

EPISTEMOLOGÍA E HISTORIA DE LA CIENCIA

SELECCIÓN DE TRABAJOS DE LAS XXII JORNADAS

VOLUMEN 18 (2012)

Luis Salvatico
Maximiliano Bozzoli
Luciana Pesenti
Editores



ÁREA LÓGICO-EPISTEMOLÓGICA DE LA ESCUELA DE FILOSOFÍA
CENTRO DE INVESTIGACIONES DE LA FACULTAD DE FILOSOFÍA Y HUMANIDADES
UNIVERSIDAD NACIONAL DE CÓRDOBA



Esta obra está bajo una Licencia Creative Commons atribución NoComercial-SinDerivadas 2.5 Argentina



Propiedades del paradigma de partículas en mecánica cuántica (no relativista)

Oswaldo M. Moreschi *

1. Introducción

1.1 Consideraciones generales

El concepto de partícula es sometido a una revisión profunda cuando se estudia las propiedades de la materia en término del marco conceptual conocido como *mecánica cuántica*. En esta ocasión nos concentraremos en sistemas de una partícula en la llamada mecánica cuántica no-relativista, o sea el marco teórico que no toma en cuenta la existencia de una velocidad máxima para las interacciones.

En la visión clásica de la naturaleza (esto es, no cuántica), una partícula es un objeto puntual al que además se le asigna características mecánicas, como su masa.

El marco teórico de la mecánica cuántica nos obliga a distinguir, al menos dos regímenes: uno de grandes escalas que denominaremos *macroscópico* y otro de pequeñas escalas que denominaremos *microscópico*. Junto con esta afirmación existen otras que complementan y dan forma al entendimiento de la mecánica cuántica. En esta oportunidad repasaremos los lineamientos generales del marco teórico de la mecánica cuántica, incluyendo principios que con frecuencia son subestimados en la enseñanza de este tema.

Haremos un breve repaso de las observaciones que llevaron a la necesidad de la mecánica cuántica. Presentaremos la noción de estado de una partícula, observables y dinámica en este marco teórico. Repasaremos algunas de las propiedades distintivas de la noción de partícula que brinda novedosamente la mecánica cuántica.

2. Observaciones fundamentales que conducen a la necesidad de la mecánica cuántica

Es necesario comenzar haciendo un sucinto repaso de las observaciones fundamentales que llevaron a la necesidad de la mecánica cuántica, antes de estudiar la naturaleza de la misma.

Radiación de cuerpo negro: Desde un punto de vista histórico, el estudio de la radiación de cuerpo negro representa un hito en el desarrollo de la mecánica cuántica. El problema de interés consiste en describir la radiación electromagnética en una cavidad a temperatura T . Un tratamiento clásico de la densidad de energía para dicho sistema conduce a expresiones divergentes para la energía total. A esto se le llamó 'la catástrofe del ultravioleta'. Max Planck encontró una expresión analítica para explicar las observaciones de la radiación de cuerpo negro; pero además tuvo éxito en derivar la fórmula de la radiación de la suposición de que la energía emitida por la pared, de frecuencia ω , sólo se realizaba en múltiplos (cuantos) de la forma $E_n = n\hbar\omega$, donde n es un número natural y \hbar una constante. A esto se lo conoce como la cuantización de la energía de la radiación.

El efecto fotoeléctrico. Cuando luz de frecuencia ω incide sobre una superficie metálica, se observa la emisión de electrones con energía cinética dada por $E = \frac{1}{2}mv^2 = \hbar\omega - W$;

* U.N.C. - CONICET, omoreschi@gmail.com

donde a \mathcal{W} se le llama la función trabajo. Esto condujo a que Einstein propusiese en 1905 la hipótesis de que la radiación electromagnética está cuantizada, y consiste en fotones de energía $E = \hbar\omega$. Esto está de acuerdo con el hecho que si la radiación tiene frecuencia menor que \mathcal{W}/\hbar , entonces no se observa emisión de electrones.

