

Teoría cuántica:

El comportamiento de sistemas microscópicos.

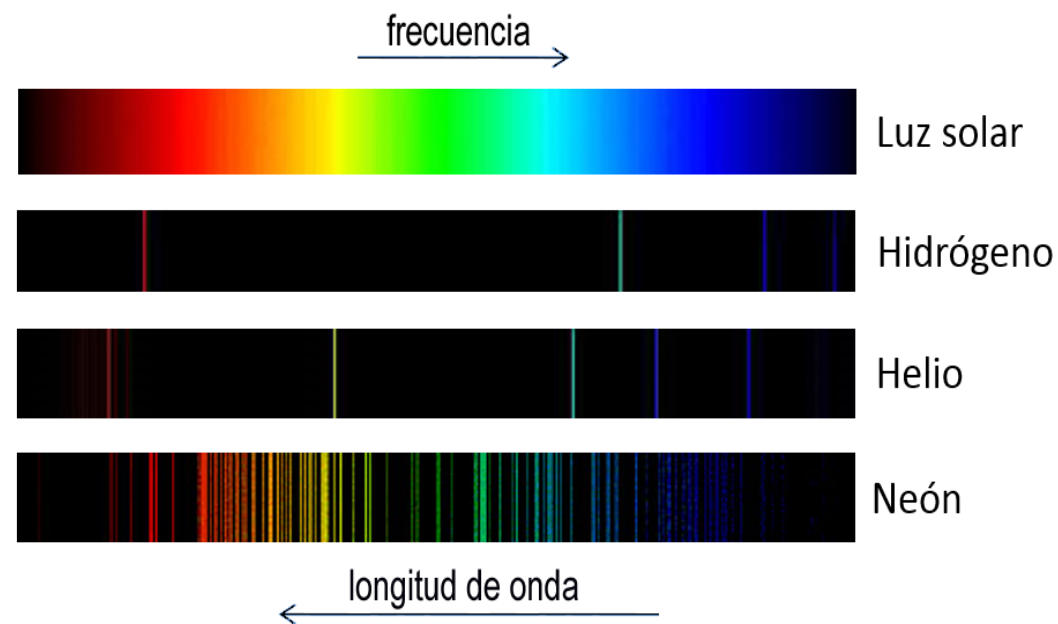
Los principios de la mecánica cuántica.

Estructura atómica

Espectros atómicos

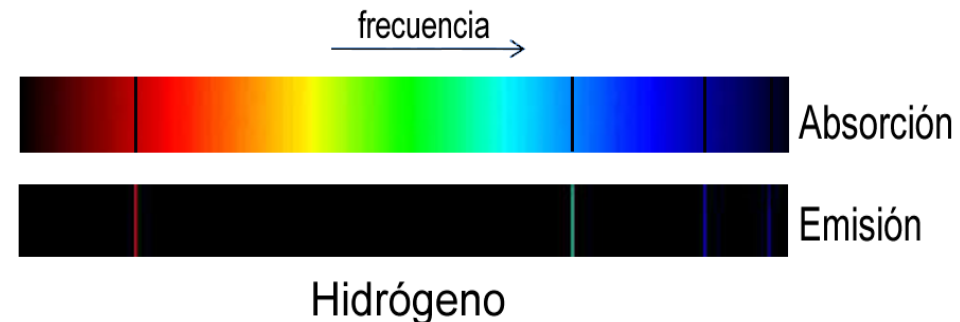
Cuando las radiaciones electromagnéticas interactúan con la materia (átomos, moléculas, etc) los efectos resultantes no siempre son tan dramáticos como lo descrito para los efectos Compton y fotoeléctrico, donde se desprenden electrones. Cuando la radiación incidente es de menor energía que la necesaria para producir estos efectos, no hay desprendimiento de electrones sino que la radiación puede ser absorbida por la materia. Cuando se registra este efecto se obtiene lo que se conoce como espectros de absorción. Por el contrario, la materia también puede emitir radiaciones electromagnéticas y el registro de este efecto se conoce como espectros de emisión.

A finales del siglo XIX ya se conocía que mientras el sol o una bombilla incandescente presentan un espectro de emisión continuo, cuando se calienta un gas formado por átomos de un elemento específico se obtiene un espectro de emisión de líneas. O sea que los átomos solamente emiten (y absorben) radiaciones de determinadas longitudes de onda. A estos espectros se les conoce como espectros de líneas y cada elemento produce un conjunto único y característico de líneas espectrales. De hecho esto permite identificar a los diferentes elementos químicos.



