^{-1} , lo cual sugiere que p y λ^{-1} son proporcionales [GP90].

La fórmula (2) abrió un nuevo periodo en la física cuántica y propició la contribución fundamental de E. Schrödinger quien, en estos comienzos de la mecánica cuántica ondulatoria, introdujo la ecuación básica que rige la evolución de la onda asociada a una partícula.

Esta ecuación no se deriva de principios fundamentales anteriores, es un principio en sí misma. Por ello, todo lo que se puede hacer es mostrar algunos cálculos a modo de motivación (seguimos una versión simplificada de [GP90] y [Fon05]). Es sorprendente, y exasperante para los matemáticos más puros, que muchos textos de Física presenten “deducciones” de ésta y otras ecuaciones que hacen creer al lector que son naturales y las únicas posibles, contradiciendo la propia historia de la Física.

A la onda asociada a una partícula se le llama *función de ondas* y se suele denotar mediante Ψ . En el caso de una dimensión espacial, $\Psi = \Psi(x, t)$ donde x es el espacio y t el tiempo. Supongamos que la onda es monocromática (en frecuencia), es decir, $\Psi(x, t) = \phi(x)e(-\nu t)$ (por razones tipográficas escribimos ϕ en lugar de la ψ habitual), el signo de ν es indiferente y se ha escogido negativo por coherencia con el comienzo de la sección. Esta hipótesis sobre Ψ no es tan arbitraria si pensamos que analizamos por Fourier o que en la ecuación final hacemos separación de variables. Schrödinger supuso que Ψ satisfacía la ecuación de ondas. Recordando $v_p = \nu/k$ y $\lambda = k^{-1}$, se tiene

$$\Psi_{tt} = v_p^2 \Psi_{xx} \quad \implies \quad \phi'' + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 \phi = 0.$$

En ningún momento se está diciendo que v_p o λ sean constantes, es decir la ecuación de ondas es más complicada que la que se resuelve en los cursos de ecuaciones. La fórmula básica de la mecánica $E = p^2/2m + V(x)$ (la *energía total* es la energía cinética más la *energía potencial*) [FLS63] junto con (2), lleva a

$$(3) \quad \phi'' + \frac{8\pi^2}{h^2} m(E - V(x))\phi = 0.$$

Fijada la masa y la energía total y dada la energía potencial, podríamos resolver esta ecuación a partir de condiciones iniciales sobre ϕ y ϕ' . Si, en analogía con lo que ocurre con el efecto fotoeléctrico, suponemos que $E = h\nu$, esto determinará Ψ . Por otra parte, de $\Psi_t = -2\pi i E h^{-1} \Psi$ podemos eliminar E de (3) y, suponiendo la linealidad, descartar la hipótesis inicial de que la onda sea monocromática. En otras palabras, analizamos Ψ en ondas monocromáticas de diferentes energías y sumamos o integramos los resultados. Lo que se obtiene eliminando la energía es:

$$\frac{i\hbar}{2\pi} \Psi_t = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \Psi_{xx} + V\Psi.$$

El caso con tres coordenadas espaciales es formalmente similar y con esto hemos llegado a la *ecuación de Schrödinger*

$$(4) \quad \boxed{\frac{i\hbar}{2\pi} \Psi_t = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \Delta \Psi + V\Psi.}$$

Schrödinger supuso que era válida incluso si la energía potencial V depende de t . Si no es el caso, nótese que por separación de variables, es decir, suponiendo $\Psi(\vec{x}, t) = X(\vec{x})T(t)$, se obtiene el análogo tridimensional de (3)

$$(5) \quad -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m} \Delta \phi + V\phi = E\phi$$

Esto sugiere por qué en algunas situaciones la energía está cuantizada. Los valores que toma E son autovalores de un operador del tipo $-\alpha\Delta + V$ y bajo ciertas condiciones de contorno, formarán

un conjunto discreto. Schrödinger, dio con ello una explicación matemática al modelo atómico de Bohr. El hecho de que el momento angular multiplicado por $2\pi/h$ sea entero, se presentaba como consecuencia de que hubiera unos autovalores estrechamente relacionados con los enteros.