El efecto Compton: El efecto Compton consiste en la observación de que la interacción de radiación electromagnética con electrones libres puede ser explicada como si la radiación consistiese de partículas sin masa (los fotones) con energía $\hbar\omega$. La explicación usa expresiones relativistas para el momento del fotón y del electrón.

Difracción de ondas de materia: Si se hace incidir un haz de electrones sobre una grilla, se observan patrones de interferencia, análogos a los que se observan en experimentos con la radiación electromagnética. La longitud de onda característica λ observada está dada por $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{p}$, donde p es el momento del electrón.

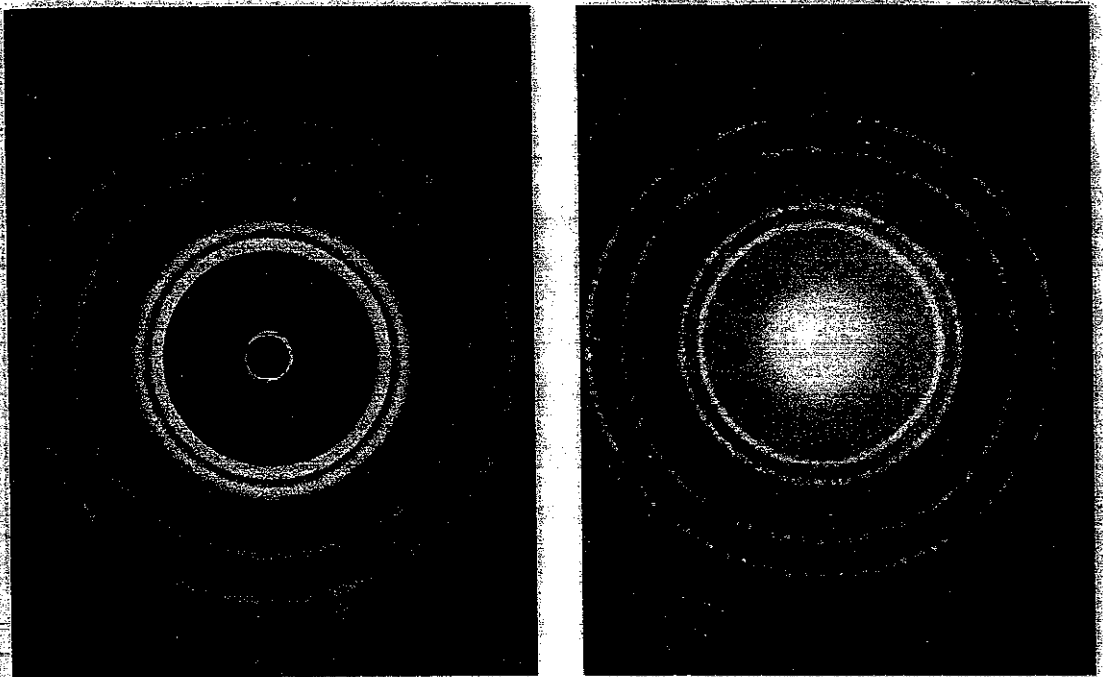


Figura 1: Difracción de electrones. El patrón de difracción en la izquierda fue hecho por un haz de rayos X pasando a través de una lámina de aluminio. El patrón de difracción en la derecha fue hecho por un haz de electrones pasando por la misma lámina. (Del siguiente enlace al 18/9/2012: <http://www4.uwsp.edu/physastr/kmenning/Phys101/Lect35.html>)

Energía discreta de los átomos: El estudio del espectro de emisión de radiación del átomo de hidrógeno presenta la aparición de frecuencias dadas por $h\nu = R_y \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$ donde n y m son números naturales y R_y una constante, llamada constante de Rydberg