Estructura atómica

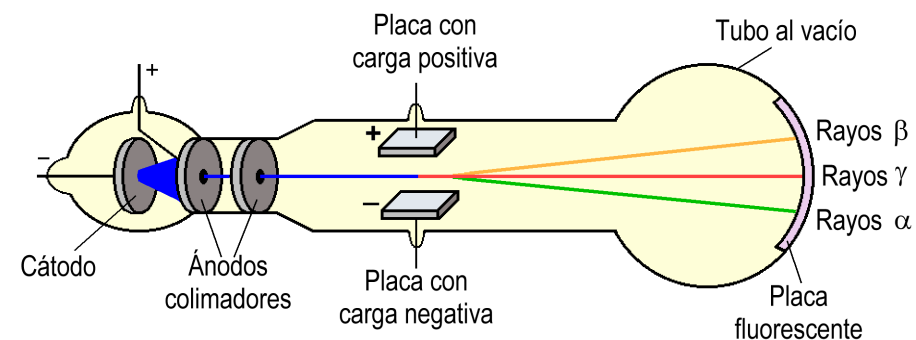
También se sabe que las frecuencias (o longitudes de onda) a las que emite un elemento dado son exactamente iguales a aquellas a las que absorbe. O sea, la posición donde aparecen líneas en el espectro de emisión de cada elemento químico es exactamente la misma en la que aparecen vacíos en el espectro de absorción.



La pregunta lógica a responder era **¿Qué caracteriza a la estructura atómica que hace que cada átomo tenga un espectro de líneas único?** Para responderla es necesario entonces conocer la estructura de los átomos.

Modelo de Thompson

Observó cómo los rayos catódicos se desviaban bajo la acción de un campo eléctrico. Una parte continuaba su trayectoria sin desviarse (partículas neutras), otra se desviaba en dirección del cátodo (partículas con carga positiva) y otra se desviaba en dirección del ánodo (partículas negativas). A estas últimas son a las que conocemos actualmente como electrones (o rayos β).



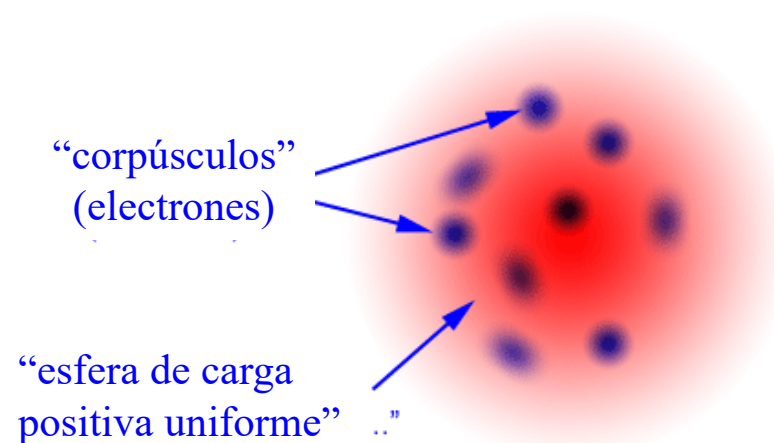
Los rayos catódicos se obtiene en un tubo al vacío con dos electrodos en su interior. Estos se conectan a un circuito, de forma que uno de los electrodos queda cargado negativamente (cátodo) y otro positivamente (ánodo).

Estructura atómica

Modelo de Thompson

Antes de este experimento se pensaba que el átomo era una partícula indivisible. Como el experimento de Thomson demostraba que los átomos tenían una estructura interna formada por partículas negativas y positivas, ahora el problema era explicar cómo se encontraban éstas en los átomos.

El primer modelo para explicar esto se debió al propio Thomson (1904). Propuso que la carga positiva podía estar distribuida con densidad uniforme en todo el volumen del átomo con los electrones embebidos dentro de esta nube de carga positiva, como pasas dentro de un pudín. De hecho así se le conoce aún hoy a este modelo, como el modelo atómico del pudin con pasas, o del pan con pasas. Tuvo una vida muy corta, solo 6 años y, aunque hoy nos pueda parecer una idea absurda, en su momento fue un gran paso hacia el conocimiento de la estructura atómica, al proponer por primera vez la existencia de partículas subatómicas.

