matemática: Una publicación del ICM – ESPOL
2012, Vol. 10, No. 1

MECÁNICA CUÁNTICA: POSTULADOS

Iza Peter[1]

Resumen. *La Mecánica Cuántica describe de una manera completa el mundo microscópico, y para esto el físico británico P.A.M. Dirac hace uso de los elementos básicos del álgebra lineal para lograrlo. Este trabajo da a conocer los postulados fundamentales de la mecánica cuántica haciendo uso de los espacios vectoriales y operadores cuánticos.*

Palabras clave: Mecánica Cuántica, Postulados, Operadores.

Abstract. *The microscopic world is fully described by the quantum mechanics and P.A.M. Dirac uses the basic elements of* linear algebra to do so. In this work the postulates of quantum mechanics are presented using vector spaces and quantum operators.

Key words: Quantum Mechanics, Postulates, Operators.

Recibido: Abril, 2012
Aceptado: Junio, 2012

1. INTRODUCCIÓN

A finales del siglo XIX, la mecánica clásica creada por Newton en el siglo XVII, y complementada por las ecuaciones de Maxwell en la segunda mitad del siglo XIX, proporcionaba un marco teórico suficiente para la comprensión del mundo macrocósmico. Pero entre 1925 y 1930 la Mecánica Cuántica (MC) surge con el propósito de explicar los fenómenos que tenían lugar en condiciones pocos usuales, como velocidades muy altas o a escala microscópica; y su desarrollo ha dependido en gran medida de la exactitud de los resultados numéricos obtenidos en sus observaciones [1].

Los modelos matemáticos propuestos para describir los fenómenos microcósmicos y su posterior interpretación, fueron muy diversos. En algunos casos, las matemáticas usadas resultaban insatisfactorias y en absoluto rigurosas, lo que motivo en parte el desarrollo de algunas de las ramas mas activas e interesantes de las Matemáticas. Una formulación matemática rigurosa de la MC fue desarrollada por el físico Dirac [2].

La notación de Dirac, como es conocida hoy en día, proporciona una presentación abstracta del álgebra lineal que le da soporte a la mecánica cuántica basada en un conjunto de postulados. En este artículo se presenta una enumeración canónica de dichos postulados fundamentales.

[1] *Peter Iza, Ph.D., Profesor del Instituto de Ciencias Físicas, ESPOL. (e mail: piza@espol.edu.ec).*

2. BASE MATEMÁTICA

Los objetos básicos del algebra lineal son los espacios vectoriales y los elementos de un espacio vectorial se denominan vectores. En la mecánica clásica, la posición o "estado" de una partícula se describe por un vector que tiene tres números reales (x, y, z); por ejemplo: el vector posición, $\vec{r} = x\hat{i} + y\hat{j} + z\hat{k}$ está representado en un espacio tridimensional.

Dirac haciendo uso de los conceptos del álgebra lineal establece que el estado de un sistema cuántico es descrito por un elemento perteneciente a un espacio vectorial abstracto llamado espacio de estados o de Hilbert y denotado por $\mathcal{E}$. Por ejemplo, se tiene el siguiente espacio:

$$\mathcal{E} = \{|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle, ..., |\Psi_n\rangle, ...\}$$

Según la notación de Dirac, un elemento del espacio $\mathcal{E}$ se llama ket y se denota por el símbolo $|\Psi_n\rangle$, donde Ψ_n representa el n-ésimo estado del sistema cuántico. Matemáticamente, siempre que se tenga un conjunto de vectores kets, se puede construir un segundo conjunto de vectores, denominados vectores duales. Por lo tanto, para los vectores kets existen los vectores bra, representados por el símbolo $\langle\ |$, imagen simétrica del símbolo de un ket. El producto escalar del bra $\langle\Psi_1|$ y del ket $|\Psi_2\rangle$ se lo escribe como:

$$\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle$$

y es conocido como un "braket".

