



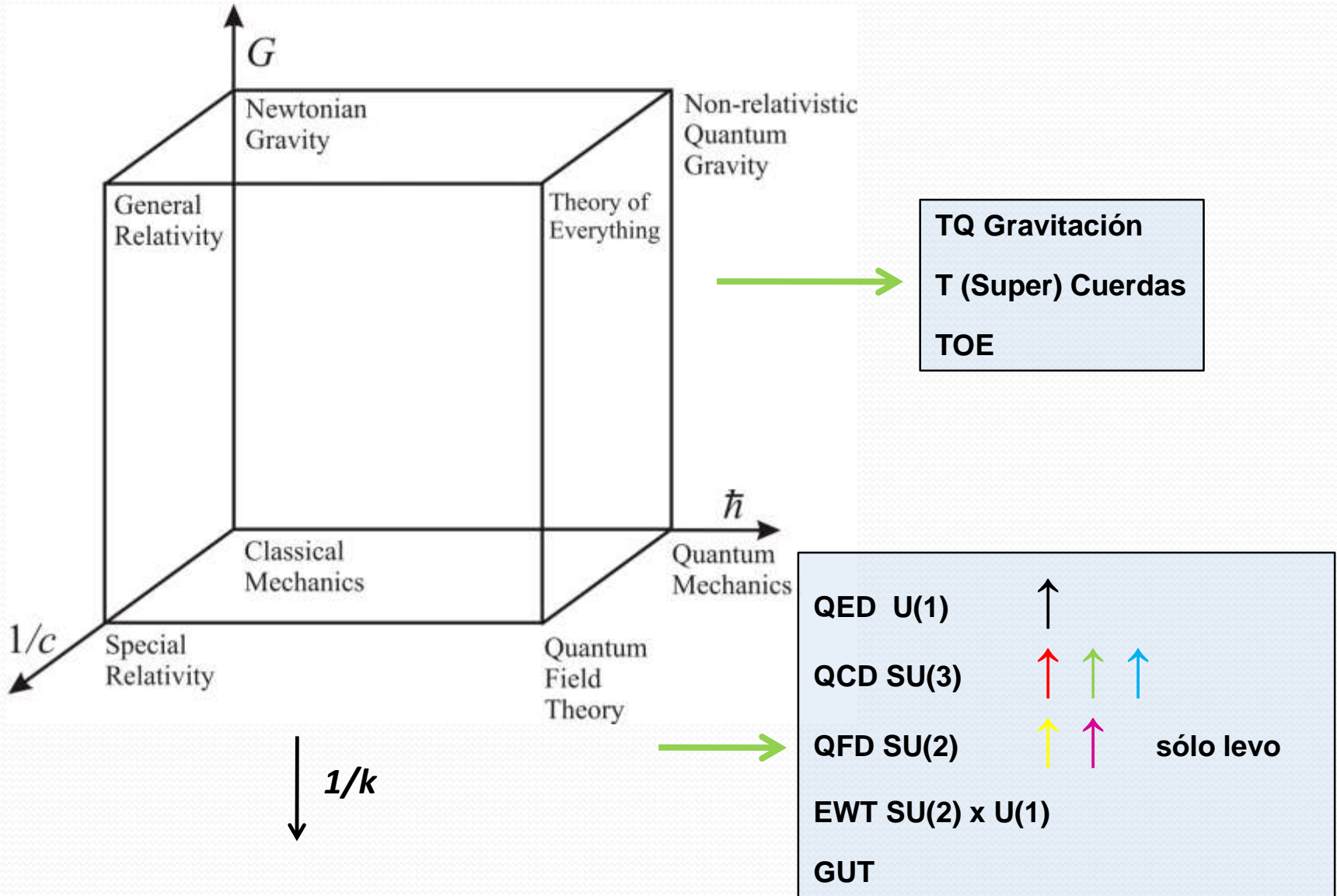
**BREVE INTRODUCCIÓN A LA
MECÁNICA CUÁNTICA**



Situación de la Mecánica Cuántica dentro de las Teorías Físicas

La Física Teórica en 5 minutos:

El cubo de las teorías físicas de Bronstein-Zelmanov-Okun



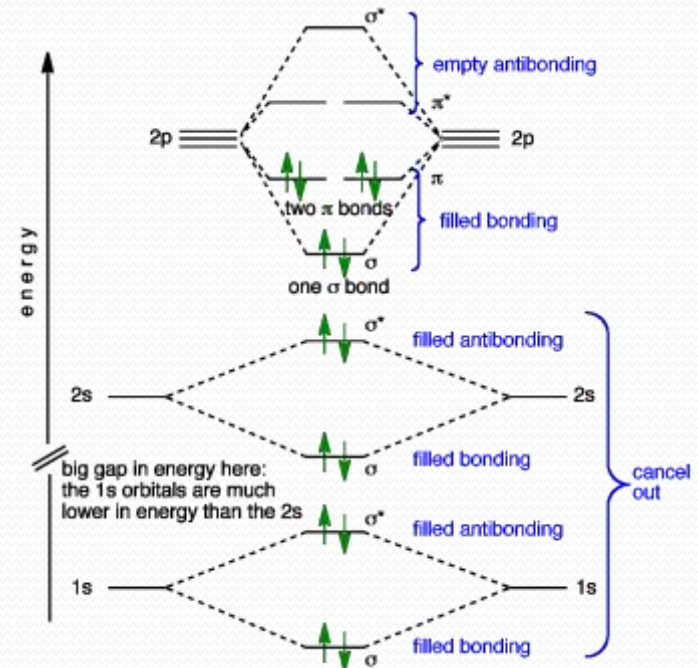
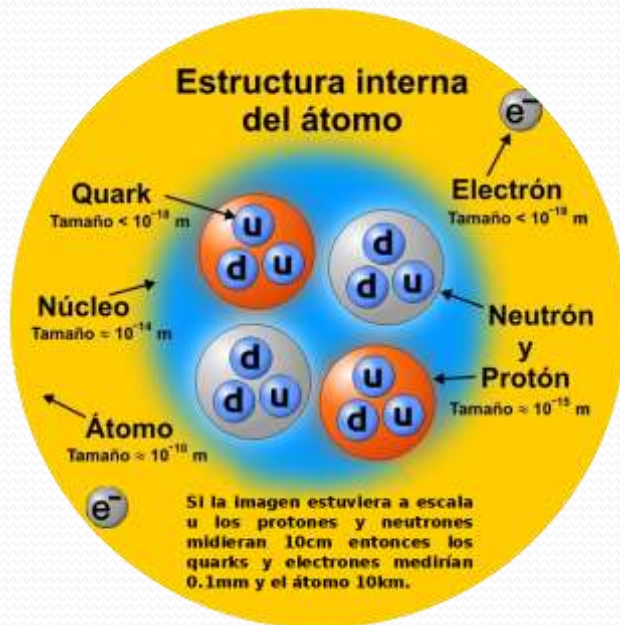
La Física Teórica en 5 minutos:

Las fuerzas fundamentales:

color
sabor (débil)
eléctrica
gravitatoria

Las fuerzas residuales:

Fuerza fuerte
Fuerza de saturación
Fuerzas químicas
Fuerzas de valencia





Desarrollo Histórico de la Mecánica cuántica

Estado de la Física hacia 1900 (I)

Dos grandes cuerpos de doctrina:

Mecánica (en sus varias formulaciones)

Newton había puesto las bases de la Mecánica y de la gravitación

- Newton
- Euler-Lagrange
- Hamilton
- Adams y Le Verrier predicen la existencia de Neptuno (1846)

Electromagnetismo

Maxwell sintetiza y completa sus leyes.

Determinismo clásico

Se cuenta que cuando **Pierre Simon Laplace** (1749-1827) presentó a **Napoleón** su libro “Traité de Mécanique céleste”, éste -que había sido alumno suyo en la Escuela Militar-, le comentó: “Habéis escrito un libro sobre el sistema del Universo, sin haber mencionado ni una sola vez a su Creador”.

A lo que el autor contestó: “Sire, no he necesitado esa hipótesis”

Estado de la Física hacia 1900 (II)

Durante el Siglo XIX:

- se realizan estudios de Termodinámica
- se crea la Mecánica Estadística
Maxwell
Boltzmann
- Se inicia el estudio experimental sistemático de los espectros de elementos y se define la noción de cuerpo negro
- Se estudian rayos X, α , β , γ , catódicos, anódicos ...

William Thompson (Lord Kelvin): “En Física ya no queda nada nuevo por descubrir. Todo lo que resta por hacer son mediciones más y más precisas”.

“La física es un conjunto perfectamente armonioso y en lo esencial acabado, en el que sólo veo dos pequeñas nubes oscuras: el resultado negativo del experimento de Michelson y Morley, y la catástrofe ultravioleta en la explicación de la radiación del cuerpo negro”.

Antigua
Teoría del
Cuanto
(1900-1923)


Termodinámica de la radiación (Teoría del cuerpo negro)

Mecánica
estadística

Maxwell
Boltzmann

**Primer acto:
Hipótesis del cuanto
de acción de Planck**

**La radiación electromagnética se
emite y se absorbe sólo en cuantos o
paquetes de energía, no de forma
continua
(cuanto de acción de Planck)**



Estudio de
los
espectros

La cuantización de la energía resuelve el problema

Max Planck: Logra resolver el problema suponiendo que la energía se emitía sólo como múltiplo de un valor básico, la energía se intercambia en cuantos



$$E = nh\nu$$

Diagram illustrating the equation $E = nh\nu$ with labels:

- Nº entero** (Integer number) pointing to n
- constante** (Constant) pointing to h
- frecuencia** (Frequency) pointing to ν

$$h = 6,6 \times 10^{-34} \text{ J.s}$$

La constante es muy pequeña

Premio Nobel de Física 1918

Fue "un acto de desesperación, pues tenía que obtener un resultado que coincidiera con los datos bajo cualquier circunstancia y a cualquier costo"

Segundo acto: Los cuantos de luz El efecto fotoeléctrico

- **La radiación electromagnética (por ejemplo la luz) puede arrancar electrones de la superficie de algunos metales**
- **La luz de alta frecuencia arranca electrones, aún con baja intensidad**
- **La luz de baja frecuencia no, aun con alta intensidad**
- **La luz tratada como un fenómeno ondulatorio, no permite explicar este efecto**

La radiación electromagnética presenta propiedades ondulatorias y corpusculares



La Dualidad onda-partícula

Versión 1: corpúsculos de radiación

Albert Einstein: Utilizó la idea de Planck para explicar el efecto fotoeléctrico. Cada radiación electromagnética, tiene localizada su energía en fotones individuales.