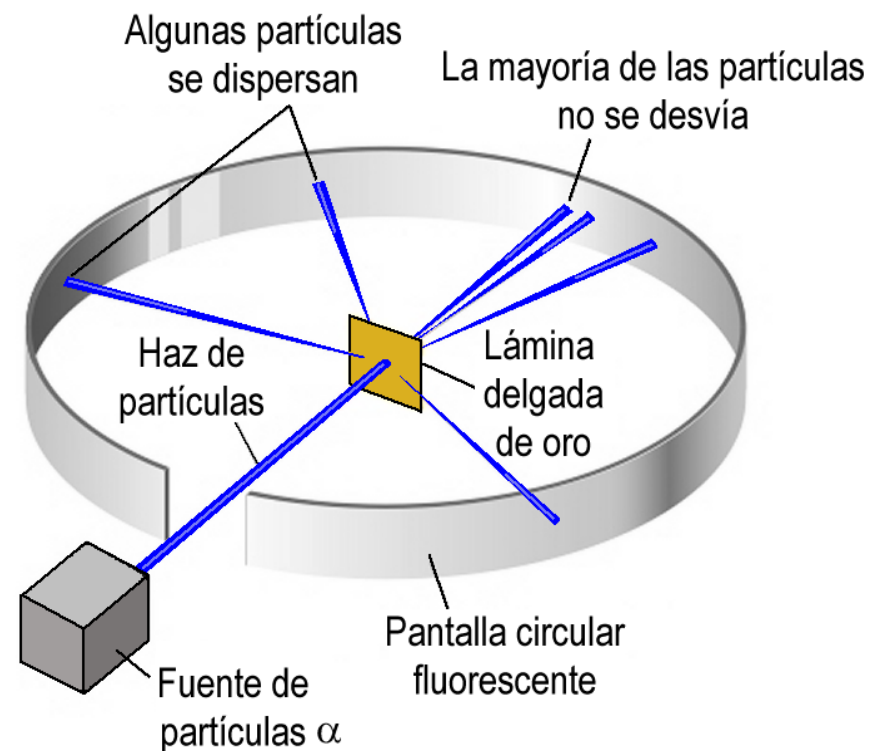


Estructura atómica

Modelo de Rutherford

En 1911 Rutherford publica los resultados de un experimento en el que se hacía incidir un haz de partículas α (con carga positiva) sobre una lámina de oro delgada. El resultado esperado según el modelo atómico de Thomson era que la mayor parte de estas partículas se desviarán de su trayectoria, en un ángulo cercano a los 180° , a causa de la nube con carga positiva. Sin embargo lo que se observó fue que solo una pequeña fracción se desviaba, y lo hacía en diferentes ángulos, mientras que la mayor parte de las partículas α continuaba su trayectoria sin desviarse, como si atravesaran los átomos.

Estos resultados demostraron que la región del átomo cargada positivamente (núcleo) era muy pequeña en comparación con el tamaño total del átomo. Además la mayor parte de la masa del átomo parecía estar concentrada en el núcleo.



Las partículas alfa (α) son núcleos de helio-4 (4He) completamente ionizados, es decir, sin electrones. Están formadas por dos protones y dos neutrones.

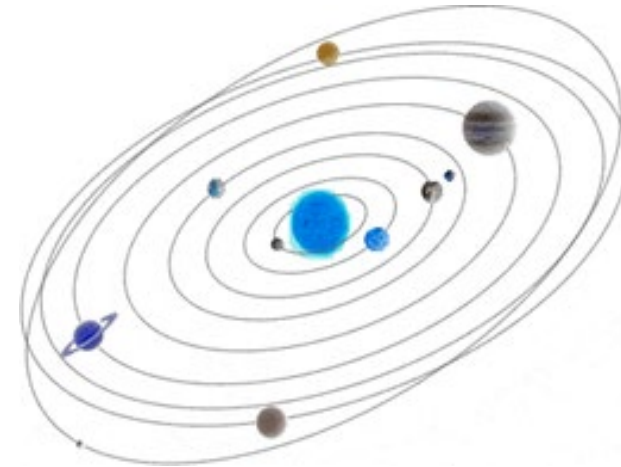
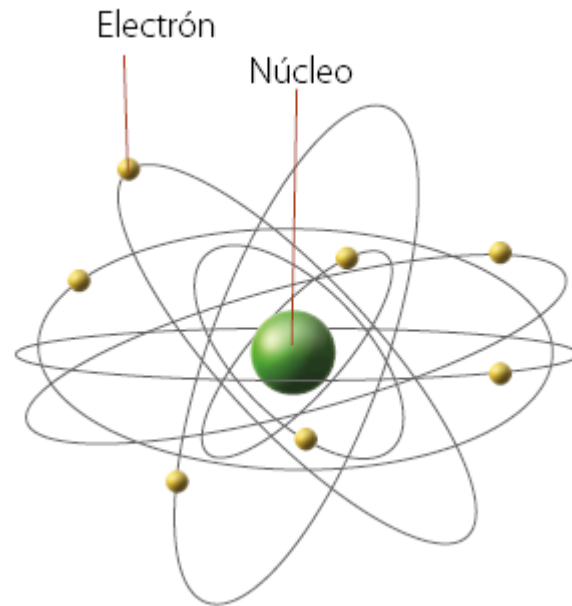
Estructura atómica

Modelo de Rutherford

En base a estos hallazgos se propone un nuevo modelo atómico donde el núcleo ocupa la región central. Alrededor de él se mueven los electrones y la mayor parte del volumen del átomo es un espacio “vacío”.

A este modelo se le conoce como el modelo “planetario” del átomo, debido a la rápida analogía que puede establecerse entre él y el sistema planetario solar.

El tamaño del átomo estaría relacionado con el radio de la órbita del electrón más externo.



Estructura atómica

Modelo de Rutherford

Según las leyes de la electrodinámica clásica, en este modelo los electrones no podrían encontrarse en reposo ya que debido a las fuerzas electrostáticas el sistema no sería estable. Si suponemos entonces que los electrones se mueven alrededor del núcleo y analizamos ese movimiento de acuerdo con las leyes de la física clásica, resultaría que los electrones en una trayectoria curvilínea tendrían aceleración y deberían emitir radiación continuamente. Esto provocaría la emisión de un espectro continuo ya que la frecuencia de revolución de los electrones cambiaría de forma continua por estar emitiendo energía. Más aún, como resultado de la emisión de energía los electrones terminarían colapsando sobre el núcleo en un tiempo aproximado de 10^{-9} s. En otras palabras, los átomos tendrían vidas muy cortas.