Hay varios ejemplos típicos donde se muestra la cuantización de la energía (pozos de potencial [SS90]) pero aquí nos limitaremos a estudiar el caso ridículamente sencillo $V = 0$ en una dimensión, que corresponde a una partícula libre (no afectada por la energía potencial de ningún campo). Es decir, consideramos la ecuación

$$(6) \quad i\Psi_t = -\frac{h}{4\pi m}\Psi_{xx} \quad \text{con} \quad \Psi(x, 0) = f(x)$$

Proposición 1. *Si $x \in \mathbb{R}$ y f es de decaimiento rápido, la única solución de (6) con decaimiento rápido en x para cada t , es*

$$(7) \quad \Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{f}(\xi) e\left(-\frac{h\xi^2}{2m}t + x\xi\right) d\xi.$$

Por otro lado, si $x \in \mathbb{T}$ y $f \in C^\infty(\mathbb{T})$, la única solución C^∞ de (6) es

$$(8) \quad \Psi(x, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} a_n e\left(-\frac{hn^2}{2m}t + nx\right)$$

donde a_n son los coeficientes de Fourier de f .

En el caso de \mathbb{T} , teniendo en cuenta (5), vemos que la energía está cuantizada y toma los valores $h^2n^2/2m$, lo cual es coherente con la fórmula (1). Sin entrar en detalles, uno de los postulados de la llamada *interpretación de Copenhague* de la física cuántica es que las observaciones producen un *colapso de la función de onda* y sólo se pueden detectar “energías propias”, las de una de las ondas elementales (los armónicos) que constituyen la función de ondas.

Aplicando la propiedad de la convolución $(f * g)\widehat{} = \widehat{f} \widehat{g}$ y usando “a ciegas” la fórmula que dice que la transformada de Fourier de $f(x) = e^{-ax^2}$ es $\widehat{f}(\xi) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-\pi^2\xi^2/a}$ para a imaginario puro (en principio sólo válida para $a > 0$), se obtiene la solución en \mathbb{R} como una integral oscilatoria que degenera cuando $t \rightarrow 0$.

$$(9) \quad \Psi(x, t) = (1 - i)\sqrt{\frac{m}{2ht}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x - y) e\left(\frac{my^2}{2ht}\right) dy \quad \text{para} \quad t > 0.$$

Siguiendo la prueba, está claro que la regularidad requerida se puede relajar bastante. Carleson probó esencialmente que basta con que f tenga un cuarto de derivada en L^2 , concretamente que esté en el espacio de Sobolev $H^{1/4}$ (véase [Tay96] para la definición) y ésta es la mínima regularidad exigible [DK82]. Curiosamente, para \mathbb{T} todavía está abierto el problema de saber la regularidad mínima.

Demostración. Más que comprobar la solución, vamos a deducirla y así la unicidad no requerirá nuevos argumentos. Sea Φ tal que $\widehat{\Phi} = \Psi$ donde se entiende que la transformada es en la primera variable. Por $\widehat{f}(\xi) = (2\pi i\xi)^{-k} \widehat{f^{(k)}}(\xi)$, la ecuación (6) equivale, tomando antitransformadas, a

$$i\Phi_t = \frac{\pi\hbar}{m} x^2 \Phi \quad \text{con} \quad \Phi(x, 0) = \widehat{f}(-x)$$

donde se ha usado que $\widetilde{f}(x) = \widehat{f}(-x)$.

En la variable t esto es una sencilla ecuación diferencial ordinaria, cuya solución es

$$\Phi(x, t) = \widehat{f}(-x) e\left(-\frac{\hbar x^2}{2m} t\right).$$

Tomando transformadas de Fourier y haciendo el cambio $x \mapsto -x$, se tiene el resultado.