Con energía:

$$E = h\nu$$

y momento lineal:

$$p = \frac{h}{\lambda}$$



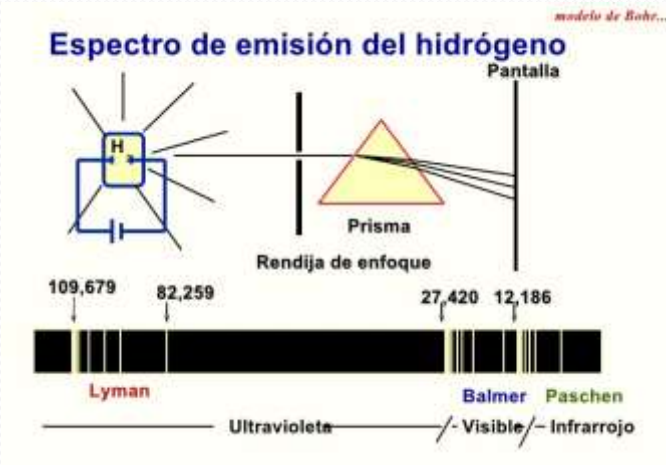
Carácter dual (onda-partícula) de la luz



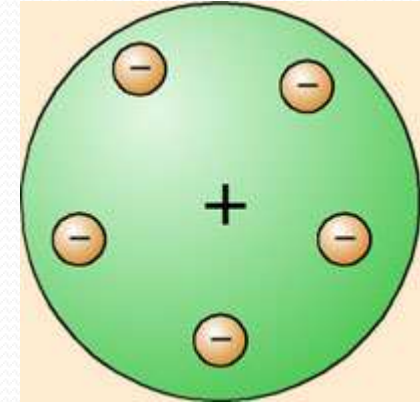
La intensidad de la onda luminosa es proporcional al número de fotones

Premio Nobel de Física 1921

Estudio de los espectros de los átomos



Modelo atómico de Thomson (1904)



Inicio del Tercer acto
(fallido):
Modelo atómico de
Thompson – Haas (1910)-
Schidlof (1911)

La primera conferencia Solvay de 1911: “La radiación y los cuantos”.

El cuanto se extiende

La Primera conferencia Solvay fue la primera de las Conferencias científicas en el sentido moderno. Colocó la TEORÍA DEL CUANTO en el centro de las discusiones de los grandes físicos del momento.

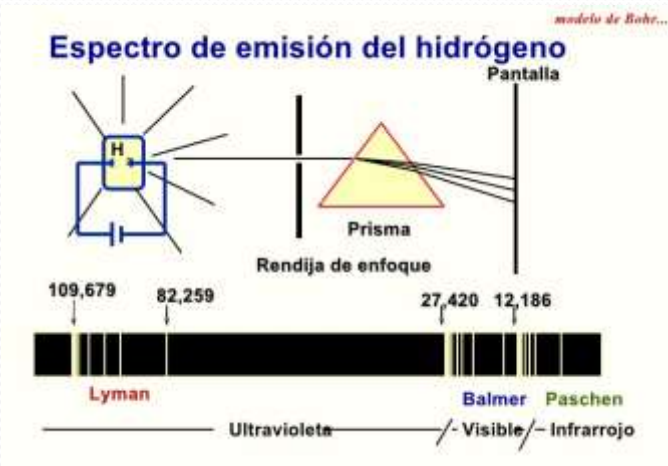
Arnold Sommerfeld asumió el papel protagonista y fue el encargado de convencer a significados científicos, sobre todo al grupo francés, con Henri Poincaré a la cabeza, de la importancia de la TEORÍA DEL CUANTO.

Fue organizada por Nernst con el apoyo de Planck.

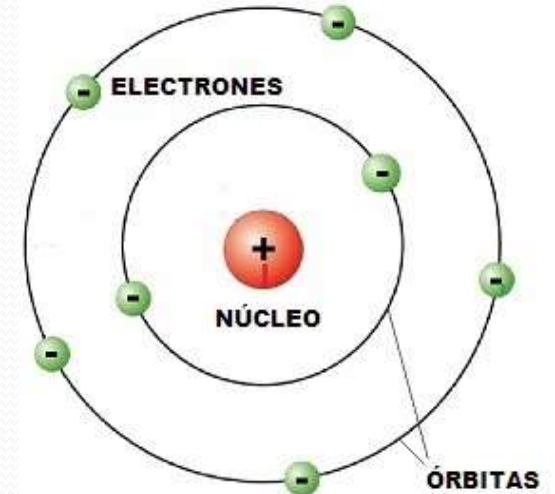


A partir de esta conferencia el cuanto se sitúa en el centro del escenario

Estudio de los espectros de los átomos



Modelo atómico planetario de Rutherford (1911)



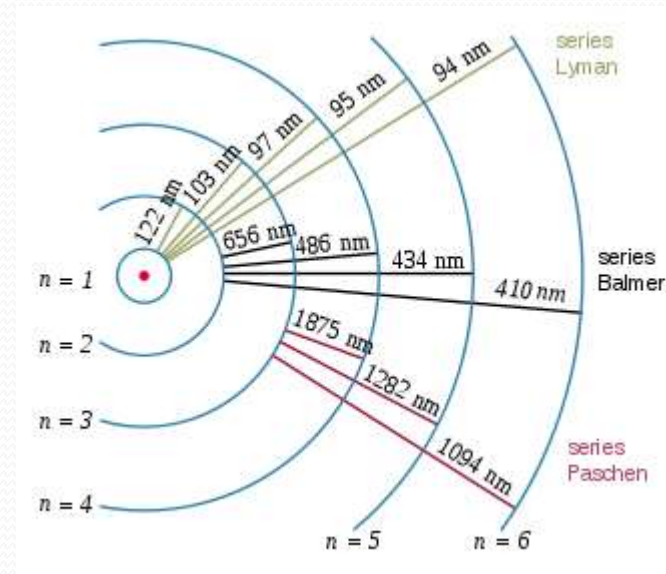
Tercer acto (exitoso):
Rutherford – Bohr
(1913)

Modelo atómico de Bohr

Niels Bohr: Modifica el modelo “planetario” de Rutherford, postulando la existencia de estados electrónicos estacionarios con niveles de energía, también múltiplos de h . Explica, utilizando el valor de h , el espectro del átomo de hidrógeno y, con ello se establecen los principios básicos de la estructura electrónica de la materia.