Las evidencias experimentales niegan rotundamente ambas cosas.

Entonces surgió una pregunta crucial acerca no solo de la estructura atómica, sino del comportamiento general de los sistemas microscópicos:

¿Por qué los electrones, que se mueven a grandes velocidades alrededor del núcleo cargado no consumen su energía y caen, siguiendo una trayectoria en espiral, sobre el núcleo atómico?

Estructura atómica

Modelo de Bohr

En 1913, Niels Bohr planteó un modelo para el átomo de H, basado en los siguientes postulados:

Postulado 1:

En el átomo de H, el electrón gira alrededor del núcleo en orbitas estacionarias caracterizadas por valores de momento angular tales que: $m v r = n \frac{h}{2\pi}$

O sea que los posibles valores del momento angular orbital están cuantizados.

Este postulado equivale a decir que el electrón puede encontrarse en estados estacionarios correspondientes a determinadas energías (en órbitas planas de radios específicos) en los cuales aunque esté en movimiento no emite energía.

Postulado 2:

En las condiciones adecuadas, un electrón o cualquier sistema atómico puede pasar de un estado estacionario n a otro m , de energías E_n y E_m , respectivamente.

Si $E_n > E_m$ el sistema emite energía. Si $E_n < E_m$ el sistema absorbe energía.



Generalización
de la hipótesis
de Planck

La radiación emitida o absorbida está asociada con un fotón, cuya energía viene dada por: $\Delta E = h\nu$

Estructura atómica

"Debemos dejar en claro que cuando se trata de átomos, el lenguaje solo se puede usar como en la poesía." —Niels Bohr

"cualquiera que no se sorprenda por la teoría cuántica, no la ha entendido" —Niels Bohr

Modelo cuántico

Un problema con el modelo de Bohr era que consideraba a los electrones como partículas en órbitas planas definidas con precisión. Con base en la idea de De Broglie de que las partículas pueden tener comportamiento ondulatorio, Schrödinger propuso que el comportamiento de los electrones dentro de los átomos se podía explicar al tratarlos matemáticamente como ondas de materia. Este modelo, que es la base del entendimiento actual del átomo, se conoce como el modelo *mecánico cuántico* o *de las ondas mecánicas*.

De manera resumida se basa en:

- Los electrones se comportan como ondas de materia.
- Los electrones en los átomos pueden describirse con una serie de funciones de onda asociadas a energías cuantizadas.
- El cuadrado de la función de onda representa la probabilidad de encontrar al electrón en una determinada región espacial del átomo.
- Un orbital atómico se define como la región tridimensional de un átomo donde hay mayor probabilidad de encontrar al electrón.

Principios de la mecánica cuántica

Principio de incertidumbre de Heisenberg

No se puede determinar, simultáneamente y con precisión arbitraria, ciertos pares de variables físicas, como son, por ejemplo, la posición y el momento lineal de un objeto dado.

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad \text{donde} \quad \hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05 \times 10^{-34} \text{ Js}$$

Las variables asociadas a través de este principio se conocen como canónicas conjugadas.

Otro ejemplo son la energía y el tiempo.

Este principio es resultado del comportamiento de los sistemas microscópicos, no de limitaciones en los procesos de medición.

El principio de incertidumbre implica que en mecánica cuántica no existe el concepto clásico de trayectoria, ya que no se puede conocer simultáneamente y con precisión infinita la velocidad y la posición de objetos en sistemas microscópicos a un tiempo dado.

En lugar de trayectorias clásicas hablamos entonces de la **probabilidad** de encontrar al sistema de interés en una cierta región del espacio, con un cierto valor de momento asociado.

La interpretación y el carácter predictivo de la mecánica cuántica son probabilísticos.

Principios de la mecánica cuántica

Principio de indistinguibilidad

En la mecánica clásica, si se tiene un conjunto de partículas idénticas, estas son distinguibles. Esto quiere decir que si se enumeran las partículas de un sistema en un instante y se hace un seguimiento de su trayectoria; entonces en un tiempo futuro será posible identificar las partículas.

Por el contrario, en mecánica cuántica debido al principio de incertidumbre, no existe el concepto de trayectoria y por lo tanto no podemos utilizarla para distinguir entre partículas idénticas.

Principio de antisimetría

Es una consecuencia del principio de indistinguibilidad.

Consideremos dos partículas idénticas, definidas por cuatro variables: tres espaciales y la de espín (Ejemplo: x_1, y_1, z_1, m_{s1} para la partícula 1). Al conjunto de las cuatro variables lo representaremos como q_i .

