Índice General

Prólogo **iii**

1 INTRODUCCIÓN GENERAL **1**

2 ESPACIOS DE HILBERT **15**

2.1 Introducción . . . 15
2.2 Espacios vectoriales o lineales . . . 17
2.3 Base lineal de un espacio vectorial . . . 21
2.4 Producto escalar . . . 23
2.5 Espacios de Hilbert . . . 29
2.6 Bases ortonormales en espacios de Hilbert . . . 36
2.7 Operadores lineales en un espacio de Hilbert . . . 44
2.8 Operaciones con operadores lineales . . . 45
2.9 Operador adjunto. Representación matricial . . . 53
2.10 Operadores hermíticos y autoadjuntos . . . 56
2.11 Operadores unitarios. Cambios de base . . . 60
2.12 Proyectores ortogonales . . . 64
2.13 Espectro puntual. Autovalores y autovectores . . . 67
2.14 Vectores no normalizables . . . 76
2.14.1 Delta de Dirac . . . 83
2.14.2 La transformación de Fourier . . . 89
2.14.3 Bases ortonormales generalizadas . . . 93
2.15 Espectro continuo . . . 93
2.16 Descomposición espectral . . . 104
2.17 Conjunto compatible de operadores . . . 111
2.18 Formas lineales. Notación de Dirac$^{(*)}$ . . . 114
2.19 Isomorfismos entre espacios de Hilbert$^{(*)}$ . . . 120
2.20 Producto tensorial de espacios de Hilbert$^{(*)}$ . . . 121

3 POSTULADOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA **125**

3.1 Introducción . . . 125
3.2 Descripción de los sistemas físicos. Estados y observables . . . 125

3.3 Probabilidad en las medidas de observables 128
3.4 Reducción del estado cuántico 138
3.5 Compatibilidad. Relación de incertidumbre generalizada 146
3.6 El espacio de los estados de una partícula con espín 151
3.7 Evolución temporal de los estados cuánticos 158
3.8 Evolución temporal relativa a los observables 165
3.9 Relación de incertidumbre energía-tiempo 169
3.10 Observables posición y momento 171
3.11 Ecuaciones de Ehrenfest 178
3.12 El problema de la medida en Mecánica Cuántica$^{(*)}$ 183
3.13 Introducción a los modelos de variables ocultas$^{(*)}$ 187
3.14 Entrelazamiento$^{(*)}$ 192
Problemas Resueltos 196

4 LA FUNCIÓN DE ONDA. SISTEMAS SIMPLES 205
4.1 Introducción 205
4.2 La función de ondas en la representación de posiciones 206
4.3 La función de ondas en la representación de momentos 217
4.4 Propiedades generales de las autofunciones de la energía 225
4.4.1 Propiedades de las funciones de onda 225
4.4.2 Espectro de energía 227
4.5 El pozo cuadrado infinito 237
4.6 Estados ligados en pozos cuadrados finitos 244
4.7 El oscilador armónico 251
4.7.1 Método de operadores 257
4.8 Reflexión y transmisión por un escalón 263
4.9 Reflexión y transmisión por una barrera 267
4.10 Sistemas separables 271
Problemas Resueltos 275

Índice de símbolos y glosario 319

Bibliografía 327

Prólogo

Este libro expone el formalismo de la Mecánica Cuántica al nivel que se exige en el tercer curso de Ciencias Físicas de la UNED. Aunque, como es obvio, este texto será de gran utilidad para aquellos alumnos que siguen sus estudios en dicha Universidad, esperamos que sea también de ayuda a los estudiantes de otros centros que cursen una Mecánica Cuántica a un nivel parecido.

En la UNED, el curso se articula en dos cuatrimestres, en cada uno de los cuales se estudia básicamente un libro de texto. En concreto:

- En el primer cuatrimestre de la asignatura se sigue el texto *Física Cuántica* de E. Wichman, volumen 4 del Curso de Física de Berkeley (publicado en español por la editorial Reverté), en el cual se introduce de manera brillante la necesidad de una nueva formulación de la mecánica para el estudio de los objetos microscópicos.