Premio Nobel de Física 1922

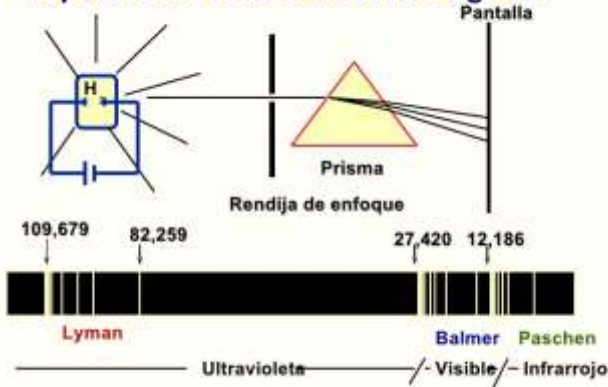


Estudio de los espectros de los átomos

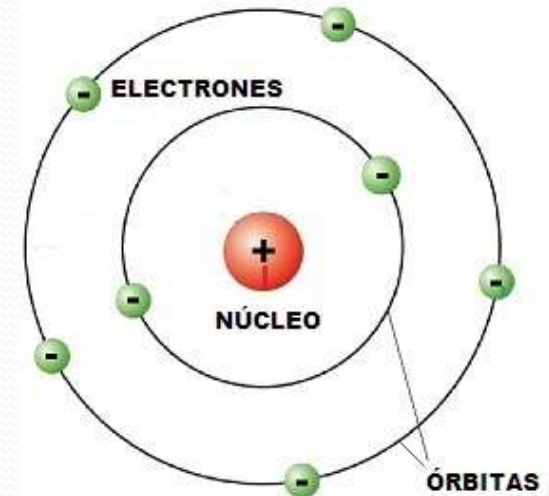
Efectos Zeeman y Stark

modelo de Bohr...

Espectro de emisión del hidrógeno



Modelo atómico planetario de Rutherford



**Final del Tercer acto (exitoso):
Sommerfeld - Wilson - Ishiwara
(1916)**

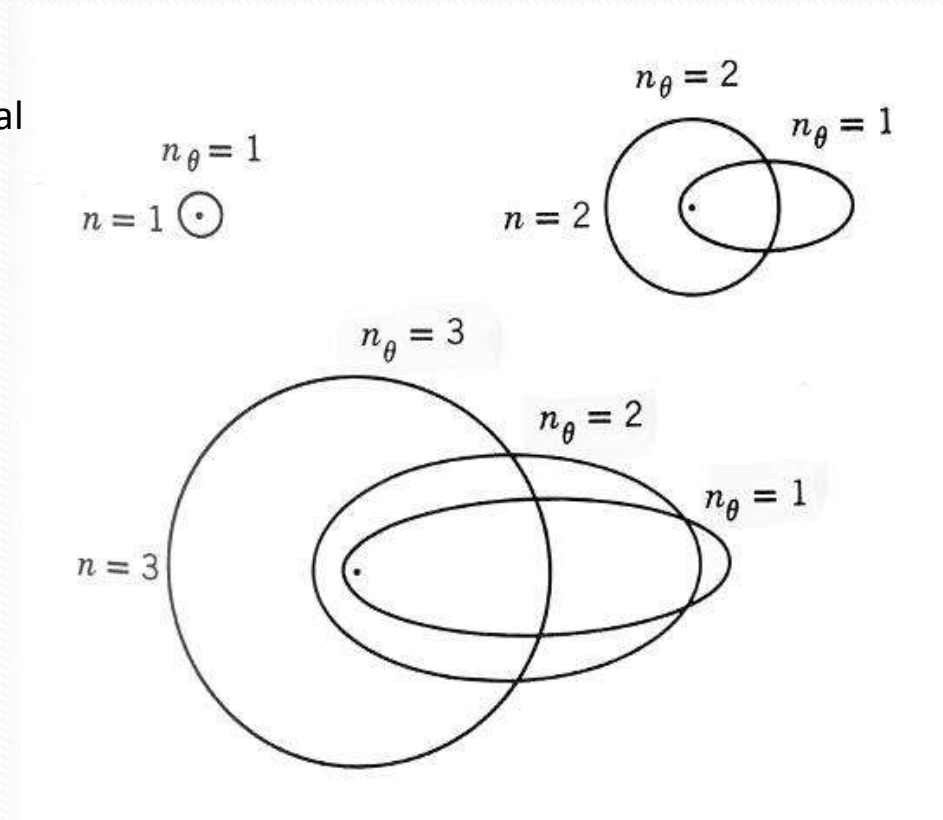
Modelo atómico de Sommerfeld-Wilson-Ishiwara

Sommerfeld: Completa el modelo de Bohr con **órbitas elípticas**. Explica el desdoblamiento de las líneas espectrales.

Números	n	principal
cuánticos:	l	orbital o azimutal
	m	magnético



Arnold Sommerfeld



Interludio ondulatorio: Hipótesis de de Broglie

- **Toda partícula de materia tiene una onda asociada**
- **Se completa así la dualidad onda-partícula**
- **Obtiene las reglas de cuantización de Bohr y Sommerfeld exigiendo que se incluya un número entero de ondas en una órbita estacionaria**
- **Por primera vez se asocia a los electrones de las órbitas atómicas una onda estacionaria**

**La materia presenta propiedades
ondulatorias y corpusculares**



La Dualidad onda-partícula

Versión 2: ondas de materia

La luz, que “indudablemente” se propaga como una onda o vibración electromagnética, se comporta también como una partícula.