El caso de \mathbb{T} es similar, de hecho más sencillo, cambiando transformadas de Fourier por series de Fourier uniformemente convergentes. \square

A pesar de que Schrödinger consiguió matematizar la incipiente física cuántica evitando el misterioso “postulado de números enteros” de Bohr [SR01, p.464], no dio con la interpretación adecuada de la función de ondas. El hecho es que las partículas a nivel atómico se detectaban de una en una y esto chocaba con la interpretación ondulatoria. Basándose en trabajos anteriores, M. Born propuso que Ψ era una *amplitud de probabilidad*, en el sentido de que su *intensidad* $|\Psi|^2$, define una densidad de probabilidad de detectar la partícula que representa [SR01, §12]. Esto significa que si en un instante fijado $|\Psi|^2$ es doble en las cercanías de un punto que en las cercanías de otro, también será doble la probabilidad de detectar allí la partícula. Dicho burdamente, podemos seguir pensando en las partículas como esferitas infinitesimales pero a cambio debemos sacrificar las trayectorias definidas y pensar sólo en términos probabilísticos. Éste es un cambio drástico en la interpretación de los fenómenos físicos que está alejado de nuestra experiencia habitual porque en ella las funciones de ondas decaen más rápido de lo que podamos observar.

Con la interpretación probabilista de Ψ es natural imponer $\Psi(\cdot, t) \in L^2(\mathbb{R})$ (nos limitamos al caso unidimensional aunque el tridimensional es análogo) y que además su norma en este espacio sea 1. De esta forma $|\Psi(x, t)|^2 dx$ define una medida de probabilidad para cada tiempo fijado y la probabilidad de que detectemos una partícula \mathbf{p} en un conjunto $C \subset \mathbb{R}$ es

$$(10) \quad \text{Prob}_t(\mathbf{p} \in C) = \int_C |\Psi(x, t)|^2 dx.$$

Para ver que todo esto tiene sentido, vamos a comprobar que la normalización es coherente con la solución hallada en el resultado anterior.

Proposición 2. *Si en las soluciones (7) y (8) se tiene $\|f\|_2 = 1$, entonces $\|\Psi(\cdot, t)\|_2 = 1$ para todo t .*

Demostración. Según (7) y (8), Ψ es, respectivamente, la antitransformada de Fourier de la función $\widehat{f}(x)e(-hx^2t/2m)$ o la serie de Fourier con coeficientes $a_n e(-hn^2t/2m)$. En el primer caso, por la identidad de Parseval $\|\Psi(\cdot, t)\|_2 = \|\widehat{f}\|_2 = \|f\|_2 = 1$, y el segundo es idéntico escribiendo $(\sum |a_n|^2)^{1/2}$ en vez de $\|\widehat{f}\|_2$. \square

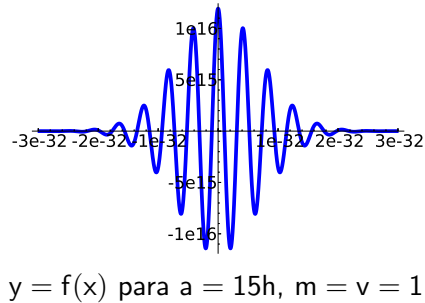
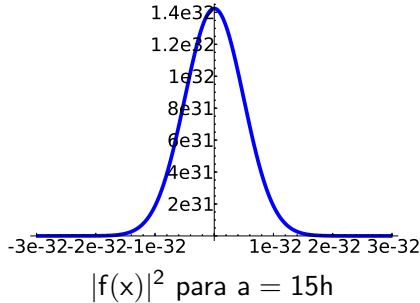
Esta propiedad de “conservación de la energía” en la ecuación de Schrödinger, es general, no se restringe al caso sencillo unidimensional y con $V = 0$ que hemos resuelto, aunque no lo veremos aquí [Fon05, §2.8].

Comprobamos a continuación que para el caso analizado de una partícula libre, lo que nos dice (7) es coherente con la mecánica clásica.