- En el segundo cuatrimestre se estudia el formalismo cuántico propiamente dicho. Es éste el objeto del presente libro.[1]

Así, en la primera parte del curso, el alumno se familiariza con aquellos conceptos claves del formalismo cuántico, como pueden ser la función de ondas, los niveles de energía o la interpretación probabilística. Sin embargo, el rigor matemático es el mínimo imprescindible. Una vez que el alumno *conoce* el mundo cuántico, es cuando se le exponen los principios de la Mecánica Cuántica desde una perspectiva formal, aunque adecuada a los conocimientos de un estudiante de tercer curso (o de segundo curso dentro de un programa de cuatro años) de una licenciatura de Ciencias Físicas.

No podemos olvidar que la Mecánica Cuántica es, para la mayoría de los físicos, una herramienta necesaria para profundizar en otras disciplinas, como la *Física Atómica y Molecular* o la *Física del Estado Sólido*. Por esa razón, hemos preferido hacer hincapié en los aspectos metodológicos generales más

[1] El libro *Introducción a la Mecánica Cuántica* de Gillespie (publicado en castellano en su día por la editorial Reverté, pero actualmente descatalogado) tiene un temario también adecuado para esa parte del curso.

que en las aplicaciones concretas, puesto que éstas serán el objetivo de cursos posteriores.

Acorde con estas ideas, el libro está estructurado en cuatro capítulos:

- Un pequeño capítulo introductorio, que repasa someramente la necesidad de un nuevo formalismo para la descripción del mundo subatómico, cuya fenomenología ya debe ser conocida por el lector.

- Un amplio resumen de la teoría de espacios de Hilbert, con la que el Alumno ya está familiarizado tras el estudio previo de la asignatura de *Análisis Matemático II* de la licenciatura en CC. Físicas de la UNED (o de otras asignaturas equivalentes en otras universidades). El material que aquí se presenta pretende establecer una notación matemática consistente para su uso en el texto. Además, este capítulo permitirá que nos podamos concentrar en los aspectos conceptuales del formalismo cuántico, sin tener que introducir digresiones *técnicas* que dificultarían la comprensión del mismo.

- En el tercer capítulo se estudia el formalismo de la Mecánica Cuántica propiamente dicho. Aunque el texto sigue un enfoque postulacional, similar al que aparece en el ya citado libro de Gillespie, nuestra presentación considera desde el principio la posible degeneración de los valores espectrales de un observable y también la eventual aparición de una parte continua del espectro. Por otra parte, la formulación de los postulados de la Mecánica Cuántica que aquí presentaremos será lo más general posible. Así, no especificaremos una representación concreta de los estados cuánticos, centrándonos en los aspectos conceptuales fundamentales.

- El cuarto y último capítulo es continuación natural del anterior. En él dedicamos apartados especiales a las representaciones de posiciones y momentos para una partícula no relativista que se mueve en una dimensión. A su vez, aplicaremos la teoría general a varios sistemas simples, gracias a los cuales profundizaremos en los conceptos teóricos expuestos en el tercer capítulo.

Además de numerosos ejemplos intercalados a lo largo del texto, al final de los capítulos 3 y 4 el lector encontrará una colección de problemas resueltos en detalle. El alumno debe notar que no todos los problemas son una mera aplicación de lo desarrollado a lo largo de la obra, puesto que en muchos casos los problemas suponen en sí mismos la presentación motivada de nuevas ideas. De hecho, algunos problemas constituyen, por sí solos, una presentación de aspectos de la teoría cuántica, que en otros textos podrían encontrase en los apartados teóricos. Por eso insistimos en que el lector trabaje especialmente los problemas y ejemplos resueltos de este libro.