Louis De Broglie (1923-1924): Postula que, recíprocamente, las partículas elementales (y toda la materia) podrían tener naturaleza ondulatoria:



“toda porción de materia sustancial, en movimiento, con velocidad v y masa m está asociada con una radiación de longitud de onda λ y frecuencia ν , que cumple”:

$$E = h\nu \qquad \lambda = \frac{h}{p}$$

La materia, que “indudablemente” se propaga como una partícula, se comporta también como una onda.

Premio Nobel de Física 1929

Mecánica
Cuántica
Moderna
(1926)

Mecánica Ondulatoria y Mecánica Matricial

Dualidad onda -corpúsculo
de de Broglie

Ecuación eikonal de óptica
Ecuación de Hamilton -
Jacobi

Dinámica de Hamilton,
paréntesis de Poisson

Mecánica Ondulatoria de
Schrödinger

Mecánica de matrices de
Heisenberg y Dirac



La búsqueda de una ecuación de ondas para la materia: Ecuación de Schrödinger

En otoño de 1925 la Universidad de Zúrich y la Escuela Politécnica de Zúrich organizaban conjuntamente un colloquium quincenal sobre los artículos científicos más recientes.

Debye (Escuela Politécnica de Zúrich) a Schrödinger (Universidad de Zurich) en octubre de 1925:

“Schrödinger, Ud. no está trabajando ahora en ningún problema importante. ¿Por qué no nos cuenta en alguna sesión algo acerca de la tesis de de Broglie?”



Premio Nobel de Física 1933

En uno de los coloquios siguientes, Schrödinger expone las ideas de de Broglie, pero Debye señaló que, para tratar adecuadamente con ondas, era necesario tener una ecuación de ondas.

Algunas semanas después, Schrödinger pronuncia otra conferencia y comienza diciendo:

“Mi colega Debye sugirió que se debería tener una ecuación de ondas; bien, yo he encontrado una”.

Ecuación de Schrödinger

Puede describirse el estado y evolución temporal de una partícula en movimiento no relativista mediante una ecuación diferencial, cuya solución es una función periódica (como la ecuación de una onda), aunque no hay acuerdo sobre cómo interpretar la realidad física.

Óptica ondulatoria
(ecuación de propagación)



Óptica geométrica
(ecuación eikonal)

Mecánica ondulatoria
(ecuación de ondas)



Mecánica clásica
(ecuación de Hamilton-Jacobi)

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t, \vec{r})}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(t, \vec{r}) + V(\vec{r}, t) \Psi(t, \vec{r})$$

Queda por interpretar el significado del campo de materia, la función de onda.

Interpretación del campo de materia

¿En qué consiste la naturaleza ondulatoria de la materia? ¿qué es lo que “vibra”?

De la misma manera que explicamos la naturaleza de la luz y otras radiaciones, como oscilaciones de un campo electromagnético, debemos imaginar la existencia de un “campo de materia”, que vibra, asociado a la partícula.

PERO

La función de onda, el campo de materia, **no tiene significado físico, no es una magnitud que se pueda medir, no tiene unidades** como lo puede tener el campo de radiación, el campo electromagnético.

La Mecánica Matricial

Una formulación alternativa fue iniciada en 1925 por Heisenberg, Born, Jordan y Dirac.

Schrödinger demuestra la equivalencia entre las formulaciones ondulatoria y matricial



Los principios esenciales de la Mecánica Cuántica



Naturaleza dual: experimento de la doble ranura

Principio de incertidumbre

Principio de superposición

Principio de interferencia

Principio de descomposición espectral

Principio generalizado de descomposición espectral

Principio de complementariedad

Colapso de la función de onda

Interpretación estadística

La quinta conferencia Solvay de 1927: los debates Bohr-Einstein

Naturaleza dual de la luz: la doble ranura (I)

Experimento de la doble ranura de Young con fotones (I):

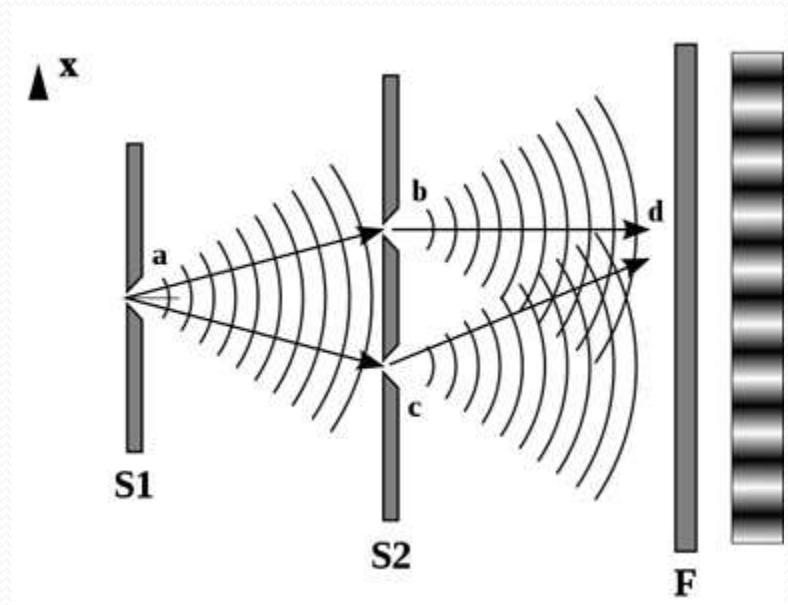
Elevado número de fotones

De acuerdo con Einstein, según la interpretación que hizo del efecto fotoeléctrico:

- la energía de una onda luminosa se transporta por fotones.
- la intensidad de la onda es proporcional al número de fotones.