Una partícula en el origen debe tener una función de ondas tal que la medida de probabilidad $|\Psi|^2 dx$ en el instante inicial, esto es, $|f|^2 dx$, tenga casi toda su masa cerca del origen. Para facilitar los cálculos, tomemos $|f(x)| = Ce^{-x^2/a^2}$ con $a > 0$ y C una constante que asegure $\|f\|_2 = 1$, así se tiene decaimiento rápido y “anchura” comparable a a . De acuerdo con (2), si la velocidad inicial es v_0 , el número de ondas debería ser mv_0/h , por tanto un modelo natural para una partícula de masa m inicialmente en el origen con velocidad v_0 es

$$(11) \quad f(x) = \Psi(x, 0) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{-x^2/a^2} e\left(\frac{mv_0}{h}x\right).$$

Para a pequeño $|f|^2$ es como una aproximación de la identidad y f tiene una oscilación muy rápida que no afecta a la probabilidad de detectar la partícula en el instante inicial según (10).



Ahora tenemos que aplicar la fórmula (7) para hallar la función de ondas. Para abreviar escribimos $\alpha = mv_0/h$ y $\beta = ht/2m$. El cambio $\xi \mapsto \xi + \alpha$ con (7) para nuestra f , conduce a

$$\Psi(x, t) = (2\pi a^2)^{1/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\pi^2 a^2 \xi^2} e(-\beta(\xi + \alpha)^2 + x(\xi + \alpha)) d\xi,$$

que operando un poco se escribe como

$$\Psi(x, t) = (2\pi a^2)^{1/4} e(\alpha x - \beta \alpha^2) \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(\pi^2 a^2 + 2\pi i \beta)\xi^2} e(\xi(x - 2\alpha\beta)) d\xi$$

y con la fórmula para la transformada de Fourier de una gaussiana llegamos a

$$\Psi(x, t) = (2\pi)^{1/4} e^{(\alpha x - \beta \alpha^2)} \sqrt{\frac{a}{\pi a^2 + 2i\beta}} e^{-\pi(x-2\alpha\beta)^2/(\pi a^2 + 2i\beta)}.$$

Sustituyendo α y β , vemos que la densidad de probabilidad de encontrar la partícula en un punto x en el instante t , viene dada por

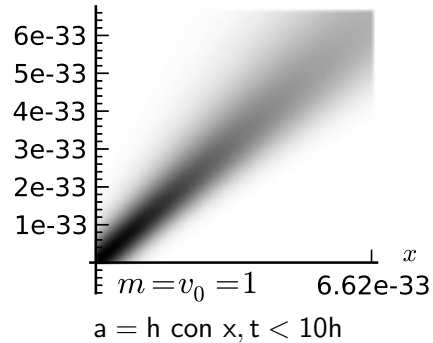
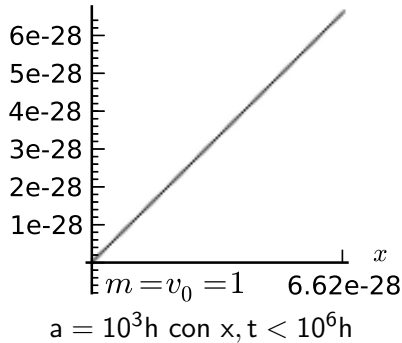
$$(12) \quad |\Psi(x, t)|^2 = \frac{a\sqrt{2\pi}}{\sqrt{\pi^2 a^4 + h^2 t^2 m^{-2}}} e^{-2g(x, t)} \quad \text{con} \quad g(x, t) = \frac{\pi^2 a^2}{\pi^2 a^4 + h^2 t^2 m^{-2}} (x - v_0 t)^2.$$

El valor de h es tan pequeño, que para tiempos razonables y a que no esté en el rango subatómico, se cumple

$$|\Psi(x, t)|^2 \approx \frac{(2/\pi)^{1/2}}{a} e^{-2(x-v_0 t)^2/a^2}.$$

Entonces se concentrará en una bandita de anchura comparable a a alrededor de $x = v_0 t$, con ello recuperamos en el límite la *ley de inercia*, que afirma que para una partícula libre ($V = 0$) las trayectorias son rectilíneas. Quizá parezca un poco paradójico que la velocidad no tenga que ver con la velocidad de fase de Ψ . Cuando una onda no es sinusoidal, puede haber *paquetes de ondas* que se muevan a una *velocidad de grupo* que no esté relacionada con la velocidad interna de las ondas en el interior del paquete [FLS63, §48-4].

