

**Estado cuántico:**

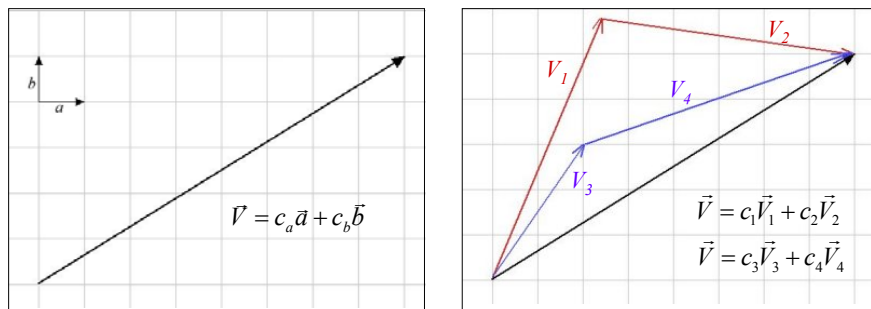
Cualquier movimiento no perturbado que esté restringido por tantas condiciones como sea posible teóricamente sin que existan interferencias o contradicciones entre ellas.

Estado en el que un sistema cuántico pueda encontrarse

Queda completamente especificado por un espacio vectorial, una función de onda o un conjunto completo de números cuánticos.  $|n_e, N \Psi_0\rangle$

**Principio de superposición de los estados:**

Cuando un sistema se encuentra en un estado cuántico dado, podemos considerar que se encuentra parcialmente en otros 2 ó + estados.



**Estado cuántico:**

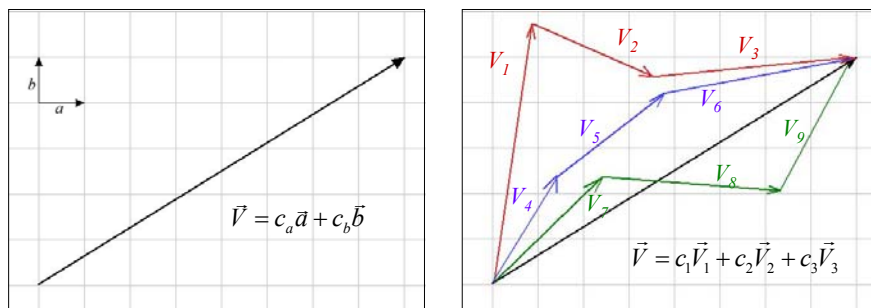
Cualquier movimiento no perturbado que esté restringido por tantas condiciones como sea posible teóricamente sin que existan interferencias o contradicciones entre ellas.

Estado en el que un sistema cuántico pueda encontrarse

Queda completamente especificado por un espacio vectorial, una función de onda o un conjunto completo de números cuánticos.

**Principio de superposición de los estados:**

Cuando un sistema se encuentra en un estado cuántico dado, podemos considerar que se encuentra parcialmente en otros 2 ó + estados.



**Principio de superposición de los estados:**

**Es de naturaleza no clásica**

Consideremos la superposición de los estados **A** y **B** tales que  
 Al realizar una observación del estado **A**, obtenemos el resultado particular **a**  
 Al realizar una observación del estado **B**, obtenemos el resultado particular **b**

¿Cuál será el resultado de observar el sistema descrito por la superposición de **A** y **B**?

Algunas veces **a** y algunas veces **b**  
 De acuerdo con los pesos relativos con que **A** y **B** contribuyen a la superposición  
 Pero nunca diferente de **a** ó **b**

$$C = (0.9)^{1/2} A + (0.1)^{1/2} B$$

$$D = (0.6)^{1/2} A + (0.4)^{1/2} B$$

$$E = (0.2)^{1/2} A + (0.3)^{1/2} B + (0.5)^{1/2} F$$

Si repetimos la observación un gran número de veces obtendremos...