Cuantización del momento angular: Mediciones del momento angular intrínseco del electrón o espín están frecuentemente asociadas a observaciones que involucran el momento magnético del electrón. Para un objeto clásico se puede encontrar una relación entre momento angular del mismo y momento magnético. Las primeras observaciones del momento magnético del electrón indicaron una cuantificación del mismo, lo que sugirió una correspondiente cuantificación del momento angular intrínseco del electrón. Hoy decimos que el espín del electrón tiene el valor $S = \frac{1}{2}\hbar$

Principio de indeterminación: Las observaciones obligaron a que la descripción de las 'partículas' microscópicas debía realizarse por medio de campos. Estudios elementales sobre esto condujo a Heisenberg a deducir que el llamado *principio de incerteza* para la observación simultánea de posición y momento. Si consideramos la coordenada x y el momento p_x , y denotamos con Δx la imprecisión en la determinación de x y con Δp_x imprecisión en la determinación de p_x , entonces se deduce que se satisface la desigualdad

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1)$$

Esto implica que no se pueden determinar ambas cantidades con infinita precisión al mismo tiempo.

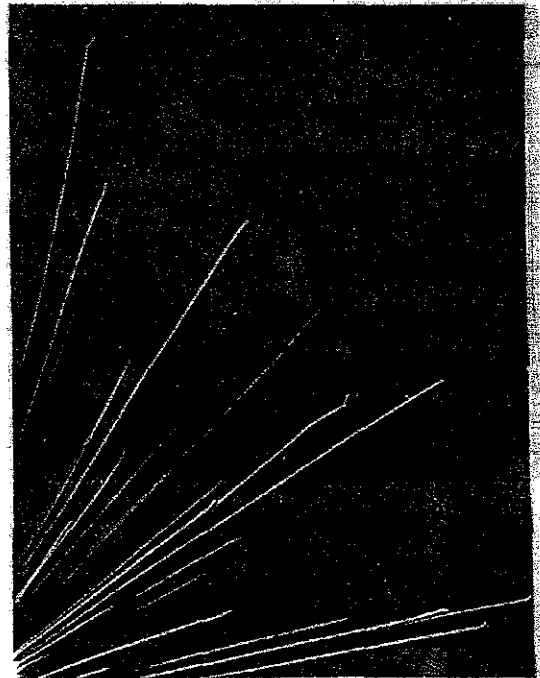
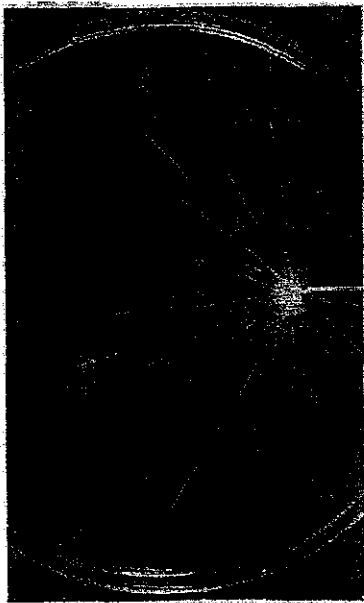


Figura 2. Fotografías del experimento de Wilson [Wil12] con la cámara de niebla donde aparece el trazado de las llamadas partículas alfa, emanadas de una muestra de radio.

Las observaciones de la materia, a nivel microscópico, muestran que las partículas elementales se comportan como ondas de materia. Por otro lado la radiación electromagnética, que desde el punto de vista clásico se representa por campos y ondas, muestra características de partículas. De esto se deduce que tanto la materia como la radiación electromagnética presentan un comportamiento dual, en algunos casos tienen las propiedades de ondas en otros la de partículas.

A principios del siglo XX se estuvo entonces en la situación de que las observaciones mostraron lo inapropiado de usar la mecánica clásica para la descripción de los fenómenos microscópicos. El problema no sólo estaba en la imprecisión de las leyes de movimiento sino en la naturaleza inadecuada de los conceptos para describir los fenómenos a escalas atómicas.