Igualmente, hemos incluido ejercicios propuestos a lo largo del texto (excepto en el primer capítulo). Estos ejercicios, de dificultad baja o intermedia, deberían ser resueltos sin excesivo esfuerzo por parte del lector si ha sido capaz de entender y asimilar las ideas principales que queremos transmitir.

Los apartados, ejemplos y problemas marcados con un asterisco puede omitirse en un primer estudio del texto, aunque contienen información interesante sobre algunos puntos importantes del formalismo. También queremos mencionar que el capítulo 2 no es completamente imprescindible para la comprensión de la teoría cuántica tal y como aquí se expone. Como hemos comentado, los conocimientos matemáticos que suponemos al lector son los correspondientes a los dos primeros años de una licenciatura en Ciencias Físicas. Ahora bien, este capítulo puede servir de referencia si el lector encuentra dificultades a la hora de entender la herramienta matemática que se utiliza habitualmente en la teoría cuántica a este nivel, pero también al nivel exigible en un curso más especialidado de segundo ciclo. Por tanto, si el lector cree que sus conocimientos sobre álgebra de espacios lineales de dimensión infinita o sobre análisis funcional no es el adecuado, le recomendamos una lectura detallada de este segundo capítulo. Bien es cierto que este capítulo también sirve para entender el porqué del lenguaje empleado en el formalismo cuántico, debido a la notable correspondencia que hay en este caso entre la abstracción matemática y la información física. En definitiva, con la inclusión de este complemento matemático relativamente amplio hemos querido facilitar la comprensión de la teoría cuántica, no entorpecerla. Por tanto, no es nuestro deseo que el alumno dedique una parte sustancial de su tiempo a asimilar una cantidad excesiva de información, que rara vez va realmente a necesitar. No está de más el recordar que, para un físico, las matemáticas son una herramienta que cumple su labor en tanto en cuanto proporciona el lenguaje requerido para describir con precisión la realidad física. Por ello no hemos incluido aspectos tan interesantes como la teoría de la medida de Borel, espacios de distribuciones o un tratamiento exhaustivo de las técnicas de resolución de ecuaciones diferenciales. Todos ellos deben de formar parte del bagaje intelectual de cualquier licenciado en Ciencias Físicas, pero su ubicación natural está en otras asignaturas específicas. Por igual motivo hemos relajado bastante el rigor en la exposición. Así, el lector observará que hemos omitido muchos detalles formales y que algunas afirmaciones no son enteramente rigurosas. En otras palabras, la exposición que hacemos sobre la teoría de espacios de Hilbert en ningún modo debe considerarse como un sustituto de monografías dedicadas al respecto, sino como una ayuda que sirva al lector a cubrir la distancia que hay entre el planteamiento matemático formal y su aplicación a la Física.

En esta segunda edición hemos hecho varios cambios con respecto a la primera edición de esta obra. Además de corregir y reescribir aquellas secciones que podían resultar confusas o poco detalladas, hemos realizado modificaciones sustanciales que afectan a la estructura general del texto. En primer lugar, el capítulo dedicado a la teoría de espacios de Hilbert ha sido rehecho por completo. Algunos aspectos formales han sido eliminados y, por el contrario, otros que no habían sido comentados suficientemente en la primera edición se abordan ahora con más profundidad. Se ha ampliado la descripción del espectro continuo de operadores autoadjuntos y la mayoría de los problemas resueltos que antes aparecían al final del capítulo se han situado ahora intercalados como ejemplos a lo largo del mismo. La exposición de los fundamentos de la teoría cuántica se mantiene como tercer capítulo, pero en esta nueva edición aparece un capítulo dedicado específicamente al estudio de sistemas simples. Estas aplicaciones del formalismo se abordaban en la primera edición mediante un enfoque "constructivo" a través de la resolución detallada de problemas. A su vez, se presta más atención al ejemplo paradigmático de los estados de espín 1/2 y a la resolución de sistemas en varias dimensiones, aunque separables en sistemas simples unidimensionales. Aun así, seguimos omitiendo conscientemente un tratamiento completo del momento angular, de la resolución de problemas tridimensionales con simetría esférica y de los rudimentos de la mecánica estadística cuántica (tópicos habituales en muchos cursos introductorios a la Mecánica Cuántica). Creemos que dichos temas deben abordarse detalladamente en cursos especializados de segundo ciclo.