90 % a  
10 % b

60 % a  
40 % b

20 % a  
30 % b  
50 % f

**Operadores:**

**Operador:** Símbolo o notación abreviada de un conjunto bien definido de operaciones matemáticas que actúan sobre una función:

$$\hat{O} f = c \quad \hat{O} f_1 = f_2$$

Ejemplos:  $\frac{d(\ )}{dx}$      $\int_a^b (\ ) dx$

**Autovalores y autofunciones:**  $\hat{A}\phi = a\phi$

**Propiedades de los operadores:**

Suma de operadores  $\hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A}$   
 $(\hat{A} + \hat{B})\phi = \hat{B}\phi + \hat{A}\phi$

Operadores:Propiedades de los operadores:

Producto de operadores  $\hat{A}\hat{B}\phi = \hat{A}(\hat{B}\phi)$

$$\hat{A}\hat{A}\hat{A}\dots\hat{A}\phi = \hat{A}^n\phi$$

$$\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A} \quad \text{En general no conmutan}$$

Operador conmutador:  $\{\hat{A}, \hat{B}\} = \{\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\}$

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} \neq 0 \quad \hat{A} \text{ y } \hat{B} \text{ no conmutan}$$

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} = 0 \quad \hat{A} \text{ y } \hat{B} \text{ conmutan}$$

**Si 2 operadores conmutan** las funciones propias de uno lo son también del otro Y sus variables dinámicas se pueden medir simultáneamente con "cualquier" exactitud.

**Si 2 operadores NO conmutan** sus variables asociadas se conocen como Canónico-conjugadas y están relacionadas por el principio de incertidumbre.

Operadores:Propiedades de los operadores:**Operadores lineales:**

$$\hat{O}(c_i\phi_i) = c_i\hat{O}\phi_i$$

$$\hat{O}(c_1\phi_1 + c_2\phi_2 + c_3\phi_3 + \dots + c_n\phi_n) = c_1\hat{O}\phi_1 + c_2\hat{O}\phi_2 + c_3\hat{O}\phi_3 + \dots + c_n\hat{O}\phi_n$$

$$\hat{O}\left(\sum_{i=1}^n c_i\phi_i\right) = \sum_{i=1}^n c_i\hat{O}\phi_i$$

**Operadores hermíticos:**

$$\int \phi_i^* \hat{O}\phi_j = \int \phi_j (\hat{O}\phi_i)^* = \int \phi_j \hat{O}^* \phi_i^*$$

Los autovalores correspondientes a operadores hermíticos son números reales.

Las autofunciones de un operador hermítico correspondientes a diferentes autovalores son ortogonales

Postulados de la Mecánica Cuántica:**Postulado 1: La función de onda**

“Para todo sistema aislado existe una función de las coordenadas ( $q_i$ ) y del tiempo ( $t$ ) tal que esta función contiene toda la información posible acerca del estado del sistema, incluyendo cualquier incertidumbre inherente. Esta función se denomina función de onda o función de estado.”  $\Psi(q_1, q_2, \dots, q_n, t)$

Es una función de variables reales y naturaleza compleja

Debe interpretarse en términos estadísticos, o sea da información sobre la probabilidad de que un sistema se encuentre en una determinada región del espacio en un instante dado.

Es una medida de la existencia de un sistema:

$\Psi = 0 \rightarrow$  el sistema no existe

$\Psi \neq 0 \rightarrow$  existe una región del espacio donde el sistema existe

$\therefore \Psi$  está relacionada con la probabilidad de encontrar el sistema en una región del espacio a un tiempo  $t$ , pero dado su carácter complejo ella misma no puede ser una representación de probabilidad:

$$\Psi\Psi^* = |\Psi|^2 \quad \begin{array}{l} \text{Distribución de probabilidad o} \\ \text{Densidad de probabilidad} \end{array}$$

La  $\Psi$  tiene que estar normalizada:  $\int \Psi(q_i, t)\Psi^*(q_i, t)d\zeta = 1$

**La función de onda**

*En mecánica clásica se puede distinguir entre partículas idénticas a partir de la trayectoria. En mecánica cuántica no es posible conocer la trayectoria, por lo tanto no es posible distinguir entre partículas idénticas, la función de onda debe reflejar esta particularidad.*

*Para que esto ocurra es necesario que el cuadrado del módulo de la función de la función de onda sea invariante del intercambio de dos partículas. Para una función de onda de dos partículas 1 y 2 la probabilidad de encontrar la partícula 1 en el punto  $\tau_1$  y la partícula 2 en el punto  $\tau_2$  será:*

$$|\Psi[\tau_1(1)\tau_2(2)]|^2$$

*Y como las partículas son indistinguibles, la probabilidad anterior también puede ser escrita:*

$$|\Psi[\tau_2(1)\tau_1(2)]|^2$$

*Donde solo se han permutado 1 y 2*

**La función de onda**

Si la misma probabilidad es descrita por dos expresiones diferentes, se tiene que cumplir:

$$\left| \Psi[\tau_1(1)\tau_2(2)] \right|^2 = \left| \Psi[\tau_2(1)\tau_1(2)] \right|^2$$

Que expresa la ley básica de la simetría de la función de onda, en general:

Si una propiedad física medible depende de las coordenadas (incluido el spin) de partículas idénticas, el resultado de cualquier medición de esa propiedad debe ser independiente (invariante) al intercambio de dos partículas.

