Matemática de la Mecánica Cuántica
La interpretación de la Mecánica Cuántica en su formulación Matricial

José Jesús MENA DELGADILLO

En 1925 Werner Heisenberg desarrollo un modelo de álgebra de matrices para tratar los problemas de Mecánica Cuántica en forma alternativa, a la que ya había planteado E. Schrödinger con la expresión de una ecuación de onda.

Definición de operador.

En Mecánica Cuántica, a cualquier cantidad física se le asocia un operador por ejemplo: momento lineal, energía, momento dipolar, etc.

Por ejemplo, la acción del operador $\hat{L}^2 = -\frac{d^2}{d\,x^2} + x^2$ sobre la función $f(x) = e^{-\frac{x^2}{2}}$, lo cuál conduce a la expresión del tipo:

$$\hat{L}^2 \; f(x) = e^{-\frac{x^2}{2}} \tag{3}$$

Observando que la relación (3) corresponde a la ecuación de Schrödinger.

A continuación es conveniente definir las operaciones de suma (4) y resta (5) de operadores: $\hat{A}$ y $\hat{B}$.

$$\left(\hat{A} + \hat{B}\right) f = \hat{A}\, f + \hat{B}\, f \tag{4}$$

$$\left(\hat{A} - \hat{B}\right) f = \hat{A}\, f - \hat{B}\, f \tag{5}$$

Para el producto o composición de operadores, resulta:

$$\left(\hat{A}\ \hat{B}\right) f = \hat{A}\left(\hat{B} f\right) \qquad (6)$$

Para el producto de un operador consigo mismo:

$$\hat{A}^2 = \hat{A}\,\hat{A} \qquad (7)$$

Operador lineal

Se dice que $\hat{A}$ es un operador lineal $\forall\, c_1, c_2\ \varepsilon \subset$, se satisface:

$$\hat{A}\left(c_1\ f_1 + c_2\ f_2\right) = c_1\ \hat{A} + c_2\ \hat{A} \qquad (8)$$

En particular, el operador diferencial de orden n, en términos de la suma y producto de operadores, se define:

$$\hat{L}_n = a_n\left(x\right)\frac{d^n}{d\,x^n} + a_{n-1}\left(x\right)\frac{d^{n-1}}{d\,x^{n-1}} + \ldots.. + a_0\left(x\right) \qquad (9)$$

En general se satisface:

$$\hat{A}\,\hat{B} \neq \hat{B}\,\hat{A} \qquad (10)$$

Es decir $\hat{A}$ y $\hat{B}$ no necesariamente conmutan.

Si $\hat{A}$ y $\hat{B}$ conmutan, en este caso se define el conmutador $\left[\hat{A}, \hat{B}\right]$:

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{A}\,\hat{B} - \hat{B}\,\hat{A} \qquad (11)$$

Si $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \hat{0}$ significa que $\hat{A}$ y $\hat{B}$ conmutan; en caso contrario no conmutan.

En 1925 Werner Heisemberg desarrolla un modelo apoyado en álgebra matricial con la finalidad de resolver problemas de Mecánica Cuántica del tipo que abordaba la ecuación de Schrödinger. De manera que ambos tratamientos son equivalentes pero expresados con diferente lenguaje matemático.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo puede expresarse como una ecuación que involucra operadores, es decir:

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2\,m}\,\frac{d^2}{d\,x^2} + V\left(x\right)\right]\Psi\left(x\right) = E\,\Psi(x) \qquad (12)$$

A partir de la expresión (12) se observa que el operador hamiltoniano esta dado por:

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2\,m}\,\frac{d^2}{d\,x^2} + V\left(x\right) \qquad (13)$$

Es decir; el operador hamiltoniano para una partícula en una dimensión se puede escribir:

$$\hat{H}\,\Psi\left(x\right) = E\,\Psi\left(x\right) \qquad (14)$$

En el caso tridimensional la ecuación de Schrödinger se escribe de la forma:

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2\,m}\,\nabla^2 + V\left(x, y, z\right) \qquad (15)$$

Valores propios en operadores.