Si un haz luminoso se hace atravesar una doble ranura (con las dimensiones adecuadas) y después recogemos sobre una pantalla la luz transmitida observamos la característica **pauta de interferencia**.

Hay que admitir entonces que los fotones llegan en mayor número sobre las franjas brillantes que sobre las oscuras.



Naturaleza dual de la luz: la doble ranura (II)

Experimento de Young de la doble ranura con fotones (II):

Un solo fotón

El mismo resultado se obtiene si vamos disminuyendo indefinidamente la intensidad del haz luminoso utilizando una luz tan débil hasta que cada vez pase por el orificio **un solo fotón** y lleguen uno a uno sobre la placa fotográfica. Después de un tiempo de exposición suficientemente largo, se ven dibujarse las mismas franjas que en la luz intensa.

Las características ondulatorias no son propias del haz luminoso como tal, sino que son inherentes a cada fotón en particular.

Cada fotón individual, no es sólo un corpúsculo caracterizado por su energía sino que también tiene propiedades de onda y puede sufrir los fenómenos de interferencia propios de todo movimiento ondulatorio.

- **Incluso un solo fotón presenta propiedades ondulatorias.**
- **Cada fotón individual**, de alguna manera, ha viajado por las dos rutas a la vez.

Naturaleza dual de la partícula: la doble ranura (I)

Experimento Jönsson de la doble ranura con electrones: Interferencia de electrones (1961)

Las ondas de materia (electrones) tienen la propiedad de difractarse e interferir, exactamente como las ondas luminosas.

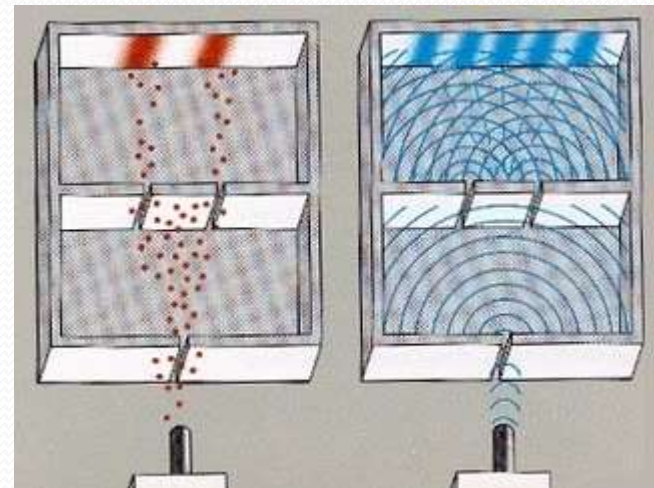
Las experiencias de interferencias se consiguen también con rayos tan débiles que los electrones llegan **aisladamente** al interferómetro.

Cada electrón individual, también tiene propiedades de onda y puede sufrir los fenómenos de interferencia propios de todo movimiento ondulatorio.

¿por qué ranura pasa el electrón? por ambas.

El electrón presenta un patrón de interferencia como una onda pero, cuando impacta en el detector se comporta como una partícula.

Pero si intentamos ver por dónde pasa, colocando un detector en una de las dos rendijas, se destruye el patrón de interferencia.



Incluso un solo electrón presenta propiedades ondulatorias.

Principio de Incertidumbre (I)

Al revés que en el mundo macroscópico, a nivel cuántico, magnitudes como velocidad y posición no son independientes o no son las adecuadas para describir los entes cuánticos. Se cumple la relación de Heisenberg:

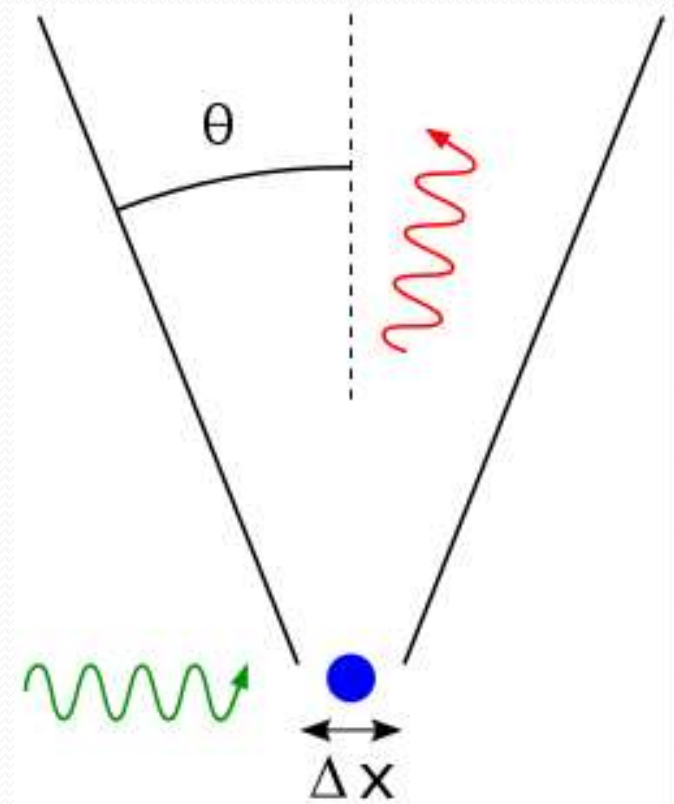
$$\Delta x \cdot \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

El microscopio de Heisenberg: Medir es perturbar

Para poder “ver” al electrón, inicialmente en reposo, tenemos que enviarle un fotón luminoso que “rebote” sobre dicho electrón. Al recibir al fotón rebotado en un detector, en la lente de un microscopio, sabiendo de dónde vino el fotón podemos determinar la posición inicial del electrón.