No queremos cerrar esta presentación sin agradecer a todas aquellas personas que nos han hecho llegar sus comentarios y sugerencias y, sobre todo, a nuestros compañeros del Departamento de Física Fundamental, especialmente a los Dres. Elka Koroutcheva, David García Aldea y Miguel Ángel de la Casa, que nos han ayudado a intentar corregir los errores y las erratas, que son casi imposibles de evitar en cualquier texto.

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN GENERAL

- A principios del siglo XX diversos fenómenos relacionados con la radiación y la estructura atómica de la materia plantearon dificultades para ser interpretados por la física clásica. La radiación del cuerpo negro parecía contradecir el principio de equipartición, y este problema llevó a la idea de la cuantificación de la energía. Por otra parte, algunas propiedades de la materia (por ejemplo, algo tan básico como el tamaño de los propios átomos) resultaban inexplicables para la mecánica y el electromagnetismo clásicos. Una primera aproximación para tratar de explicar estos fenómenos consistió en complementar las leyes de la mecánica clásica con ciertos principios de cuantificación, como era el caso de la teoría del átomo de Bohr. No obstante, y pese a que con esto se obtenían algunos resultados sorprendentemente buenos, la solución parecía artificiosa e incoherente: los principios de cuantificación se introducían *ad hoc* y, además, resultaban incompatibles con las leyes del electromagnetismo clásico.

- Otros fenómenos, descubiertos posteriormente en relación con el comportamiento puramente mecánico de las partículas subatómicas, no sólo resultaban inexplicables dentro de la mecánica clásica sino que parecían escapar al propio marco de descripción de la misma.

Una partícula clásica tiene una trayectoria bien definida en el espacio ordinario tridimensional. El estado de la partícula en un instante dado está determinado por su posición y velocidad. Por ello, es conveniente matemáticamente representar la partícula por un punto de coordenadas (x, y, z, p_x, p_y, p_z) en un espacio abstracto de seis dimensiones (tres de ellas correspondientes a las componentes del vector posición y tres a las componentes del vector momento lineal[1]) que se denomina *espacio de fases*. La evolución temporal del estado de

[1] En lo sucesivo, cuando se hable de momento, sin especificar si es lineal o angular, ha de

la partícula viene dada por el movimiento del punto representativo del espacio de fases $(\mathbf{r}(t), \mathbf{p}(t))$, que obedece a un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden, que a su vez se sigue de las leyes de Newton.

Sin embargo, los fenómenos de difracción de partículas por estructuras periódicas requieren una explicación basada en conceptos propios de la física ondulatoria. Los primeros experimentos de difracción de partículas, que llevaron a cabo Davidson y Germer en 1927 e, independientemente, G. E. Thomson en 1928, utilizaban haces de electrones que incidían sobre redes cristalinas. Pocos años más tarde, Estermann y Stern obtuvieron difracción de átomos de helio y actualmente se ha observado difracción de electrones, protones, átomos y moléculas, tanto por redes cristalinas como por el campo periódico creado por una onda electromagnética estacionaria. En todos los casos, las direcciones de los haces difractados son las que corresponderían a una onda plana incidente $\exp(i2\pi x/\lambda)$ de longitud de onda $\lambda = h/p$ (longitud de onda de De Broglie), siendo p el momento de las partículas del haz incidente y $h \simeq 6.64 \times 10^{-34}$ J $\cdot$ s la constante de Planck. [2]