Uno de los argumentos más influyentes, señalando la necesidad de una nueva teoría, fue señalado por Dirac; que a continuación intentamos reproducir. En una descripción clásica de la materia uno intentaría explicar el comportamiento de un sistema en términos de pequeñas partes constituyentes del mismo. Cada parte a su vez se la puede pensar constituida por otras partes más pequeñas. Este procedimiento se lo puede pensar iterativamente lo que conduciría a la necesidad de manejar una información infinita para describir cualquier pedazo finito de materia “Mientras *grande* y *pequeño* sean conceptos relativos, no será de ayuda explicar lo grande en término de lo pequeño. Es entonces necesario modificar las ideas clásicas de tal forma de dar un significado absoluto al tamaño.” [Dir58]

Conviene enfatizar que esta observación implica otra igualmente importante. La ciencia trata de cosas observables y las observaciones las podemos pensar como interacciones del objeto bajo estudio con objetos de referencia. Por lo tanto el acto de observación está necesariamente acompañado por alguna clase de disturbio del objeto observado. Se podría definir un objeto como grande (macroscópico) cuando los disturbios ocasionados por las observaciones pueden ser despreciados; y se podría definir un objeto como pequeño (microscópico) cuando estos disturbios no pueden ser despreciados. Todo esto nos conduce a pensar que existe un límite a la fineza de nuestro poder de observación y a la pequeñez del disturbio ocasionado; un límite que es inherente a las cosas y no puede ser subsanado por el avance tecnológico o la habilidad del observador. También se deduce que debemos acostumbrarnos a una indeterminación inevitable en el cálculo de resultados observacionales; la teoría nos permitirá calcular en general sólo la probabilidad de obtener un resultado particular cuando se hace una observación.

3. Física de partículas en la mecánica cuántica

En esta sección repasaremos los aspectos conceptuales sobresalientes de la mecánica cuántica.

3.1 Noción de estado de una partícula en la mecánica cuántica

En todo marco conceptual se debe tener en claro como se define el *estado* del sistema bajo estudio. En el caso de la mecánica cuántica, el estado de las ‘partículas’ queda determinado por una *función de onda* Ψ . Esta es una función suave compleja que tiene información sobre la probabilidad de obtener un dado resultado cuando se realiza una observación de la partícula.

Desde un punto de vista un poco más abstracto, diremos que la función de onda Ψ es un vector en un espacio de Hilbert apropiado, para describir al sistema bajo estudio. El espacio de Hilbert proporciona un producto escalar que normalmente se representa con la notación $\langle \eta | \Psi \rangle$; para dos vectores $|\eta\rangle$ y $|\Psi\rangle$, que es la llamada notación de Dirac. La relación entre la notación de función de onda $\Psi(x)$ y 'bra' y 'kets' de Dirac es: $\langle x | \Psi \rangle = \Psi(x)$. De esta manera la notación de Dirac invita a pensar a $|\Psi\rangle$ como el vector en el espacio de Hilbert y a $\Psi(x)$ como su componente en la dirección del vector $|x\rangle$.

Normalmente se requiere que los vectores estado estén normalizados respecto de este producto.

3.2 Probabilidad

La noción de *probabilidad* en mecánica cuántica alcanza una dimensión distinta de la que se puede discutir en el contexto clásico.

Usualmente uno diría que existen dos concepciones asociadas a la probabilidad. Por un lado se tiene la concepción *frecuentista* de la probabilidad en el cual uno infiere la probabilidad en base a una repetición de observaciones sobre el sistema aleatorio. Se podría decir que esta es la concepción más usada cuando se menciona a la probabilidad.

Por otro lado podemos referirnos a una concepción *elemental* de la probabilidad en el cual se infiere la probabilidad de un evento en base a la información detallada del arreglo previo a una única observación. En esta segunda concepción se le da sentido a la noción de probabilidad, antes de realizarse una sola observación. Esta concepción no es tan usada como la frecuentista, pero no se contradice con ella, sino que coincide cuando se realizan un gran número de observaciones.