PERO

Al enviarle al electrón un fotón que posee un momento $p = h/\lambda$, al **chocar** el fotón con el electrón habrá una transferencia de momento que pondrá en movimiento al electrón que estaba en reposo, y ahora su posición se vuelve incierta.



Principio de Superposición (I)

Cuando en un sistema cuántico se va a hacer una medición de una magnitud (observable físico), la situación antes de la medida no está definida, el sistema se encuentra en un estado de indefinición o en un estado suspendido.

El sistema se encuentra en una superposición de cierto número de estados simultáneos admisibles (descritos por la ecuación de Schrödinger).

Si voy a medir la posición de un electrón en un átomo de H, antes de medir, el electrón no está en ningún sitio y está en todos los sitios a la vez. Sólo adquiere un valor determinado cuando se mide.

Un sistema “clásico”, por el contrario, puede tener varios estados, comparables entre sí, pero no “superpuestos”.

Yo (el observador) no puedo saber dónde está exactamente el electrón (principio de indeterminación y principio de superposición) pero, ¿el propio electrón “sabe” dónde está?

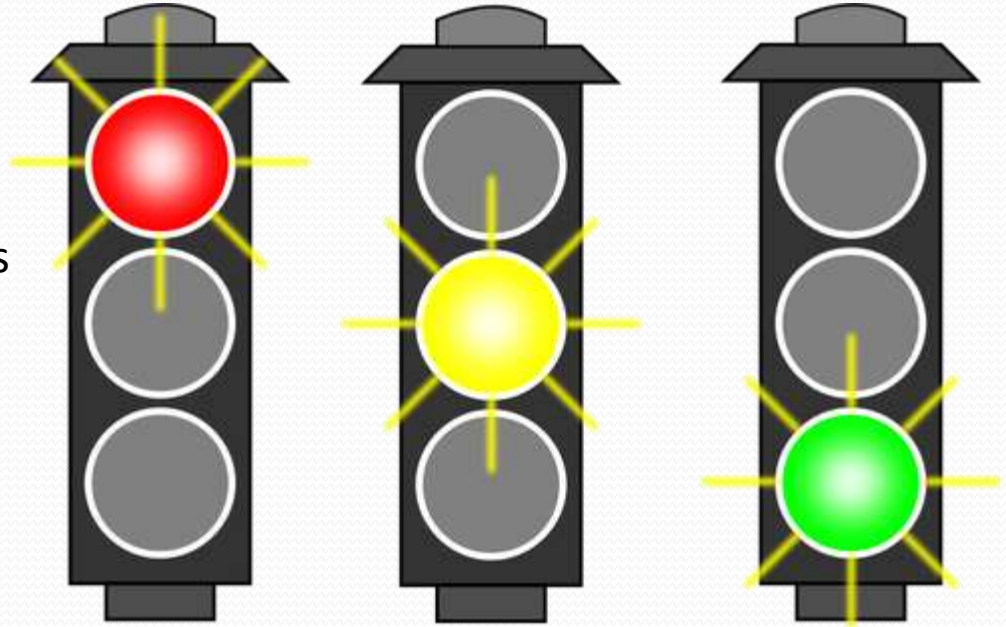
Principio de Superposición (II)

Ejemplo 1: Sistema de tres estados posibles

Consideremos los tres estados posibles de un semáforo:

Si es un **semáforo clásico** sabemos que aunque no lo estemos mirando, el semáforo está alguno de los tres estados. Con los datos necesarios, podríamos predecir, con total precisión su estado real.

Sin embargo, si fuera un **sistema cuántico**, el semáforo se encontraría simultáneamente en una superposición de los tres estados. Sólo podríamos calcular la **probabilidad** en que lo encontraríamos al observarlo.



Pero esto no se debe a que nos falten conocer datos. El semáforo tendría un estado determinado, sólo después de ser observado (colapso de la función de onda).

Principio de Superposición (III)

Ejemplo 2: Sistema de dos estados posibles

Antes de realizar la medida el electrón está en un estado superposición.

Esto nos permite asociar a uno de estos estados el significado lógico de 0 y al otro el significado lógico 1. Obtenemos así una superposición de estados

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$$

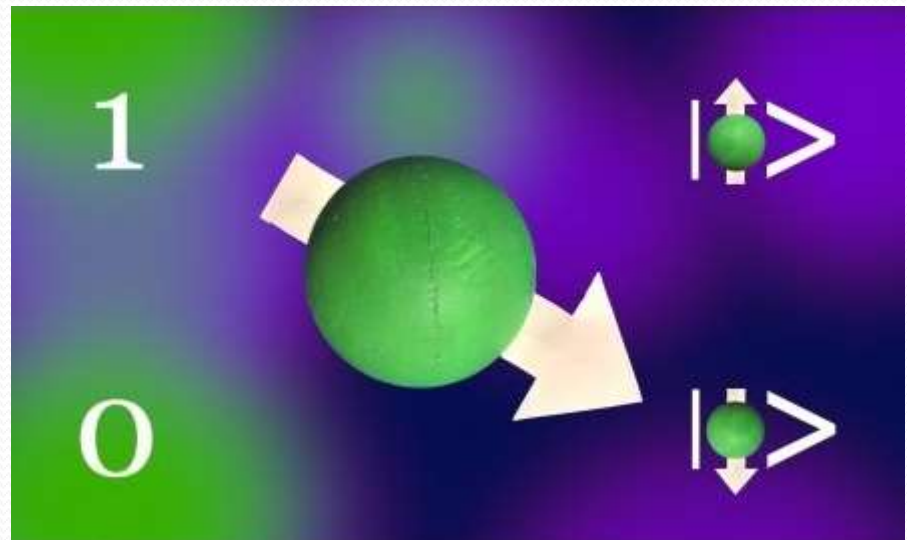
donde α y β son en general números complejos.