La función de onda que describe al sistema de las dos partículas será: $\Psi(q_1, q_2)$

La probabilidad de encontrar a la partícula 1 en el punto 1 y a la partícula 2 en el punto 2 será: $\Psi^2 [q_1(1), q_2(2)]$

Como las partículas son idénticas, deben ser indistinguibles, por tanto debe cumplirse que:

$$\Psi^2 [q_1(1), q_2(2)] = \Psi^2 [q_1(2), q_2(1)]$$

Principios de la mecánica cuántica

Principio de antisimetría

$$\Psi^2 [q_1(1), q_2(2)] = \Psi^2 [q_1(2), q_2(1)]$$

Esta condición se satisface de dos maneras, respecto a la simetría de la función de onda

$$\Psi [q_1(1), q_2(2)] = \Psi [q_1(2), q_2(1)] \quad \text{Función de onda simétrica}$$

$$\Psi [q_1(1), q_2(2)] = -\Psi [q_1(2), q_2(1)] \quad \text{Función de onda antisimétrica}$$

Las partículas de espín semientero (como los electrones) son descritas por funciones antisimétricas. Se les llama fermiones y obedecen la estadística de Fermi-Dirac.

Las partículas de espín entero (como los fotones) son descritas por funciones simétricas. Se les llama bosones y obedecen la estadística de Bose-Einstein.

Que los electrones sean descritos por funciones antisimétricas respecto al intercambio de coordenadas (incluyendo el espín) se conoce como **principio de antisimetría** o **principio de exclusión de Pauli**.

Principios de la mecánica cuántica

Principio de exclusión de Pauli

Este principio enunciado en 1925 establece que no puede haber dos electrones en un mismo átomo con todos sus números cuánticos idénticos (o sea, en el mismo estado cuántico).

Con base al descubrimiento de Stoner, un año antes, que las ocupaciones máximas para las subcapas s, p, d y f en un átomo eran 2, 6, 10 y 14, y los trabajos de Landé en espectroscopia, Pauli indicó que eran necesarios cuatro números cuánticos para caracterizar el estado de cada uno de los electrones de un átomo.

Más tarde Samuel Goudsmit definió los cuatro números cuánticos como:

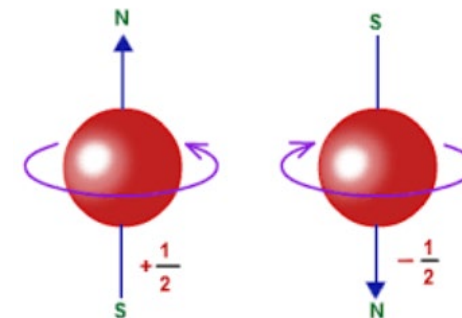
n , número cuántico principal, con valores enteros positivos (1, 2, 3...)

l , número cuántico acimutal, con valores enteros positivos de 0 hasta $n-1$

m , el número cuántico magnético con valores enteros 0, ± 1 , ± 2 ..., $\pm l$

m_s , nuevo número cuántico con dos valores $\pm 1/2$

Luego Uhlenbeck y Goidsmit atribuyeron el cuarto número de Pauli a un movimiento extra del electrón: la rotación alrededor de su propio eje (espín). Al rotar, el giro del electrón producirá un momento angular y la rotación de su carga daría lugar a un momento magnético. Como m_s sólo tenía dos valores, propusieron que cada uno de ellos indicaba el sentido de la rotación del electrón.



Principios de la mecánica cuántica

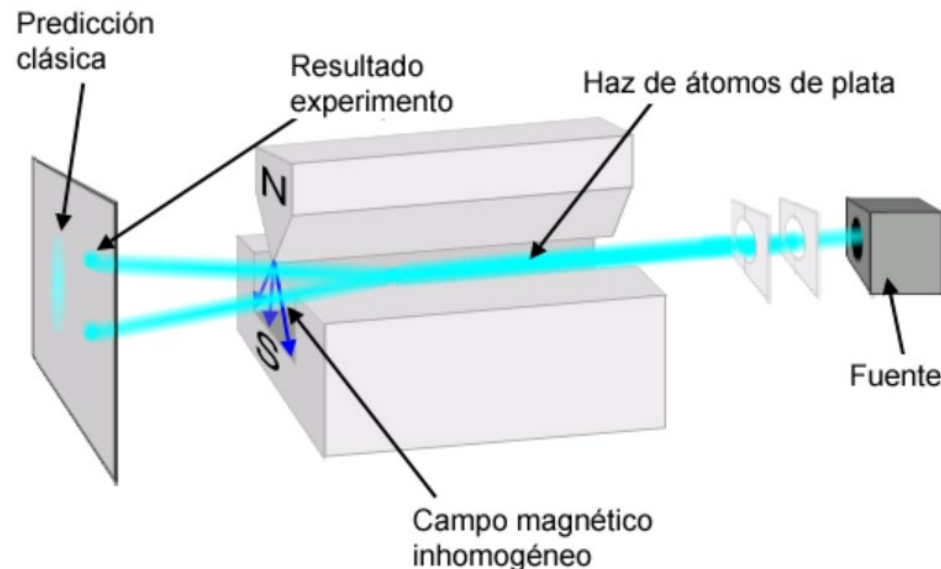
El espín: Experimento de Stern y Gerlach (1922)

Consistió en enviar un haz de átomos de plata a través de un campo magnético no uniforme (aumentaba en dirección perpendicular a la del haz).

El resultado esperado (predicción clásica) era una distribución con la máxima intensidad del haz centrada a lo largo del eje desde el cual salió emitido, decreciendo a distancias cada vez más alejadas del punto de impacto.

