El objetivo de esta hoja es componer una primera versión de lo que te marqué como primer punto en la propuesta de temario "Física cuántica y la interpretación de Copenhague". Quizá te sorprendas de que volvamos ahora a esto. La razón es que ahora tienes un conocimiento más profundo y además ya estás preparado para que hagamos algunas cuentas matemáticas.

Te avanzo que posiblemente te lleve tiempo escribir lo correspondiente a esta parte porque tienes que asimilar unas cuantas lecturas. Tómate el tiempo que necesites y si te atascas en algo, pregúntame. Por cierto, lo que leas debería ir a la bibliografía. Corta y pega los `bibitem` que necesites de la fuente de esta hoja, ajustando el formato a tu gusto.

En primer lugar vamos a volver a los postulados de la mecánica cuántica. Ya te había contado cuáles eran los fundamentales. También te indiqué que variaban de autor a autor. Lo que quiero ahora es que veas diferentes versiones.

1) Lee los postulados tal como aparecen en [NO08] y en [Kak14], te los adjunto en `doc01.pdf` y `doc02.pdf`. Estos libros no son estrictamente de física cuántica. Ahora lee la sección 1.3 de [Ynd03] (hay varios ejemplares en la biblioteca).

El libro más riguroso que conozco de mecánica cuántica es [GP78]. Ya te recomendé que mirases los postulados allí. No sé si lo has hecho o te ha asustado el número de páginas que dedica a ellos. En ese caso, hay una segunda oportunidad:

2) Mira los postulados en [GP78]. Los explica con mucho detalle y rigor. Me basta con que leas los postulados en sí (lo que está recuadrado) intentando entender la notación. Por ahora te puedes saltar el postulado IV y el VI.

En hojas anteriores te conté un poco el origen de estas cosas tan raras y te mandé leer algunas secciones de mis notas. Ahora ya estás preparado para algo más preciso. He escogido un texto muy antiguo, el original es de 1931, porque desvirtúa menos la historia y muestra las motivaciones originales. Está tomado de un libro de H. Weyl, un matemático con grandes contribuciones a la física teórica que quizá te haya aparecido en algún teorema del grado.

3) Lee las secciones II.1 y II.2 de [Wey50]. Te las paso en `doc03.pdf`. Los subrayados y comentarios los he puesto para ti. Ya sé que habla de diversos experimentos y propiedades físicas que quizá te digan poco. En lo que debes fijarte es cómo motivaron el desarrollo de la mecánica cuántica.

Ahora pasamos a la ecuación de Schrödinger. Inicialmente Schrödinger la introdujo para partículas sin espín (al final de su trabajo original [Sch26] lo señala como una deficiencia). Aunque no sea el tema principal de tu trabajo, algo tienes que saber de ella porque la vamos a necesitar.

Primeramente supondremos que tenemos una partícula sin espín que se mueve por el eje X.

Matemáticamente es lo mismo que tener una función de ondas $\Psi = \Psi(x,t)$ tal que para cada tiempo t fijado es $\mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{C}$. El Hamiltoniano es el operador correspondiente a la energía, como sabrás por la hoja anterior y por [Wey50].

4) Lee §3.3 de mis notas hasta (3.13) incluido. La forma (3.10) de la ecuación de Schrödinger es la que corresponde a las partículas individuales "de toda la vida" en un campo, para las cuales el Hamiltoniano es $H = p^2/2m + V$ donde cuánticamente p^2 es el operador momento $\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$ aplicado dos veces y V es el operador multiplicación por V, donde $V = V(x)$ es una función real.

Ahora vamos a ver una propiedad fundamental de la ecuación de Schrödinger. Sabemos que $\int_{\mathbb{R}} |\Psi(x,t)|^2\, dx$ es proporcional a la probabilidad de que la partícula esté en cualquier lugar de $\mathbb{R}$. Si hemos normalizado para que en el instante inicial la constante sea uno, la integral debe ser 1 para todo valor de t. No puede ser que la probabilidad se pierda dejando de ser uno según evoluciona la partícula. Matemáticamente debe existir un teorema que afirme que para cualquier solución de la ecuación en derivadas parciales

$$i\hbar\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + V\Psi \qquad \text{se cumple que} \qquad \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x,t)|^2\, dx \quad \text{no depende de } t.$$

5) Trata de probar este teorema dando por hecho que Ψ, $\partial\Psi/\partial x$ y $\partial\Psi/\partial t$ decaen tan rápido a cero cuando $x \to \pm\infty$ como te apetezca para así no tener problemas de convergencia. *Indicación:* Basta comprobar $\int_{\mathbb{R}} \big(\bar{\Psi}\frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t}\big)\, dx = 0$ donde $\bar{\Psi}$ es el conjugado[1] de Ψ. Utiliza la ecuación de Schrödinger para sustituir las parciales con respecto a t.

6) Sigue leyendo hasta (3.14) y dos líneas más para obtener matemáticamente (1.6). Con esto tienes resuelta la ecuación de Schrödinger en el caso del pozo de potencial infinito.