Fuera de las escalas clásicas, la función de ondas se dispersará y entonces tendremos una amplia nube de probabilidad donde podríamos detectar la partícula.



Si intentamos que la partícula tienda a ser clásica con una posición en el origen totalmente determinada, deberíamos tomar $a \rightarrow 0^+$ en (11) pero entonces (12) implica que según avanza el tiempo, las posiciones x con $a^2 h^{-2} t^{-2} m^2 (x - v_0 t)^2 \ll 1$ tienen probabilidad más o menos parecida, esta desigualdad se puede escribir como $|p - p_0| \ll h a^{-1}$ con $p = m x / t$ el momento lineal (clásico) y $p_0 = m v_0$ el momento lineal inicial. Físicamente esto indica que hay una holgura en el momento lineal p de orden $h a^{-1}$. Matemáticamente, ello depende de que no es posible localizar una función y su transformada de Fourier.

Según hemos visto, en la física cuántica no hay posiciones de partículas sino una distribución de probabilidad. Los resultados pueden ser bien diferentes para un mismo experimento. Si hemos de elegir un valor para llamarle espacio o posición, lo más lógico es tomar la esperanza

$$\bar{x} = \int x |\Psi(x, t)|^2 dx = \int \bar{\Psi}(x, t) x \Psi(x, t) dx.$$

El momento tampoco existe como un número. Pensemos por ejemplo en (8). Si tomamos como cierto (2), esta función de ondas tiene muchos momentos, dados por $p = \hbar k = \hbar n$. La cantidad $|a_n|^2$ debería interpretarse como la probabilidad de que detectemos la onda de momento $\hbar n$, ya que $\int_{\mathbb{T}} |\Psi|^2 dx = \sum |a_n|^2 = 1$ (de nuevo, esto es parte de la interpretación de Copenhague, por la cual sólo se detectan armónicos individuales con probabilidad proporcional al cuadrado del módulo de su amplitud). Entonces la esperanza del momento es

$$\bar{p} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hbar n |a_n|^2 = \frac{\hbar}{2\pi i} \int \bar{\Psi}(x, t) \Psi_x(x, t) dx.$$

Si posición y momento no son números, ¿cómo deberíamos considerarlos matemáticamente? La última expresión muestra que el momento está relacionado con una operación sobre la función de ondas. J. von Neumann desarrolló la idea de considerar cantidades físicas como operadores y con ello acercó la mecánica cuántica al análisis funcional. De esta forma la dotó de un extenso formalismo matemático que, junto con la contribución de Dirac, ha perdurado hasta nuestros días. En los textos actuales se incluyen muchas veces unos postulados o axiomas de la mecánica cuántica escritos con lenguaje matemático (véase enunciados precisos en [GP90] y algunas ideas básicas en [SS90]). Aquí simplemente señalaremos que el *estado* de un sistema físico viene representado por una función de ondas Ψ , que es un elemento unitario de un espacio de Hilbert complejo separable, mientras que los *observables* son operadores lineales autoadjuntos.

Si definimos los operadores posición \tilde{x} y momento \tilde{p} (siempre en el caso unidimensional) actuando sobre las funciones de ondas de la siguiente manera:

$$(13) \quad \tilde{x}(\Psi) = x\Psi \quad \text{y} \quad \tilde{p}(\Psi) = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial x},$$

entonces los valores medios (las esperanzas) de posición y momento deberían definirse como

$$\bar{x} = \langle \Psi, \tilde{x}(\Psi) \rangle = \int x |\Psi(x, t)|^2 dx \quad \text{y} \quad \bar{p} = \langle \Psi, \tilde{p}(\Psi) \rangle = \frac{\hbar}{2\pi i} \int \bar{\Psi}(x, t) \frac{\partial \Psi}{\partial x}(x, t) dx,$$

lo cual es coherente con el ejemplo anterior. Aquí hemos evitado la notación habitual \hat{x} y \hat{p} para evitar confusiones. Es conveniente advertir que en la física cuántica utiliza muchas convenciones notacionales introducidas Dirac (véanse los rudimentos en [SS90]), que difieren de las utilizadas en

análisis funcional y en análisis en general, por ejemplo, el desarrollo en serie de Fourier clásico $f(x) = \sum a_n e(nx)$ se escribiría con la notación cuántica de forma tan pintoresca como $|f\rangle = \sum |n\rangle \langle n|f\rangle$.