La mecánica cuántica nos indica que la concepción elemental de la probabilidad se debe interpretar cuando se hacen afirmaciones sobre el resultado de observaciones. Un ejemplo paradigmático es el de un sistema de espín $1/2$ preparado en un autoestado de S_y donde (x, y, z) son coordenadas cartesianas de un sistema inercial y S representa el operador de espín. Luego si se mide S_x , la mecánica cuántica afirma, *antes de hacerse la observación*, que la probabilidad de obtener $\hbar/2$ es exactamente el 50%. Esta afirmación sólo tiene sentido en una concepción elemental de la probabilidad.

3.3 Observables y mediciones

La mecánica cuántica nos obliga a perfeccionar el lenguaje con el cual describimos la teoría. Esto fundamentalmente se debe a que nuestro lenguaje ha sido desarrollado en base a nuestra experiencia basada en el mundo macroscópico del que formamos parte. Esto tiene como consecuencia que frecuentemente intentamos extender de nuestra vida cotidiana macroscópica, conceptos al quehacer del mundo microscópico; como es el concepto de partícula. Pero en particular es de crucial importancia tener en claro sobre qué conviene centrar las discusiones del mundo microscópico. Una de esas reglas es sólo referirse a observables; esto es, evitar hacer uso de conceptos que no estén directamente relacionados con observables.

Pero ¿qué son los observables en mecánica cuántica? Desde un punto de vista formal, diremos que los observables son operadores autoadjuntos [Mer70] en el espacio de Hilbert que se usa para describir al sistema bajo estudio.

Ejemplos de observables en la mecánica cuántica (no relativista) son: la posición, el momento, el momento angular, el espín, etc.

Dado un observable A , se denomina valor de expectación $\langle A \rangle$ al número $\langle A \rangle = \langle \Psi | A | \Psi \rangle$, mientras que su varianza ΔA está definida por $(\Delta A)^2 = \langle \Psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \Psi \rangle$.

Dados dos observables una propiedad que se distingue es si conmutan o no conmutan como operadores. Esta propiedad es importante, pues para todo par de observables que no conmutan existe una relación de indeterminación análoga a (1). En particular se tiene que si el conmutador de los observables A y B es $[A, B] = iC$, entonces se cumple que: [Mer70]

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} \langle C \rangle, \quad (2)$$

donde $\langle C \rangle$ es el valor de expectación del operador C . Esto nos muestra que el llamado *principio de incerteza* de Heisenberg, es en realidad el resultado de un teorema matemático para dos operadores que no conmutan.

Las mediciones están caracterizadas de la siguiente manera. El resultado de una medición del observable A es un autovalor a del mismo.

Sea $|\Psi_a\rangle$ el autovector normalizado del operador A con autovalor a ; luego la probabilidad de obtener el resultado a al medir el observable A cuando el sistema (la partícula) está en el estado $|\Psi\rangle$ es $|\langle \Psi_a | \Psi \rangle|^2$.

De esto se deduce que hay certeza en obtener el resultado a como resultado de la medición del observable A , sólo si el estado del sistema coincide con $|\Psi_a\rangle$.

Implícito en estas afirmaciones está el requerimiento de que el conjunto de los autovectores de un observable debe ser completo [Gri95].

3.4 Principio de superposición

Este principio afirma que si Ψ_a es un estado posible de la partícula y Ψ_b es otro estado posible; entonces su combinación lineal también es un estado posible de la partícula.

3.5 Dinámica de una partícula

La ley dinámica debe dar una prescripción para la evolución temporal de los estados. En la mecánica cuántica dicha ley es extremadamente sencilla y adopta la forma lineal de la ecuación de Schrödinger, esto es:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi; \quad (3)$$

donde i es el número complejo tal que $i^2 = -1$, \hbar es la llamada constante de Planck (dividida por 2π) y H es un operador autoadjunto del espacio de Hilbert apropiado que se llama hamiltoniano del sistema. De esta manera la descripción del sistema está codificada en el hamiltoniano del mismo.