La expresión (14) también se puede expresar en la forma:

$$\hat{A}\,\rho\left(x\right) = a\,\rho\left(x\right) \qquad (16)$$

Para resolver la ecuación anterior (16) se utiliza el método de valores propios, es decir se encuentra la función $\rho\left(x\right)$ y la constante a ; en donde $\rho\left(x\right)$ es llamada la función característica o eigenfunción y a eigenvalor.

Ejemplo.

Sea $f\left(x\right) = e^r$ una función propia del operador:

$$\hat{O} = -\frac{1}{2\,r^2}\,\frac{d}{d\,r}\left(r^2\,\frac{d}{d\,r}\right) - \frac{1}{r}$$

¿ Encuentre el valor propio del operador ?

Solución:

Aplicando la función $f\left(x\right)$ al operador $\hat{O}$, resulta:

$$\hat{O}\, e^{-r} = -\frac{1}{2\,r^2}\frac{d}{d\,r}\left(r^2\,\frac{d\,e^{-r}}{d\,r}\right) - \frac{1}{r}$$

$$\hat{O}\, e^{-r} = -\frac{1}{2\,r^2}\frac{d}{d\,r}\left(-r^2\,e^{-r}\right) - \frac{e^{-r}}{r}$$

$$\hat{O}\, e^{-r} = -\frac{1}{2\,r^2}\left[-\left(r^2\,\frac{d\,e^{-r}}{d\,r} + \frac{d\,r^2}{d\,r}\,e^{-r}\right)\right] - \frac{e^{-r}}{r}$$

$$\hat{O}\, e^{-r} = -\frac{1}{2\,r^2}\left[-\left(-r^2\,e^{-r} + 2\,r\,e^{-r}\right)\right] - \frac{e^{-r}}{r}$$

$$\hat{O}\, e^{-r} = -\frac{1}{2\,r^2}\left[r^2\,e^{-r} - 2\,r\,e^{-r}\right] - \frac{e^{-r}}{r}$$

$$\hat{O}\, e^{-r} = -\frac{1}{2}\,f\left(r\right)$$

Por lo tanto:

$f\left(r\right)$ es una función propia del operador $\hat{O}$ con valor propio $a = -\frac{1}{2}$.

A cada operador le corresponde un conjunto de funciones propias $\{\ \phi_i\ \}$ con valores propios $\{\ a_i\ \}$. Sin embargo, existe la posibilidad de que algunas de estas funciones propias les corresponda el mismo valor propio, en cuyo caso se denominan funciones propias degeneradas.

Considerando que $f = \sum_i^m k_i\,\phi_i$ es una combinación lineal de un conjunto en expansión, entonces:

$$\hat{A}\,f = \hat{A}\sum_i^m k_i\,\phi_i \qquad (17)$$

$$\hat{A}\, f = \sum_{i}^{m} k_i \,\hat{A}\, \phi_i = \sum_{i}^{m} k_i \, a \, \phi_i = a \sum_{i}^{m} k_i \, \phi_i = a \, f$$

Por lo tanto, la combinación lineal de funciones propias degeneradas del operador $\hat{A}$ también es función propia de este.

Valores esperados.

El valor esperado o valor promedio de una cantidad A le corresponde un operador lineal $\hat{A}$.

Considere que a la coordenada X se le asocia un operador $\hat{X}$ multiplicativo.