El resultado obtenido fue que todas las partículas eran desviadas o bien hacia arriba o bien hacia abajo en dos grupos claramente distinguibles y de igual intensidad.

Este resultado no pudo explicarse hasta 1925, cuando se postuló el espín, un momento angular intrínseco sin análogo clásico. El espín electrónico está cuantizado, pudiendo tomar su número cuántico sólo los dos valores de igual magnitud y signo contrario.



Principios de la mecánica cuántica

Principio de superposición de los estados

Primero definamos

El principio de superposición o teorema de superposición es una herramienta matemática que permite descomponer un problema lineal o de otro tipo en dos o más subproblemas más sencillos, de tal manera que el problema original se obtiene como "superposición" o "suma" de estos subproblemas más sencillos.

Según la definición de Dirac, un estado cuántico es un objeto matemático que contiene la información de que disponemos sobre un sistema físico. Idealmente, si conocemos el sistema perfectamente, un estado cuántico contiene toda la información acerca del sistema. En notación de Dirac (bra-ket), si un sistema se encuentra en un estado E , lo representaremos como: $|E\rangle$.

Otra forma de definir el estado cuántico es: cualquier movimiento no perturbado, restringido por tantas condiciones como sea teóricamente posible, sin que existan contradicciones o interferencias entre ellas.

Ejemplo: La expresión $\Psi(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | 1s \rangle$, función de onda para un electrón en un orbital 1s, es la representación espacial del estado cuántico de ese electrón (i.e. su proyección en el espacio real).

Principios de la mecánica cuántica

Principio de superposición de los estados

Establece que entre los estados existen relaciones tales que cuando un sistema se encuentra en un estado podemos considerar que se encuentra parcialmente en otros dos o más estados.

Entonces, un estado puede ser considerado como el resultado de la superposición de dos o más estados diferentes y viceversa (la superposición de dos o más estados da lugar a un nuevo estado).

Supongamos que tenemos dos estados **A** y **B**. De manera que cuando se realiza una observación de estos estados se obtienen los resultados **a** y **b**, respectivamente.

¿Cuál será el resultado de la observación de un estado **C** descrito por la superposición de **A** y **B**?

La naturaleza no clásica del proceso de superposición se evidencia en la respuesta a esta pregunta.

Algunas veces el resultado será **a** y otras **b**, nunca diferente a estos valores. La probabilidad de obtener uno u otro de estos dos valores dependerá de las características de la superposición. Y es dicha probabilidad la que define el carácter intermedio del estado **C**.

Cuando se observan partículas microscópicas y la observación se repite, bajo idénticas condiciones, el resultado no será siempre el mismo. Cada resultado se obtendrá una fracción definida del total de veces que se realice la observación. Lo que puede calcular la teoría es la probabilidad de obtener un resultado particular.

Teoría cuántica:

Fundamentos del formalismo de la mecánica cuántica.

Vectores. Funciones continuas.

Operadores, autovalores y autofunciones.

Formalismo de la mecánica cuántica

Vectores y superposición de estados

Dado que el proceso de superposición de los estados es aditivo, su representación requiere de magnitudes matemáticas que puedan sumarse para dar lugar a magnitudes del mismo tipo.

Los vectores son un ejemplo de esto.

Los vectores que usamos en mecánica clásica tienen un número finito de dimensiones (1, 2, 3).

Esto no es suficientemente general para muchos de los sistemas estudiados en mecánica cuántica.

Es necesario hacer entonces una generalización a vectores con un número infinito de dimensiones y es en términos de este tipo de vectores que se formula actualmente la mecánica cuántica.

Al espacio vectorial de dimensión infinita se le conoce como espacio de Hilbert.

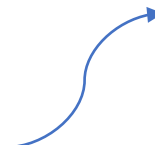
$$\vec{M} = c_1 \vec{K} + c_2 \vec{L}$$

Suma de los vectores K y L, multiplicados por los números complejos c_1 y c_2 , para dar lugar al vector M

Se puede sumar también una secuencia infinita de vectores.

Un vector es linealmente dependiente cuando puede expresarse en término de otros vectores.

Cuando ninguno de los vectores de un conjunto puede expresarse en término de los otros, el conjunto de vectores es linealmente independiente.


$$\sum_{n=0}^N c_n \vec{J}_n = 0$$

se cumple si $c_1=c_2=\dots=c_n$

Formalismo de la mecánica cuántica

Vectores y superposición de estados

Para un vector dependiente de una variable x , que puede tomar cualquier valor en un cierto rango, al integrar dicho vector con respecto a x se obtiene otro vector.
$$\int \overrightarrow{K}_{(x)} dx = \overrightarrow{Q}$$

Asumiendo que a cada estado de un sistema dinámico, a un tiempo particular, le corresponde un vector, la correspondencia es tal que si un estado resulta de la superposición de otros, su vector correspondiente puede ser expresado linealmente en término de los vectores representativos de esos otros estados y viceversa.

Cuando dos o más estados se superponen, su orden en el proceso de superposición no es importante, o sea dicho proceso es simétrico entre los estados que participan.