La ecuación de Schrödinger se puede entender tanto en término del ket $|\Psi\rangle$ como de la función de onda $\Psi(x)$.

Habiendo llegado a una formulación tan distinta de la dinámica, uno podría creer que no habría ninguna relación entre el hamiltoniano cuántico H con su respectiva versión clásica, para sistemas físicos análogos (como podría ser el problema de campo central). Sin embargo se puede ver que dado un sistema físico con una interpretación clásica, se puede construir un hamiltoniano cuántico con relativa facilidad. Más precisamente, lo que tenemos en mente es que en la representación posición, sólo se debe cambiar la aparición de los momentos por su correspondiente operador cuántico.

3.6 El espín de las partículas

Es un hecho que las partículas elementales como el electrón tienen momento angular intrínseco o espín y además que el mismo está cuantizado.

A primera vista uno podría pensar que el hecho de que las partículas puedan tener espín se debe a la naturaleza cuántica de la materia y que es ausente en la descripción clásica de las partículas. Sin embargo hemos señalado en otra oportunidad [Mor00] que no existe ninguna obstrucción formal para adjudicar momento angular intrínseco a las partículas clásicas. Lo que sí es una característica meramente cuántica es que el valor del espín esté cuantizado. Esto es, el electrón no puede tener cualquier valor de espín.

3.7 Noción de estado de varias partículas en la mecánica cuántica

La descripción de un sistema de varias partículas se hace en término del aumento del espacio de Hilbert correspondiente a una partícula para incluir todas las características de las otras partículas. De tal forma que el estado Ψ del sistema compuesto se puede expresar en término del producto de estados elementales para cada una de las partículas.

4. Otras propiedades de las partículas

4.1 Espectros discretos

Una peculiaridad que aparece frecuentemente en sistemas cuánticos es que los espectros de los observables pueden ser discretos.

Por ejemplo; una partícula en una caja tiene un espectro de energía discreto. En particular, su momento siempre es distinto de cero, por lo que uno diría que la partícula no puede estar quieta.

Otro ejemplo; el momento angular tiene espectro discreto.

4.2 El efecto túnel

Una de las propiedades singulares en la mecánica cuántica es el llamado efecto túnel que indica que una barrera de potencial, que en el contexto clásico sería infranqueable, en el contexto cuántico puede ser penetrada.

4.3 La noción de indistinguibilidad de las partículas

Un aspecto sobresaliente en la descripción microscópica de la materia es que las partículas elementales se pueden clasificar en clases, siendo que dos partículas de la misma clase son

idénticas y por lo tanto son indistinguibles. Por ejemplo, si se tiene dos electrones en una caja, no hay forma de distinguirlos.

Esto es un aspecto nuevo, que no se tenía en el contexto clásico, dado que para partículas clásicas, uno siempre puede suponer de algún mecanismo que pueda ayudar a distinguir las partículas. Por ejemplo uno podría pensar en que las partículas tienen color, que no afecta a su mecánica.

Pero en el contexto cuántico esto no se puede materializar, dado que si se pudiese distinguir entre dos partículas es por que habría una característica que las distingue, lo que no las haría partículas de la misma clase. Esto no se debe confundir con el hecho de que partículas indistinguibles puedan estar en distintos estados cuánticos

Denotemos con \mathcal{A} un conjunto completo de observables, con autovalores \mathcal{A}_j para una partícula. Luego, una base para el estado de un conjunto de partículas idénticas se puede representar por medio de vectores $|n_1, n_2, n_3, \dots\rangle$, donde n_j indica el número de partículas con autovalores \mathcal{A}_j .