Entonces el valor esperado de X, esta dado por la expresión:

$$\langle X \rangle = X \; \left| \Psi\left(X,t\right)\right|^2 \, d\, X = \int_a^b X \, \Psi^*\left(X,t\right)\Psi\left(X,t\right) d\, X$$

Al intercambiar el orden de los factores; se obtiene:

$$\langle X \rangle = \int_a^b \Psi^*\left(x,t\right)\; \hat{x}\, \Psi\left(x,t\right) d\, x$$

En esta última expresión: $\hat{x}\, \Psi\left(x\,,t\right) = \;\Psi\left(X,t\right) d\, X$

En general en Mecánica Cuántica se establece que cualquier operador que representa a una cantidad física se obtiene de la forma:

$$\langle A \rangle = \int \Psi^* \, \hat{A} \;\; \Psi \;\; d\, V$$

En el caso de una dimensión:

$$\langle A \rangle = \int_a^b \Psi^*\left(x,t\right) \hat{A} \;\; \Psi\left(x,t\right) \;\; d\, x$$

Y se además se debe de cumplir:

$$\int_a^b |\Psi(x,t)|^2 \, dx = 1$$

Si $\Psi(x,t)$ cumple con la condición anterior se dice que se trata de una función de onda normalizada.

Si dice que una función de onda $\Psi(x,t)$ no esta normalizada en donde se satisface:

$$\int_a^b |\Psi(x,t)|^2 \, dx = \alpha \qquad \text{en donde } \alpha \neq 0$$

Sin embargo, en el caso anterior la expresión $|\Psi(x,t)|^2$ no representa una función de distribución de probabilidades y el valor esperado se expresa:

$$\langle A \rangle = \frac{\int_a^b \Psi^*(x,t)\,\hat{A}\,\Psi(x,t)\,dx}{\int_a^b |\Psi(x,t)|^2 \, dx}$$

Operador Hermitiano.

Sea: $\hat{A}$ un operador lineal que representa a la propiedad física A, entonces el valor promedio de A esta dado por:

$$\langle A \rangle = \int \Psi^* \hat{A} \, \Psi \, dV = \int \Psi^* \left(\hat{A} \Psi \right) dV$$

Dado que A es un número real, entonces:

$$\langle A \rangle = \langle A \rangle^*$$

es decir:

$$\int \Psi^* \hat{A} \, \Psi \, dV = \left[\int \Psi^* \hat{A} \, \Psi \, dV \right]^*$$

Dado que $(z_1 + z_2)^* = z_1^* + z_2^*$ y $\left(z_1^*\right)^* = z_1$; $\forall \, z_1 , z_2 \in \subset$, la ecuación anterior, se expresa:

$$\int \Psi^* \hat{A} \ \Psi \, d\, V = \int \Psi^* \left(\hat{A} \Psi \right) d\, V$$

Como se ha observado un operador que satisface la ecuación anterior, es llamado operador Hermitiano.

Un operador Hermitiano es también llamado operador adjunto.

Dos funciones complejas ϕ y ψ son ortogonales, si y solo si:

$$\int \phi^* \ \Psi \, d\, V = \int \Psi^* \ \phi \, d\, V = 0$$

Además, si ϕ y ψ están normalizadas, se dice que las funciones son ortonormales.

Ejemplo.

Determine si las funciones $f\,(x) = sen\, x$ y $g\,(x) = \cos x$, son ortogonales en el intervalo $x \in [0\,,\pi]$.

Solución.

Por tratarse de funciones reales $f^*\,(x) = f\,(x)$ y $g^*\,(x) = g\,(x)$, entonces:

$$\int_0^{\pi} f\,(x)\, g\,(x)\, d\ x = \int_0^{\pi} sen\,(x) \cos\,(x)\, d\ x$$

Resolviendo, resulta:

$$\int_0^{\pi} f\,(x)\, g\,(x)\, d\ x = \int_0^{\pi} u\ d\ u = \frac{1}{2}\,(sen\,\pi - sen\,0) = \frac{1}{2}\,(0-0) = 0$$

Dado que $u = sen\, x$ y $d\ u = sen\, x\, dx$.