• Consideremos un experimento en el que la estructura periódica "infinita" (en realidad, basta con que sea mucho mayor que la anchura del haz de partículas) queda reducida a un par de rendijas paralelas.[3] Una fuente de partículas lanza un haz de partículas en el mismo estado (es decir, preparadas de la misma forma) sobre una pared en la que hay dos rendijas paralelas separadas una distancia a.[4] Tras atravesar las rendijas, las partículas inciden sobre una pantalla situada a una distancia d, donde son registradas por detectores distribuidos por la misma (ver figura 1.1). Cuando sólo está abierta la rendija 1, el registro de las partículas que llegan a los diferentes puntos de la pantalla corresponde a la curva P_1, que tiene un único máximo frente a dicha rendija. Esto parece lógico, puesto que todas las partículas que llegan a la pantalla han tenido que pasar necesariamente por la rendija 1; el ensanchamiento de la curva (mayor

---

entenderse *momento lineal*.

[2] Estos experimentos de difracción por estructuras periódicas admiten también una explicación alternativa en términos de partículas y principios de cuantificación. En efecto, una forma de obtener la dirección de los haces difractados consiste en admitir que, en la colisión con la estructura periódica, se verifica la condición $\Delta p_x \cdot a = nh$, siendo a el periodo de la estructura difractante y Δp_x el cambio de la componente del momento de la partícula paralela a la estructura. En esta interpretación, defendida por W. Duane en los años 1930, se evita el considerar a las partículas como si fuesen ondas planas que se difractan. Sin embargo, la naturaleza ondulatoria de las partículas es necesaria para explicar otros tipos de fenómenos como los que veremos a continuación.

[3] Una exposición especialmente interesante de dicho experimento puede encontrarse en *Seis Piezas Fáciles*, de Richard Feynman (editorial Crítica) o el primer capítulo del tercer volumen de su obra *Física* (editorial Addison-Wesley Iberoamericana). Véase también el capítulo quinto del libro *Física Cuántica* de E. Wichman, volumen 4 del Curso de Física de Berkeley (editorial Reverté).

[4] La anchura de las rendijas también es importante pero, por simplicidad, supondremos simplemente que es mucho menor que a.

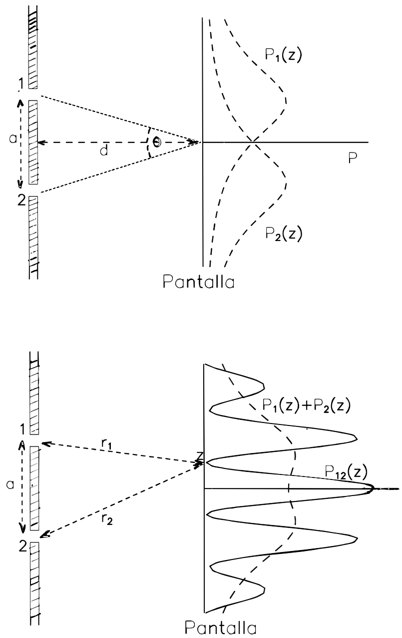

Fig. 1.1. Experimento de la doble rendija. Arriba, las probabilidades de llegada cuando está abierta una u otra rendija (no las dos). Abajo, en línea de trazos la suma de las probabilidades $P_1 + P_2$; en línea continua la probabilidad de llegada cuando ambas rendijas están abiertas simultáneamente.

cuanto más estrecha es la rendija) no sería difícil de explicar teniendo en cuenta que los bordes de la rendija pueden afectar a algunas de las partículas que la atraviesan. Una curva similar, P_2, se obtiene cuando sólo permitimos que esté abierta la rendija 2.