4.4 Las dos estadísticas

Para un caso de dos partículas idénticas, denotando con α al conjunto de variables cuánticas que refieren a la primer partícula y con β al conjunto de variables cuánticas que refieren a la segunda, entonces el estado cuántico del sistema conjunto $|\alpha, \beta\rangle$ satisface que

$$|\alpha, \beta\rangle = \pm |\beta, \alpha\rangle; (4)$$

donde el signo $+$ se usa para los llamados *bosones* y el signo $-$ para los *fermiones*. Es un resultado de la mecánica cuántica relativista que los bosones tienen espín entero y los fermiones espín semientero en unidades de \hbar .

5. Comentarios finales

Probablemente lo primero que debemos remarcar como diferencia del marco conceptual clásico con el marco conceptual cuántico, es que mientras en el primero se asume tácitamente que es posible realizar observaciones sin alterar el estado del sistema; en el ambiente cuántico sucede lo opuesto. Esto es, debido a que se está observando los constituyentes elementales de la materia, y como sólo se puede usar la materia para realizar observaciones, es imposible no interactuar con el sistema bajo estudio en cada observación.

Es de notar que esto además implica que todas las clases de partículas elementales, en algún sentido [Dir58], tienen tamaños similares. De no ser así, podríamos usar las partículas más pequeñas para observar las de las clases más grandes; de tal forma que la dinámica de las más grandes no se alteren. En vez de esto lo que sucede, cuando deseamos observar un electrón, por ejemplo, es que lo alumbramos, o sea, le enviamos un gran número de fotones; pero cada interacción fotón-electrón altera el estado del último.

En el contexto clásico uno diría brevemente que una partícula es un objeto puntual al que se le puede adjudicar una cantidad mecánica llamada masa, y un momento angular intrínseco o espín. Por lo tanto conceptos naturales son el de trayectoria y velocidad de la partícula.

En el contexto cuántico uno diría concisamente que una partícula es un objeto caracterizado por un vector en un espacio de Hilbert, al que se le puede adjudicar una cantidad mecánica llamada masa, y momento angular intrínseco o espín. Conceptos naturales son el de posición, momento, momento angular y otros. No son conceptos naturales los de trayectoria ni velocidad en mecánica cuántica.

En particular, ya no se puede adjudicar absolutamente la noción de objeto puntual a una partícula; aunque uno podría hablar de partícula sin ulterior estructura.

Uno podría insistir en afirmar que una partícula cuántica es un objeto puntual, dado que a un dado tiempo t se puede medir con absoluta precisión si la partícula está en el punto x . Sin embargo esto implica una imprecisión total en el momento, por lo que una medición ulterior de la posición al tiempo $t+\Delta t$, podría dar como resultado la posición de la partícula en cualquier otro punto. Es por ello que no se puede reconstruir una noción de trayectoria, ni velocidad en mecánica cuántica.

Al referirnos al electrón como una 'partícula elemental' representada por un vector en un espacio de Hilbert, nos aparece la imagen contradictoria de una noción de partícula puntual en contraste con la imagen de una función de onda. Esta dicotomía probablemente la podríamos subsanar si conviniésemos en renombrar a los componentes fundamentales de la materia con otro nombre, evitando el término 'partícula'. Pero esto no cambiaría el hecho que los 'corpúsculos elementales' son pequeños desde un punto de vista macroscópico, pero que tienen una descripción de una naturaleza muy distinta a las 'partículas clásicas'.

Bibliografía

- [Dir58] P. A. M. DIRAC. *Principles of Quantum Mechanics*. Oxford University Press, Oxford, fourth, revised edition, 1958.
- [Gr95] DAVID J. GRIFFITHS. *Introduction to Quantum Mechanics*. Prentice Hall, Inc., 1995.
- [Mer70] EUGENE MERZBACHER. *Quantum Mechanics*. John Wiley & Sons, Inc., New York, second edition, 1970.
- [Mor00] O. M. MORESCHI. *Fundamentos de la Mecánica de Sistemas de Partículas*. Editorial Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, 2000.
- [Wil12] C. T. R. WILSON. On an Expansion Apparatus for Making Visible the Tracks of Ionising Particles in Gases and Some Results Obtained by Its Use. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 87:277-292, 1912.