Cualquier cantidad física experimentalmente medible como por ejemplo: la energía, el momento dipolar, momento angular orbital, el momento angular de espín o la energía cinética, cuyas expresiones en mecánica clásica puede escribirse en términos de las

posiciones cartesianas $\{q_i\}$ y los momentos $\{p_i\}$ de las partículas que componen el sistema de interés, se les asignan un correspondiente operador en la MC, conocido como un observable. Matemáticamente este observable es un operador lineal no comutable o Hermitiano para el que se puede encontrar una base ortonormal del espacio de estados, que consiste en los autovectores del operador.
Un operador es una instrucción que transforma un vector dado $|\Psi\rangle$ en otro vector $|\Psi'\rangle$. La acción del operador $\hat{\Omega}$ se la representa como:

$$\hat{\Omega}|\Psi\rangle = |\Psi'\rangle$$

El operador lineal obedece las siguientes reglas:

$$\hat{\Omega}\alpha|\Psi_i\rangle = \alpha\hat{\Omega}|\Psi_i\rangle$$

$$\hat{\Omega}\{\alpha|\Psi_i\rangle + \beta|\Psi_j\rangle\} = \alpha\hat{\Omega}|\Psi_i\rangle + \beta\hat{\Omega}|\Psi_j\rangle$$

donde α y β son constantes.

A un operador lineal $\hat{\Omega}$ se le puede asociar otro operador $\hat{\Omega}^\dagger$, llamado conjugado hermitiano de $\hat{\Omega}$, el cual debe satisfacer la siguiente igualdad, para cualquier vector Ψ_1 y Ψ_2:

$$\left\langle \Psi_1 \middle| \hat{\Omega}\Psi_2 \right\rangle = \left\langle \Psi_1 \middle| \hat{\Omega}^\dagger\Psi_2 \right\rangle$$

por lo tanto,

$$\hat{\Omega} = \hat{\Omega}^\dagger$$

Destaquemos cuatro propiedades importantes de estos operadores:

i) $\left(\hat{\Omega}^\dagger\right)^\dagger = \hat{\Omega}$;

ii) $\left(\hat{\Omega}\hat{\theta}\right)^\dagger = \hat{\theta}^\dagger\hat{\Omega}^\dagger$;

iii) $\left(\hat{\Omega} + \hat{\theta}\right)^\dagger = \hat{\Omega}^\dagger + \hat{\theta}^\dagger$;

iv) $\left(\lambda\hat{\Omega}\right)^\dagger = \lambda^*\hat{\Omega}^\dagger$, donde λ es un número complejo y λ^* es el complejo conjugado.

3. POSTULADOS

Los siguientes postulados de Mecánica Cuántica han sido adaptados de una manera sencilla; para esto se ha considerado como base algunos textos clásicos de la MC [2-5], ver bibliografía.

Postulado 1
El estado de un sistema físico en el tiempo *t* se define mediante la especificación de un ket $|\Psi(t)\rangle$ perteneciente al espacio de Hilbert ε. La función de onda $\Psi(t)$ es una representación del estado cuántico del sistema en una base particular del espacio de estados y contiene la información sobre el sistema en dicho instante. Es importante observar que, puesto que ε es un espacio vectorial, este primer postulado implica un principio de superposición, es decir, si los vectores $|\Psi_1\rangle$ y $|\Psi_2\rangle$ representa posibles estados de un sistema cuántico, el vector $|\Psi_3\rangle = \alpha|\Psi_1\rangle + \beta|\Psi_2\rangle$ representa también un posible estado del sistema.
Postulado 2
Una cantidad física medible *A* es descrita por un observable $\hat{A}$ actuando sobre ε. Este observable es un operador lineal y satisface una ecuación de autovectores de la forma:

$$\hat{A}|\Psi_n\rangle = a_n|\Psi_n\rangle,$$

en la que los autovalores (a_n) son números reales y las funciones propias $|\Psi_n\rangle$ forman un conjunto ortogonal completo en el espacio ε. Los autovalores, pueden tomar valores discretos o puede existir un rango continuo de valores, son reales si el operador correspondiente es hermitiano. Los autovectores $|\Psi_n\rangle$ del operador $\hat{A}$ constituyen un conjunto completo o normalizado, es decir

$$\sum_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n| = 1$$

Donde el 1 se entiende como el operador identidad, esta ecuación es conocida como relación de clausura.
Postulado 3
El único resultado posible de la medición de una magnitud física *A* es uno de los autovalores del correspondiente observable $\hat{A}$.
Postulado 4
Cuando la cantidad física *A* es medida sobre un sistema en el estado normalizado $|\Psi\rangle$, la probabilidad $P(a_n)$ de obtener el autovalor a_n del correspondiente observable $\hat{A}$ es:

$$P(a_n) = |\langle a_n|\Psi\rangle|^2$$

donde $|a_n\rangle$ es el autovector normalizado de $\hat{A}$ asociado al autovalor a_n. En mecánica clásica cuando un estado esta dado por (*x*, *p*), se puede decir

que si una variable ω es medida en ese estado, el resultado será $\omega(x,p)$. ¿Cuál será el planteamiento análogo en la mecánica cuántica? La respuesta se la puede hacer en base a los postulados anteriores:
1. Se construye el correspondiente operador cuántico $\Omega = \omega\left(x \to \hat{X}, p \to \hat{P}\right)$, donde $\hat{X}$ y $\hat{P}$ son operadores.
2. Se encuentra los autovectores ortonormales $\left|\omega_i\right\rangle$ y los autovalores ω_i de Ω.
3. Se expande $|\Psi\rangle$, o sea:

$$|\Psi\rangle = \sum_i |\omega_i\rangle\langle\omega_i|\Psi\rangle$$

4. La probabilidad $P(\omega)$ de que el resultado ω se obtenga es proporcional al cuadrado del módulo de la proyección de $|\Psi\rangle$ sobre el autovector $\left|\omega\right\rangle$, o sea $P(\omega) \propto \left|\langle\omega|\Psi\rangle\right|^2$. En términos del operador proyección $\hat{P}_\omega = |\omega\rangle\langle\omega|$,

$$P(\omega)\,\alpha\left|\langle\omega|\Psi\rangle\right|^2 = \left\langle\Psi\middle|\omega\right\rangle\left\langle\omega\middle|\Psi\right\rangle$$

$$= \left\langle\Psi\middle|\hat{P}_\omega\middle|\Psi\right\rangle$$

Cuando se realiza una gran cantidad de medidas de una variable dinámica en un sistema, sus resultados pueden ser diferentes, pero la media o valor esperado de todos los valores observados está dado por:

$$\langle\hat{A}\rangle = \left\langle\Psi\middle|\hat{A}\middle|\Psi\right\rangle$$

A la magnitud $\langle\hat{A}\rangle$ se la denomina valor esperado de la variable dinámica $\hat{A}$ en el estado cuántico $|\Psi\rangle$.

Postulado 5

La evolución temporal de un vector estado $\left|\Psi(t)\right\rangle$ de un sistema físico está descrita por la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar\frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}(t)\left|\Psi(t)\right\rangle$$

donde $\hbar = h/2\pi$ la constante de Planck racionalizada y $\hat{H} = H\left(x \to \hat{X}, p \to \hat{P}\right)$ es un observable asociado a la energÍa total del sistema en estudio, constituÍdo por tÉrminos de la energÍa cinÉtica y potencial, y H es el Hamiltoniano clásica. Las funciones de onda que son solución de la ecuación de Schrödinger tiene que cumplir con las siguientes propiedades:

- Tiene que ser cuadráticamente integrable.
- Ser finita en todo el rango de definición.
- Continua, ya que estas son la representación del movimiento físico de un sistema.

4. CONCLUSIONES

Los postulados que se acaban de presentar proporcionan un marco formal para el desarrollo e interpretación de la mecánica cuántica; la cual ofrece apenas predicciones probabilísticas para n estado del sistema mediante la función de onda Ψ; contraria a la mecánica clásica que es totalmente determinista. Los observables o variables dinámicas que se puedan medir aparecen como operadores. La medida de un observable es una operación física que proporciona un número real, la medida del observable es un valor propio del operador.

La Mecánica Cuántica representa una de las mayores revoluciones de la Física y propone un cambio radical sobre nuestra concepción de la realidad; como por ejemplo, la combinación lineal de los estados que es la base conceptual que permite construir aplicaciones como la criptografía cuántica y ordenadores cuánticos.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS Y ELECTRÓNICAS

[1]. **ESPINOZA M., IZA P.** (2011) Revista Investigación y Desarrollo, número 18, páginas 11-16.

[2]. **DIRAC P. A. M.** (1958). The Principles of Quantum Mechanics, Oxford University Press.

[3]. **SHANKAR R.** (1994) Principles of Quantum Mechanics, Kluwer Academic/ Plenum Publishers, Second Edition.

[4]. **COHEN-TANNOUDJI C.** (1977) Quantum Mechanics, John Willey & Sons.

[5]. **SAKURAI J.J.** (1994) Modern quantum Mechanics, Addison Wesley Pu. Co. Inc.