Este sistema podría representar un qubit

Un electrón orbitando en un átomo de hidrógeno tiene dos estados posibles de spin.

$$\uparrow = \left| +\frac{1}{2} \right\rangle$$

$$\downarrow = \left| -\frac{1}{2} \right\rangle$$



El ejemplo del semáforo sería un qutrit

Principio generalizado de descomposición espectral

Puede entonces enunciarse el *principio generalizado de descomposición espectral*:

descomponiendo la función de onda que representa el estado de un sistema físico según las funciones propias de un operador A , la intensidad de cada una de las funciones propias de la descomposición es igual a la probabilidad de que una medida de la magnitud a dé el correspondiente valor propio del operador.

Principio de complementariedad



Onda y partícula son aspectos complementarios, aunque incompatibles, de la misma cosa y de la misma situación real. Según el modo de observación, un sistema cuántico aparecerá como onda o como partícula. Para describirlo completamente es necesario considerar ambos aspectos.

Premio Nobel de Física 1922

Colapso de la función de onda

Aún más desconcertante: cuando medimos, perturbamos el sistema, vamos a producir un colapso de la función de onda del sistema y además ese colapso es probabilístico, es aleatorio, no vamos a poder predeterminar en qué sentido va a colapsar, más allá de las probabilidades de que colapse en alguno de los sentidos admisibles.

O sea en MQ el futuro no está determinado por el presente. Esa es una de las grandes rupturas con la Física Clásica.

Es decir, un sistema cuántico puede evolucionar de dos maneras:

- **de forma determinista de acuerdo con la ecuación de Schrödinger,**
- **de forma totalmente probabilística y súbita en el proceso de medida, colapsando a cualquiera de los posibles estados permitidos**

Interpretación estadística o probabilística:

Interpretación de Born

La intensidad del campo de materia, es decir de la onda asociada a una partícula, es igual en cada punto y en cada instante, a la *probabilidad* de que la partícula pueda ser registrada en ese punto y en ese instante.

Cuando vamos a medir alguna propiedad A en un sistema físico, descomponiendo la función de onda que representa el estado de un sistema según las funciones propias de un operador A, la intensidad de cada una de las funciones propias de la descomposición da la probabilidad de que una medida de la magnitud A dé el correspondiente valor propio del operador.

No busquéis nada detrás de los hechos

La probabilidad es intrínseca y no subjetiva

Probabilidad subjetiva:

El lanzamiento de una moneda

Se renuncia a hacer un cálculo exacto de la trayectoria, aunque se podrían considerar todo un conjunto de variables: posición, velocidad inicial, altura, presión, temperatura, velocidad del aire etc. que por comodidad o por imposibilidad práctica, no teórica, no se tienen en cuenta.

Probabilidad intrínseca: Variables ocultas

Cuando vamos a medir alguna propiedad en un sistema físico, aunque conozcamos perfectamente todo lo que tengamos que conocer del sistema físico, hay una imposibilidad de predecir el resultado. **No existen variables desconocidas ni ocultas.**

Si tenemos dos sistemas físicos idénticos y medimos la misma cosa puede pasar que en uno nos dé un resultado y en otro nos de otro. Lo único que vamos a saber son las probabilidades de obtener alguno de los resultados admisibles.

La quinta conferencia Solvay de 1927:

“Electrones y fotones”

Los debates Bohr - Einstein

Se celebra en Bruselas en 1927 y acuden los más importantes físicos del momento.

Todos ellos creadores de la nueva Mecánica Cuántica.

Se debaten dos interpretaciones de la Mecánica Cuántica:

La **interpretación probabilística**, defendida por Bohr, Born, Heisenberg y Dirac, que presentan una interpretación compacta y coherente, capaz de explicar todos los hechos conocidos y sin contradicciones internas.

La **interpretación determinista**, reclamando que la anterior está incompleta, defendida por Einstein y Schrödinger (con de Broglie), que presentan una serie de objeciones, pero sin una teoría alternativa.

Todos los argumentos y objeciones del grupo determinista son respondidos de forma que la primera interpretación pasa a ser la **interpretación ortodoxa o interpretación de Copenhague**.

Ni Einstein ni Schrödinger aceptaron nunca la interpretación ortodoxa y plantearon experimentos mentales que pusieran de manifiesto su incompletitud. Más tarde, abandonan la interpretación ortodoxa también de Broglie y D. Bohm.

Desaparición del concepto de órbita y de trayectoria

Trayectorias y órbitas: si no es posible seguir la trayectoria de un electrón, posición y velocidad en cada instante, porque lo prohíbe el principio de Heisenberg, nos vemos obligados a renunciar al concepto de trayectoria y de órbita de un electrón alrededor del núcleo atómico.

Funciones de onda y orbitales: el concepto de órbita debe sustituirse por el de función de onda o función orbital (abreviadamente orbital atómico o molecular) que es la región del espacio alrededor del núcleo del átomo donde la probabilidad de hallar al electrón es más alta (se acostumbra a representar un 90 o un 95 % de probabilidad de presencia).

El problema de los dos cuerpos cuántico: Función de onda de un electrón en un átomo