Conjunto Completo

Las funciones propias de un operador Hermitiano forman un conjunto completo.
Esto significa que cualquier función f continua y derivable, siempre puede expresarse como combinación lineal de las funciones propias del operador $\hat{A}$.

$$f = \sum_{i=0}^{\infty} K_i \ \Phi_i$$

Para determinar el conjunto de coeficientes de la expansión $\{ K_i \}$, entonces:

$$\int \phi_j^* \; f \; dV = \sum_{i=0}^{\infty} K_i \int \phi_j^* \; \phi_i \; dV$$

Dado que las funciones propias son ortogonales, entonces la ecuación anterior, se expresa de la forma:

$$\int \phi_j^* \; f \; dV = \sum_{i=0}^{\infty} K_i \; \delta_{ij}$$

Para el miembro derecho de la ecuación solo cuando $i = j$ será diferente de cero, entonces:

$$\int \phi_j^*(x) f(x) \, dx = K_j$$

Conmutadores.

Propiedades de los conmutadores.

a) $\left[\hat{A}, \hat{B} \right] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = -\left(\hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} \right) = -\left[\hat{A} . \hat{B} \right]$

b) $\left[\hat{A}, \hat{A} \right] = 0$

c) $\left[\hat{A}, \hat{A}^N \right] = 0$

d) $\left[K\hat{A}, \hat{B} \right] = K \left[\hat{A}, \hat{B} \right]$

e) $\left[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C} \right] = \left[\hat{A}, \hat{B} \right] + \left[\hat{A}, \hat{C} \right]$

f) $\left[\hat{A}, \hat{B} \cdot \hat{C} \right] = \left[\hat{A}, \hat{B} \right] \cdot \hat{C} + \hat{B} \left[\hat{A}, \hat{C} \right]$

Teorema.

Si dos operadores lineales Hermitianos conmutan, entonces es posible seleccionar un conjunto completo de funciones propias.

Si un operador $\hat{A}$ es Hermitiano con funciones propias $\{ \phi_i \}$ y valores propios $\{ a_i \}$, entonces:

$$\hat{A} \ \phi_i = a_i \ \phi_i$$

Ahora aplicando el operador $\hat{B}$, en ambos lados de la relación anterior, se obtiene:

$$\hat{B} \hat{A} \ \phi_i = \hat{B} [a_i \ \phi_i] = a_i \left[\hat{B} \ \phi_i \right] \qquad \text{(I)}$$

Dado que:

$$\hat{B} \hat{A} \ \phi_i = \hat{B} \left[\hat{A} \phi_i \right] = \hat{B} [a_i \ \phi_i]$$

$$\hat{B} \hat{A} \ \phi_i = a_i \left[\hat{B} \phi_i \right] = \hat{A} \left[\hat{B} \phi_i \right] = \hat{A} \hat{B} \phi_i \qquad \text{(II)}$$

De la relación (I) y (II). Resulta:

$$\hat{A} \left[\hat{B} \phi_i \right] = a_i \left[\hat{B} \phi_i \right]$$

Lo que significa que $\hat{B} \phi_i$ es función propia de $\hat{A}$.

Algunos operadores de la Mecánica Cuántica.

Considerando el operador Hamiltoniano:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} \qquad (18)$$

En donde:

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d x^2} \qquad (19)$$

Dado que la energía cinética de una partícula libre, esta dada por:

$$E_C = \frac{P^2}{2\,m} \tag{20}$$

Entonces:

$$P^2 = 2\,m\,E_C \tag{21}$$

Por lo tanto de (19), (20) y (21), resulta:

$$\hat{P}_x^{\,2} = 2\,m\,\hat{T}_x = 2\,m\left(-\frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{d^2}{d\,x^2}\right) = -\,\hbar^2\,\frac{d^2}{d\,x^2} \tag{22}$$

Dado que:

$$\hat{P}_x^{\,2} = \hat{P}_x\,\hat{P}_x \tag{23}$$

Por consistencia de (22) y (23), resulta:

$$\hat{P}_x = -\,i\,\hbar\,\frac{d}{d\,x} \tag{24}$$

A continuación se presenta una tabla de los operadores que actúan en Mecánica Cuántica:

Observable	Operador
x	$\hat{x}$
$\vec{r}$	$\hat{r}$
P_x	$\hat{P}_x = -\,i\,\hbar\,\frac{d}{d\,x}$
$\vec{P}_x$	$\hat{P}_x = -\,i\,\hbar\,\nabla$
T_x	$\hat{T}_x = -\left(\frac{\hbar^2}{2\,m}\right)\frac{\partial^2}{\partial\,x^2}$
T	$\hat{T} = -\left(\frac{\hbar^2}{2\,m}\right)\nabla^2$

$V(x)$	$\hat{V}\left(\hat{x}\right)$
$V(x, y, z, t)$	$\hat{V}(x, y, z)$
E_{Total}	$\hat{H} = -\left(\dfrac{\hbar^2}{2m}\right)\nabla^2 + V(x, y, z)$

Postulados de la Mecánica Cuántica

Postulado 1. Existe una función de onda ψ que depende del espacio y el tiempo que contiene la información de un determinado estado de un sistema de partículas.

Postulado 2. (Operadores). A cada observable físico (propiedad medible) le corresponde un operador lineal Hermitiano.

Postulado 3. (Valores mediales). Los únicos valores posibles que pueden resultar de la medición de una propiedad física A, son los valores propios a_i de la ecuación de valores propios $\hat{A}\,\phi_i = a_i\,\phi_i$, en donde $\hat{A}$ es un operador Lineal Hermitiano.

Postulado 4. (Completud). Las funciones propias de todo operador $\hat{A}$ que represente a un observable físico forman un conjunto completo. Es decir la función de onda ψ para cualquier estado se puede representar como una superposición de funciones propias ortonormales $\{g_i\}$ para cualquier operador cuántico; es decir:

$$\Psi = \sum_i C_i\, g_i$$

Postulado 5. (Valores promedio). El valor promedio de la propiedad A de un sistema físico, esta descrito por la función de onda normalizada, dada por:

$$\langle A \rangle = \int \Psi^* A\, \Psi\, d\, V$$

En donde $|A|^2$ es la propiedad de encontrar al sistema A entre x y x + Δx.

Postulado 6. (Ecuación de Schrödinger). La función de onda Ψ de un sistema físico evoluciona en el tiempo de acuerdo con la ecuación de Schrödinger, dada por:

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

En donde $\hat{H}$ es el operador Hamiltoniano del sistema físico.

Un aspecto importante de la Mecánica Cuántica se relaciona con el principio de incertidumbre de Heisenberg y se refiere a la posibilidad de que dos propiedades físicas pueden ser medidas simultáneamente con la misma precisión.

Ecuación de movimiento propuesta por Heisenberg

Considerando el operador M como una matriz que describe un sistema físico y en donde a partir de los eigenvalores podemos saber los resultados esperados en un experimento, entonces los cambios en el sistema físico se pueden obtener a partir de los cambios del operador H aún manteniendo la función de onda Ψ inmutable.

La ecuación de movimiento propuesta por Heisenberg esta dada por:

$$\dot{Q} = \frac{1}{i\hbar}\left[Q , H\right] \qquad (25)$$

En donde Q es una función implícita del tiempo y H es el operador Hamiltoniano de la energía.

Si Q = Q (t) ; entonces la relación anterior (25) se convierte en:

$$\dot{Q} = \frac{1}{i\hbar}\left[Q , H\right] + \frac{\partial Q}{\partial t} \qquad (26)$$

Bibliografía.

Acosta V., Clyde L., Graham B., Essentials of Modern Physics, Harper and Row, Publishers, 1973.

De la Peña L., Introducción a la Mecánica Cuántica, FCE-UNAM, 1979.

Hall B., Quantum Theory for Mathematicians, UTM Springer New-York, 2013.

José Jesús MENA DELGADILLO