En el ejemplo anterior: Si los coeficientes son $\neq 0$, que la relación de superposición sea simétrica entre los estados M, K y L quiere decir que del mismo modo que M se puede formar por superposición de K y L, K puede formarse por superposición de M y L, y L por superposición de M y K.

$$\overrightarrow{M} = c_1 \overrightarrow{K} + c_2 \overrightarrow{L}$$

De la superposición de un estado consigo mismo no surge ningún estado nuevo:

$$c_1 \overrightarrow{K} + c_2 \overrightarrow{K} = (c_1 + c_2) \overrightarrow{K}$$

i.e., si el vector que representa un estado se multiplica por un número complejo cualquiera, diferente de cero, el vector resultante representa al original.

Formalismo de la mecánica cuántica

Funciones continuas

Si f y g son funciones continuas dependientes de la variable real x , el producto interno de g y f se representa como $\langle f | g \rangle$ y en el intervalo $[a,b]$ se define como:

$$\int_a^b f^*(x) g(x) dx$$

donde el asterisco representa a la función complejo-conjugada

La norma, se representa $\|f\|$ como y se define como:

$$\langle f | f \rangle^{1/2} = \left\{ \int_a^b f^*(x) f(x) dx \right\}^{1/2} = \left\{ \int_a^b |f(x)|^2 dx \right\}^{1/2} \geq 0$$

Algunas propiedades de las funciones continuas:

Un conjunto de funciones continuas, definidas en el intervalo $[a,b]$, esta normalizado para todo valor de n ($1, 2, \dots, n$) si:

$$\|f_n\| = \left\{ \int_a^b |f(x)|^2 dx \right\}^{1/2} = 1$$

Una función se normaliza dividiéndola por su norma.

Un conjunto de funciones es ortogonal, si para $m \neq n$ se cumple que: $\langle f_n | f_m \rangle = 0$

Formalismo de la mecánica cuántica

Funciones continuas

Algunas propiedades de las funciones continuas:

Un conjunto de funciones normalizadas y ortogonales se denomina conjunto ortonormal.

Los conjuntos de funciones ortonormales se pueden representar como: $\langle f_n | f_m \rangle = \left\{ \int_a^b f_n^* f_m dx \right\} = \delta_{nm}$

donde δ_{nm} es la función delta de Kronecker: $\delta_{nm} = \begin{cases} 1 & \text{si } n = m \\ 0 & \text{si } n \neq m \end{cases}$

Además para las funciones continuas se cumple que:

$f + g = g + f$	Ley conmutativa
$c(f + g) = cf + cg$	Ley distributiva (c es una constante)
$f + (g + h) = (f + g) + h$	Ley asociativa
$f \cdot 0 = 0$	Elemento neutro
$f \cdot 1 = f$	Elemento unitario

Formalismo de la mecánica cuántica

Funciones continuas

Algunas

Un co

Los co

Las propiedades de vectores y funciones son equivalentes, excepto porque las funciones pueden ser complejas. Las operaciones que pueden realizarse con ambos también son equivalentes.

Entonces un conjunto de funciones continuas, bajo las definiciones de producto interno y norma presentados, genera un espacio vectorial y puede trabajarse con ellas como si fueran vectores.

$$\left. \begin{matrix} \text{Los co} \\ \text{te) } \end{matrix} \right\} = \delta_{nm}$$

se cumple que:

$$f \cdot 0 = 0$$

Elemento neutro

$$f \cdot 1 = f$$

Elemento unitario

Formalismo de la mecánica cuántica

Operadores

Un operador puede considerarse como un símbolo o notación abreviada de un conjunto bien definido de operaciones matemáticas que actúan sobre una función, llamada operando.

$$\text{Ejemplo: } \hat{B}f = g$$

Significa que al aplicar el operador B sobre la función f se obtiene la nueva función g

Autovalores y autofunciones de un operador:

Para ciertos operadores se cumple que: $\hat{B}f = b f$

Significa que al aplicar el operador B sobre la función f se obtiene como resultado el producto de una constante (b) por la misma función f . En este caso f es autofunción y b es autovalor del operador B .

Propiedades de los operadores:

$$\hat{A} + \hat{B} = \hat{B} + \hat{A} \quad \text{Ley conmutativa}$$

$$\left(\hat{A} + \hat{B}\right)f = \hat{A}f + \hat{B}f \quad \text{Leyes distributiva y asociativa}$$

Formalismo de la mecánica cuántica

Operadores

Propiedades de los operadores:

En un producto de operadores actúa primero el ubicado inmediatamente a la izquierda del operando: $\hat{A}\hat{B}f = \hat{A}(\hat{B}f)$

n aplicaciones sucesivas del mismo operador conducen a: $\hat{A}\hat{A}\dots\hat{A}f = \hat{A}^n f$

En general el producto de operadores no es conmutativo: $\hat{A}\hat{B} \neq \hat{B}\hat{A}$

El operador conmutador se define como: $[\hat{A}, \hat{B}] = [\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}]$

Si $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ Los operadores conmutan
 $[\hat{A}, \hat{B}] \neq 0$ Los operadores no conmutan

Formalismo de la mecánica cuántica

Operadores *Propiedades de los operadores:*

Conmutación de operadores:

Teorema: Dos operadores que tienen las mismas autofunciones, conmutan.