Esta es una ecuación cuadrática y por lo tanto puede ser satisfecha de dos formas posibles

$$\Psi[\tau_1(1)\tau_2(2)] = \Psi[\tau_2(1)\tau_1(2)]$$

*Simétrica respecto al intercambio de las partículas 1 y 2*

$$\Psi[\tau_1(1)\tau_2(2)] = -\Psi[\tau_2(1)\tau_1(2)]$$

*Antisimétrica respecto al intercambio de las partículas 1 y 2*

**La función de onda**

Ciertos resultados experimentales en concordancia con la teoría cuántica relativista muestran que:

1. Todas las partículas fundamentales son descritas por funciones **simétricas o antisimétricas** con respecto al intercambio de coordenadas de dos partículas (las partículas nunca cambian de tipo de simetría).
2. Todas las partículas con **spin cero o entero** son descritas por funciones de onda **simétricas** (Estas partículas son llamadas **bosones**)
3. Todas las partículas con **spin múltiplos de 1/2** son descritas por funciones de onda **antisimétricas**, estas partículas son llamadas **fermiones**)

*Como los electrones tienen spin 1/2 son descritos por funciones de onda antisimétricas respecto al intercambio de dos coordenadas (espaciales o de espín). Y esto es conocido como el principio de exclusión de Pauli o principio de antisimetría de Pauli.*

$$\Psi(q_1, q_2, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, q_N) = -\Psi(q_1, q_2, \dots, q_i, \dots, q_j, \dots, q_N)$$

Postulados de la Mecánica Cuántica:

**Postulado 2. Operadores como representación de las variables dinámicas en mecánica cuántica.**

“A cada variable dinámica  $L$  le corresponde, en mecánica cuántica, un operador lineal y hermético  $\hat{L}$ ”

Tienen que ser lineales para que cumplan el principio de superposición de los estados  
Tienen que ser herméticos para que sus autovalores sean reales.

**Reglas para obtener estos operadores:**

- Si  $L$  es una coordenada, el operador es: multiplicar por la coordenada
- Si  $L$  es uno de los momentos  $p_i$ , el operador es:

$$\hat{p}_i = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_i} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_i} \quad \text{donde } p_i \text{ y } q_i \text{ son variables conjugadas}$$

- Para cualquier otra variable dinámica  $L$  expresable en términos de  $q_i$  y  $p_i$ , el operador se obtiene por sustitución de los operadores correspondientes a las coordenadas y a los momentos en la expresión clásica.

Postulados de la Mecánica Cuántica:

**Postulado 2. Operadores como representación de las variables dinámicas en mecánica cuántica.**

**Ejemplos:**

*Momento lineal total:*

$$\vec{p} = \vec{i}p_x + \vec{j}p_y + \vec{k}p_z$$

$$\hat{p} = \vec{i} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) + \vec{j} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y} \right) + \vec{k} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_i = -i\hbar \vec{\nabla}_i$$

donde  $\nabla$  se conoce como operador Nabla:

$$\nabla_i = \vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z}$$

*Energía cinética*

$$T = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{(mv)^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}$$

$$\hat{T} = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla_i \right)^2$$

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_1^2$$

Postulados de la Mecánica Cuántica:**Postulado 3. La ecuación de Schrödinger**

“Las posibles funciones de estado para un sistema dado se obtienen mediante la solución de la ecuación de Schrödinger para ese sistema”

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi$$

Establece la ecuación fundamental de la Mecánica Cuántica, con la que podemos encontrar las funciones y valores propios correspondientes a un sistema dado

Si  $\Psi_1$  y  $\Psi_2$  son soluciones de la ecuación de Schrödinger, entonces  $\Psi_3 = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2$  también lo será.