Para reconciliar esta extraña visión de cantidades físicas como operadores con la mecánica ondulatoria, podemos pensar que cada función de ondas es superposición de muchas ondas elementales (armónicas) de la forma $e(px/h - Et/h)$, para ser coherentes con (1) y (2). Para “bajar” el momento de la exponencial y que pase a ser una amplitud, hay que hacer la operación $h(2\pi i)^{-1} \partial/\partial x$, mientras que si queremos hacer lo mismo con la energía, la operación sería $-h(2\pi i)^{-1} \partial/\partial t$, lo cual sugiere que éste es el operador \tilde{E} que le corresponde.

Si añadimos que las funciones actúan por multiplicación, como ya habíamos hecho con x , entonces a la fórmula clásica de conservación de la energía $p^2/2m + V = E$ le corresponde la relación de operadores $\tilde{p}^2/2m + \tilde{V} = \tilde{E}$, que aplicado a una función de ondas Ψ da lugar a

$$\frac{1}{2m} \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right) + V\Psi = -\frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial t},$$

y operando ¡se obtiene la ecuación de Schrödinger! Es decir, la conservación de la energía clásica permite “deducir” la ecuación de Schrödinger cuando las cantidades físicas, los observables, se sustituyen por sus operadores. Este proceso para obtener fórmulas cuánticas a partir de las clásicas se llama (primera) *cuantización*.

Con todo este lenguaje, el principio de incertidumbre adquiere una formulación matemática bastante general. Dada una función de ondas Ψ , parece natural definir la varianza de un operador autoadjunto A como

$$V(A) = \overline{(A - \bar{A} \text{Id})^2} \quad \text{donde} \quad \bar{A} = \langle \Psi, A\Psi \rangle$$

y el cuadrado se entiende en sentido de operadores, es decir $(A - \bar{A} \text{Id})(A - \bar{A} \text{Id})$.

Proposición 3. Sean A y B operadores autoadjuntos, entonces

$$V(A)V(B) \geq \frac{1}{4} |\overline{AB - BA}|^2.$$

Demostración. Redefiniendo A como $A - \bar{A} \text{Id}$ y lo mismo con B , nos podemos restringir al caso $\bar{A} = \bar{B} = 0$. En este caso, por la desigualdad de Cauchy-Schwarz,

$$V(A)V(B) = \|A\Psi\|^2 \|B\Psi\|^2 \geq |\langle A\Psi, B\Psi \rangle|^2.$$

Por otro lado,

$$\langle A\Psi, B\Psi \rangle = \langle \Psi, AB\Psi \rangle = \frac{1}{2} \langle \Psi, (AB - BA)\Psi \rangle + \frac{1}{2} \langle \Psi, (AB + BA)\Psi \rangle.$$

El operador $AB - BA$ es antiautoadjunto mientras que $AB + BA$ es autoadjunto, por tanto $\overline{AB - BA}$ es imaginario puro y $\overline{AB + BA}$ es real (basta escribir la definición y ver que el conjugado complejo es igual a su negativo o a él mismo). Despreciando la parte real al tomar módulos, se concluye la demostración. \square

Una consecuencia física interesante es que en cuanto dos operadores no conmuten, habrá funciones de onda para las cuales no es posible conseguir varianzas arbitrariamente pequeñas. En el caso de \tilde{x} y \tilde{p} ,

$$\tilde{x}\tilde{p} - \tilde{p}\tilde{x} = x \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial(x\Psi)}{\partial x} = -\frac{h}{2\pi i} \Psi \quad \implies \quad \overline{\tilde{x}\tilde{p} - \tilde{p}\tilde{x}} = \frac{hi}{2\pi}$$

Por tanto, $h^2/(16\pi^2)$ impone siempre una cota inferior para el producto de las varianzas de \tilde{x} y \tilde{p} . Éste es el *principio de incertidumbre de Heisenberg*, que está más cercano a lo que realmente hizo Heisenberg, aunque él trabajó inicialmente con series de Fourier [SR01].