Recíproco: Si dos operadores conmutan, tienen las mismas autofunciones.

Tarea:

Demostrar el teorema y su recíproco

Relación con el principio de incertidumbre:

Si dos operadores no conmutan, las variables que estos representan están relacionadas por el principio de incertidumbre y se conocen como canónicas conjugadas.

Ejemplo:

$$\hat{x} = x$$

$$\hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx}$$

$$\hat{x}\hat{p}_x\phi = x \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \phi = \frac{\hbar}{i} x \frac{d\phi}{dx}$$

$$\hat{p}_x\hat{x}\phi = \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} x\phi = \frac{\hbar}{i} \left(x \frac{d\phi}{dx} + \phi \right) = \frac{\hbar}{i} x \frac{d\phi}{dx} + \frac{\hbar}{i} \phi$$

$$\hat{x}\hat{p}_x\phi - \hat{p}_x\hat{x}\phi = -\frac{\hbar}{i} \phi$$

No conmutan. No pueden medirse simultáneamente con precisión arbitraria.

Formalismo de la mecánica cuántica

Relación con el principio de incertidumbre:

$$\left[\hat{x}, \hat{p}_x \right] \phi = \hat{x} \hat{p}_x \phi - \hat{p}_x \hat{x} \phi = -\frac{\hbar}{i} \phi$$

$$\left[\hat{x}, \hat{p}_x \right] = \hat{x} \hat{p}_x - \hat{p}_x \hat{x} = -\frac{\hbar}{i}$$

Incetidumbre de un operador :

$$\Delta \hat{A} = \sqrt{\langle \hat{A}^2 \rangle - \langle \hat{A} \rangle^2}$$

Incetidumbre de dos operadores:

$$\left(\Delta \hat{A} \right) \left(\Delta \hat{B} \right) \geq \frac{1}{2} \left| \langle \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \rangle \right|$$

Para posición y momento:

$$\left(\Delta \hat{x} \right) \left(\Delta \hat{p}_x \right) \geq \frac{1}{2} \left| \langle \left[\hat{x}, \hat{p}_x \right] \rangle \right|$$

$$\left(\Delta \hat{x} \right) \left(\Delta \hat{p}_x \right) \geq \frac{1}{2} \left| \left\langle -\frac{\hbar}{i} \right\rangle \right|$$

$$\geq \left| -\frac{\hbar}{2i} \right|$$

$$\geq \sqrt{\left(-\frac{\hbar}{2i} \right) \left(\frac{\hbar}{2i} \right)}$$

$$\geq \frac{\hbar}{2}$$

Formalismo de la mecánica cuántica

Operadores *Propiedades de los operadores:*

Operadores lineales:

Un operador es lineal si cumple con:

$$\hat{L}(c_i f_i) = c_i \hat{L} f_i$$

$$\hat{L}(c_1 f_1 + c_2 f_2 + \dots + c_n f_n) = c_1 \hat{L} f_1 + c_2 \hat{L} f_2 + \dots + c_n \hat{L} f_n$$

Operadores hermíticos:

Un operador es hermítico si cumple con: $\int f_i^* (\hat{L} f_j) d\tau = \int (\hat{L}^* f_i^*) f_j d\tau$

donde el * representa complejo-conjugados y $d\tau$ es el elemento diferencial en el hipervolumen de n dimensiones.

De modo que el operador $\int () d\tau$ es una integral múltiple.

Propiedades de los operadores hermíticos:

- (1) Sus autovalores son números reales.
- (2) Las autofunciones correspondientes a diferentes autovalores son ortogonales.

Ejemplo desarrollado:

Suponga que conoce la velocidad de un proyectil de masa 1,0 g con una precisión del orden de $1 \mu\text{m s}^{-1}$. Calcule la indeterminación mínima en su posición.

Método Estime Δp a partir de $m\Delta v$, donde Δv es la indeterminación en la velocidad; luego use la ec. 8.36a para estimar la indeterminación mínima en la posición, Δq .

Respuesta La indeterminación mínima en la posición es

$$\begin{aligned}\Delta q &= \frac{\hbar}{2m\Delta v} \\ &= \frac{1,055 \times 10^{-34} \text{ J s}}{2 \times (1,0 \times 10^{-3} \text{ kg}) \times (1 \times 10^{-6} \text{ m s}^{-1})} = 5 \times 10^{-26} \text{ m}\end{aligned}$$

Donde hemos usado $1 \text{ J} = 1 \text{ kg m}^2 \text{ s}^{-2}$. La indeterminación es completamente despreciable para todos los supuestos prácticos concernientes a los objetos macroscópicos. Sin embargo, si la masa es la de un electrón, la misma indeterminación en la velocidad implica una indeterminación en la posición mucho más grande que el diámetro de un átomo (el cálculo análogo da $\Delta q = 60 \text{ m}$), por lo que el concepto de trayectoria, que implica el conocimiento simultáneo y preciso de la posición y el momento, es insostenible.

Ejercicio 1:

Estime la indeterminación mínima en la velocidad de un electrón en una región unidimensional de longitud $2a_0$.