Ahora bien, desde el punto de vista clásico parece claro que la trayectoria de una partícula que pasa por la rendija 1 no debería verse afectada por el hecho de que la rendija 2 esté abierta o cerrada. Por consiguiente, cabría esperar que cuando están abiertas las dos rendijas, la curva que da la distribución de los puntos de llegada de las partículas fuera la suma de las curvas 1 y 2 (para una misma duración del experimento). Sin embargo, no es esto lo que se observa cuando ambas rendijas están abiertas; lo que se observa realmente es una figura con varios máximos y mínimos, similar a los patrones de interferencia de las ondas. Lo más destacable es que existen puntos en la pantalla a los que pueden llegar partículas cuando está abierta sólo la rendija 1 o sólo la rendija 2, pero a los que apenas llegan partículas cuando están abiertas ambas rendijas. Asimismo, existen puntos para los que el número de partículas que llegan cuando ambas rendijas están abiertas es mayor que la suma de las que llegaban atravesando la rendija 1 (cuando la 2 estaba cerrada) y las que llegaban atravesando la rendija 2 (cuando la 1 estaba cerrada).

La forma de estas curvas puede explicarse, una vez más, a partir de un formalismo tomado de la teoría ondulatoria. En efecto, supongamos que $p = \hbar k$ es el módulo del momento lineal de las partículas incidentes, donde $\hbar = h/(2\pi)$ es la constante de Planck racionalizada. De esta manera, el haz incidente viene descrito por una onda plana $\exp(ikx)$. Si suponemos que la interacción de las partículas con las rendijas es una colisión elástica, cada rendija se convierte en la fuente de una onda cilíndrica de vector de onda k, siendo coherentes ambas ondas emergentes, es decir, que tienen una misma fase bien definida. Para un instante t, las amplitudes de la onda 1 y la onda 2 en un punto $(0, z)$ de la pantalla serán respectivamente

$$\psi_1(0,z) = \frac{A}{\sqrt{r_1}} \exp(ikr_1) \qquad ; \qquad \psi_2(0,z) = \frac{A}{\sqrt{r_2}} \exp(ikr_2),$$

siendo r_1 y r_2 las distancias desde cada rendija al punto de la pantalla. Las intensidades de dichas ondas en dicho punto son

$$\begin{aligned} I_1(0,z) &= |\psi_1(0,z)|^2 = \frac{|A|^2}{r_1} = \frac{|A|^2}{\sqrt{d^2 + (z - a/2)^2}} \\ I_2(0,z) &= |\psi_2(0,z)|^2 = \frac{|A|^2}{r_2} = \frac{|A|^2}{\sqrt{d^2 + (z + a/2)^2}}, \end{aligned}$$

que son, por tanto, proporcionales a las probabilidades P_1 y P_2 de que una partícula impacte en un punto $(0, z)$ de la pantalla si sólo la rendija 1 o la rendija 2 está abierta, respectivamente. Ambas curvas presentan un único máximo (centrado en $z = \pm a/2$) y decrecen a medida que nos alejamos de él. Estas expresiones describen a las curvas 1 y 2 que, recordémoslo, son las que se obtienen cuando sólo la rendija 1 o sólo la rendija 2 está abierta. Por su parte, cuando ambas rendijas están abiertas la amplitud de la onda en $(0, z)$ sería la suma de las amplitudes de las dos ondas procedentes de 1 y de 2

$$\psi_{12}(0,z) = \psi_1(0,z) + \psi_2(0,z) = \frac{A}{\sqrt{r_1}} \exp ikr_1 + \frac{A}{\sqrt{r_2}} \exp ikr_2$$

y su intensidad

$$\begin{aligned} I_{12}(0,z) &= |\psi_{12}(0,z)|^2 = |\psi_1(0,z) + \psi_2(0,z)|^2 \\ &= |\psi_1(0,z)|^2 + |\psi_2(0,z)|^2 + \frac{2|A|^2}{\sqrt{r_1 r_2}} \cos[k(r_1 - r_2)], \end{aligned}$$

que es proporcional a la probabilidad P_{12} de que la partícula impacte el punto $(0, z)$ de la pantalla si ambas rendijas están abiertas. Si $d \gg a$ podemos