Si escribimos explícitamente $V(\tilde{x})$ y $V(\tilde{p})$, limitándonos al caso $\tilde{x} = \tilde{p} = 0$, para simplificar, se tiene

$$V(\tilde{x}) = \int x^2 |\Psi|^2 \quad \text{y} \quad V(\tilde{p}) = -\frac{h^2}{4\pi^2} \int \overline{\Psi} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{h^2}{4\pi^2} \int \widehat{\Psi} (2\pi i \xi)^2 \widehat{\Psi} = h^2 \int \xi^2 |\widehat{\Psi}|^2.$$

Entonces la cota inferior $h^2/(16\pi^2)$ para $V(\tilde{x})V(\tilde{p})$ se deduce de la *desigualdad de Heisenberg* del análisis armónico [DM72] que afirma que para $a, b \in \mathbb{R}$

$$16\pi^2 \int_{-\infty}^{\infty} (x-a)^2 |f(x)|^2 dx \cdot \int_{-\infty}^{\infty} (\xi-b)^2 |\widehat{f}(\xi)|^2 d\xi \geq \|f\|_2^4$$

siempre que las integrales existan. Más allá de la importante interpretación física, matemáticamente es bello que la falta de localización de una función y su transformada se relacione con la falta de conmutatividad de dos operadores.

Referencias

- [BW65] M. Born and E. Wolf. *Principles of optics: Electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*. With contributions by A. B. Bhatia, P. C. Clemmow, D. Gabor, A. R. Stokes, A. M. Taylor, P. A. Wayman and W. L. Wilcock. Third revised edition. Pergamon Press, Oxford, 1965.
- [DK82] B. E. J. Dahlberg and C. E. Kenig. A note on the almost everywhere behavior of solutions to the Schrödinger equation. In *Harmonic analysis (Minneapolis, Minn., 1981)*, volume 908 of *Lecture Notes in Math.*, pages 205–209. Springer, Berlin, 1982.
- [DM72] H. Dym and H. P. McKean. *Fourier series and integrals*. Academic Press, New York, 1972. Probability and Mathematical Statistics, No. 14.
- [FLS63] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands. *The Feynman lectures on physics. Vol. 1: Mainly mechanics, radiation, and heat*. Addison-Wesley Publishing Co., Inc., Reading, Mass.-London, 1963.

- [Fon05] P. Fong. *Elementary quantum mechanics*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Hackensack, NJ, expanded edition, 2005.
- [GP90] A. Galindo and P. Pascual. *Quantum mechanics. I*. Texts and Monographs in Physics. Springer-Verlag, Berlin, 1990. Translated from the Spanish by J. D. García and L. Alvarez-Gaumé.
- [Max98] J. C. Maxwell. *A treatise on electricity and magnetism. Vol. 1, 2*. Oxford Classic Texts in the Physical Sciences. The Clarendon Press Oxford University Press, New York, 1998. With prefaces by W. D. Niven and J. J. Thomson, Reprint of the third (1891) edition.
- [SR01] J. M. Sánchez-Ron. *Historia de la física cuántica: el periodo fundacional (1860–1926)*. Crítica, 2001.
- [SS90] D. Stauffer and H. E. Stanley. *From Newton to Mandelbrot: A Primer in Theoretical Physics*. Springer-Verlag, Berlin, 1990.
- [Tay96] M. E. Taylor. *Partial differential equations*, volume 23 of *Texts in Applied Mathematics*. Springer-Verlag, New York, 1996. Basic theory.