En general es posible combinar cualquier número de soluciones particulares para obtener una nueva solución, según:

$$\Psi = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \Psi_n$$

Consecuencia del principio de superposición de los estados

Postulados de la Mecánica Cuántica:**Postulado 3. La ecuación de Schrödinger**

Las funciones de onda, solución de la ecuación de Schrödinger tienen que cumplir con las siguientes propiedades:

- $\Psi(q_i)$  tiene que ser cuadráticamente integrable, o sea la integral  $\int \Psi(q_i) \Psi^*(q_i) d\zeta$  tiene que ser igual a un número finito para un número finito de partículas y además  $\Psi(q_i)$  tienen que desaparecer en los alrededores del sistema.
- $\Psi(q_i)$  tiene que ser finita en todo el rango de definición de las variables independientes, pudiendo exceptuar puntos aislados en los que estas se hagan infinitas, siempre y cuando  $\int \Psi(q_i) \Psi^*(q_i) d\zeta$  converja a un valor finito con dichos puntos incluidos.
- $\Psi(q_i)$  tienen que ser unievaluadas, o sea para un conjunto dado de coordenadas  $\{q_i\}$  debe existir uno y sólo un valor de probabilidad de encontrar al sistema en esa región del espacio.
- $\Psi(q_i)$  tiene que ser continua, ya estas son la representación del movimiento físico de un sistema que necesariamente tiene carácter continuo. La existencia de discontinuidad significaría que el sistema se mueve de forma tal que desaparece y aparece.

Las funciones que cumplen con estas propiedades se denominan **bien comportadas**

**Postulados de la Mecánica Cuántica:****Postulado 4. Sentido físico de los autovalores**

“Si la función de onda  $\Psi$  es autofunción del operador correspondiente a la variable dinámica  $L$ :

$$\hat{L}\Psi(q_i, t) = \ell\Psi(q_i, t)$$

entonces en este estado la variable dinámica  $L$  tiene valor constante y el estado se denomina autoestado de  $L$ ”

$\{\ell_i\}$  → autovalores (o valores propios)

$\{\Psi_i\}$  → autofunciones (funciones propias, o vectores propios)

Los estados definidos por  $\{\ell_i\}$  están descritos por  $\{\Psi_i\}$  y en cada uno de estos estados la magnitud  $L$  posee un valor. En general a cada autofunción le corresponde un autovalor, pero es posible que a un mismo autovalor le corresponda más de una autofunción, en tal caso las funciones se denominan degeneradas.

Si un sistema se encuentra en un autoestado de una variable dinámica  $L$  correspondiente al autovalor  $\ell$ , entonces una medición de  $L$  dará como resultado  $\ell$ .

Si tenemos dos o más autoestados correspondientes a un mismo autovalor, entonces cualquier estado formado por superposición de estos será también un autoestado de  $L$ , correspondiente al autovalor.

**Postulados de la Mecánica Cuántica:****Postulado 5. El valor medio de una magnitud en un estado cuántico**

“El valor promedio,  $\bar{L}$ , que se obtiene de una serie de mediciones de una variable dinámica  $L$ , en un estado descrito por la función  $\Psi$ , viene dado por:

$$\bar{L} = \frac{\langle \Psi | \hat{L} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \frac{\int \Psi^* \hat{L} \Psi d\zeta}{\int \Psi^* \Psi d\zeta}$$

donde  $\hat{L}$  es el operador mecánico cuántico correspondiente a la variable dinámica  $L$ ”

Los Postulados 4 y 5 nos dicen que resultado esperar al realizar una medición de una variable dinámica en un estado cuántico:

Si el sistema se encuentra en un estado correspondiente a uno de los autoestados del sistema obtendremos un valor constante = al autovalor correspondiente (*Postulado 4*)

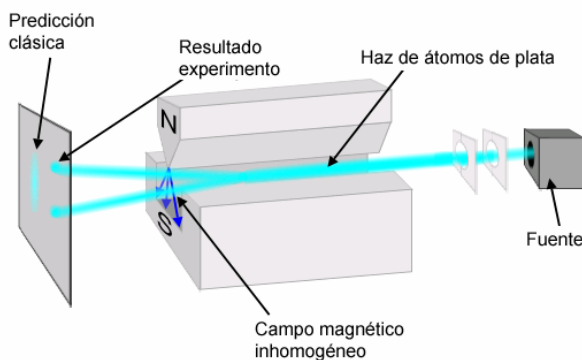
Si el estado no corresponde ninguno de los autoestados del sistema obtendremos unas veces un resultado y otras otro, de modo que sólo podemos conocer un valor medio dado por la ecuación anterior (*Postulado 5*)

$$\Psi = \sum_n c_n \psi_n \quad \omega(\ell_n) = |c_n|^2$$



El espín del electrón:

**1922 Otto Stern y Walter Gerlach**



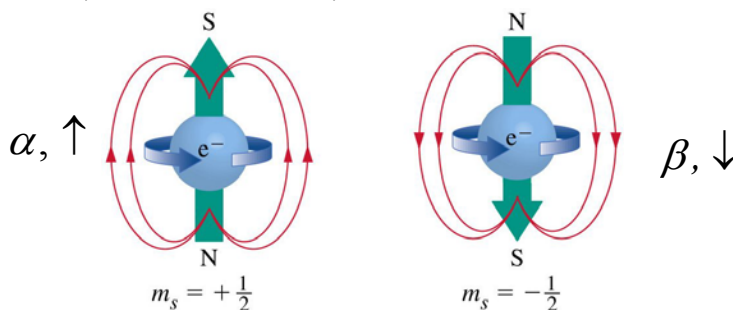
Al hacer pasar un haz de átomos de plata en su estado fundamental ( $l=0, m=0$ ) a través de un campo magnético inhomogéneo, se orientan (responden al campo) de dos formas, con igual valor del momento y signo contrario

Postulados de la Mecánica Cuántica:

**Interpretación de Uhlenbeck y Goudsmit, 1925 :**

el electrón tiene un movimiento de rotación propio alrededor de uno de sus diámetros.

Esta explicación, no es correcta, para que una rotación de esta naturaleza generara un momento angular como el del spin sería necesario que el electrón tuviera un masa superior a la del protón (manteniendo las dimensiones reales) o una tamaño superior al del átomo (manteniendo la masa real).



No es posible dar una explicación clásica al fenómeno del spin electrónico. La inexistencia de analogía clásica para el spin no permite utilizar la metodología usual en mecánica cuántica de construir el operador mecánico cuántico a partir de la expresión clásica. Por lo que utilizando la analogía con el momento angular orbital  $M^2$  y sus componentes  $M_x, M_y$  y  $M_z$

Postulados de la Mecánica Cuántica:

**Postulado 6. Los operadores del momento angular de espín.**

“Los operadores del momento angular de spin conmutan y se combinan de igual forma que los momentos angulares ordinarios”

$\hat{S}_x^2, \hat{S}_y^2, \hat{S}_z^2$  son los operadores correspondientes a las componentes de spin de un electrón en las direcciones  $x, y$  y  $z$ , y cumplen con:

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2$$

Las relaciones de conmutación de mayor interés entre estos operadores son:

$$\begin{aligned} [\hat{S}_x, \hat{S}_y] &= i\hbar \hat{S}_z & [\hat{S}^2, \hat{S}_x] &= 0 \\ [\hat{S}_y, \hat{S}_z] &= i\hbar \hat{S}_x & [\hat{S}^2, \hat{S}_y] &= 0 \\ [\hat{S}_z, \hat{S}_x] &= i\hbar \hat{S}_y & [\hat{S}^2, \hat{S}_z] &= 0 \end{aligned}$$

Postulados de la Mecánica Cuántica:

**Postulado 7. Autofunciones del momento angular de espín**

“Para un electrón existen solamente dos autofunciones comunes de  $\hat{S}_z$  y  $\hat{S}^2$ , que se denominan  $\alpha$  y  $\beta$ , respectivamente”

Si  $\omega$  representa  $\alpha$  ó  $\beta$  :

$$\hat{S}_z \omega = m_s \hbar \omega$$

$$m_s = \pm \frac{1}{2} \quad \text{número cuántico de la componente } S_z$$

$$\hat{S}_z = \pm \frac{1}{2} \hbar$$

$$\hat{S}^2 \omega = (s+1)s \hbar^2 \omega$$

$$s = \frac{1}{2} \quad \text{número cuántico de espín ó espín}$$

$$\hat{S}^2 = \frac{3}{4} \hbar^2$$

Como  $s = 1/2$  para todos los electrones, estos tienen igual valor de momento angular de spin:

$$S = \sqrt{(s+1)s} \hbar = \frac{\sqrt{3}}{2} \hbar$$

se emplea la componente a lo largo del eje  $z$