Hay otros muchos ejemplos de soluciones de la ecuación de Schrödinger con relevancia física, una de las más importantes históricamente es el átomo de hidrógeno, que lleva a unas cuentas bastante laboriosas, y da una explicación matemática de los orbitales atómicos. ¿Es muy ingenuo buscar una "fórmula" que resuelva siempre la ecuación de Schrödinger? En vista de lo diferentes que son los ejemplos, habría que decir que sí pero hay algo formal que es digno de tomarse en consideración. Pensemos en una situación incluso más general que el Hamiltoniano $H = p^2/2m + V$ de una sola partícula de toda la vida. Sólo vamos a pedir que H sea un operador (hermítico para que sea observable) que no dependa del tiempo. Entonces formalmente, el operador llamado de *evolución temporal*

$$U(t) = \mathrm{Id} + \frac{1}{1!}\Big(-\frac{it}{\hbar}\Big)H + \frac{1}{2!}\Big(-\frac{it}{\hbar}\Big)^2 H^2 + \frac{1}{3!}\Big(-\frac{it}{\hbar}\Big)^3 H^3 + \dots$$

[1] En física $\bar{\Psi}$ tiene otro significado relacionado con la ecuación de Dirac, por eso prácticamente nunca se utiliza esta notación tan habitual en matemáticas. Los físicos suelen escribir Ψ^* para indicar el conjugado.

cumple que cuando se aplica a un dato inicial $\Psi(x,0)$, el resultado $U(t)\Psi(x,0)$ es la solución $\Psi = \Psi(x,t)$ de la ecuación de Schrödinger general

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

7) Comprueba que esto es formalmente cierto. ¿Dónde se usa que H no depende del tiempo? Por cierto, la fórmula (2.6) de [NO08] que te he dicho que no leyeras, da el $U(t)$ cuando H depende de t pero sería muy difícil que lo entendieras con la explicación que da allí.

8) Con la notación de (1.6) y (1.5) de mis notas, comprueba que si $H = p^2/2m = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ entonces verdaderamente $U(t)\Psi_n(x,0)$ da $\Psi_n(x,t)$.

Por razones obvias se escribe $e^{-itH/\hbar}$ para denotar a este operador $U(t)$ que resuelve la ecuación de Schrödinger. Si uno confía en esta notación y no tiene muchas exigencias con el rigor, el teorema que has probado antes puede parecer obvio incluso con mayor generalidad, escribiendo:

$$\int \bar{\Psi}\Psi\, dx = \int \overline{e^{-itH/\hbar}\Psi} e^{-itH/\hbar}\Psi\, dx = \int \bar{\Psi} e^{itH/\hbar} e^{-itH/\hbar}\Psi\, dx$$

y las exponenciales se cancelan. Esto que parece tan bárbaro matemáticamente, en el caso en que sólo se considera el espín se vuelve algo fácil de álgebra lineal y relacionado con las cuentas que hiciste en la primera hoja. Seguiremos con eso pero mejor paramos aquí porque esta hoja tiene ya suficientes contenidos. Terminamos con el ejercicio que tienes que entregar:

9) Escribe la sección "Física cuántica y la interpretación de Copenhague" para tu trabajo de fin de grado. Debe incluir necesariamente los siguientes puntos:

- Un poco de historia de la mecánica cuántica.
- Alguna forma de los postulados (te recomiendo poner sólo los más básicos) con comentarios acerca de su motivación, enlazando con la historia o con experimentos. Debes intentar dar una idea de por qué no es una locura total pensar los estados como elementos de un espacio de Hilbert y los observables como operadores.
- Comenta un poco la interpretación de Copenhague.
- Enuncia como un teorema la conservación de la probabilidad para la ecuación de Schrödinger con $H = p^2/2m + V$ e incluye la prueba.
- Resuelve la ecuación de Schrödinger en el caso del pozo de potencial infinito (si prefieres otro ejemplo simple que encuentres en algún libro, por mí no hay problema).
- Habla del operador de evolución temporal $U(t)$.

Intenta que el conjunto no pase de seis páginas con la plantilla que te di. Te repito que escribir esto posiblemente te llevará más tiempo que las hojas anteriores. No te preocupes por ello, es normal.

Referencias

[GP78] A. Galindo and P. Pascual. *Mecánica cuántica.* Alhambra, Madrid, 1978.

[Kak14] S. Kakani. *Modern Physics.* MV Learning, London, New Delhi, second edition, 2014.

[NO08] M. Nakahara and T. Ohmi. *Quantum computing.* CRC Press, Boca Raton, FL, 2008. From linear algebra to physical realizations.

[Sch26] E. Schrödinger. An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *Phys. Rev.*, 28:1049–1070, Dec 1926.

[Wey50] H. Weyl. *The theory of groups and quantum mechanics.* Dover Publications, Inc., New York, 1950. Translated from the second (revised) German edition by H. P. Roberton, Reprint of the 1931 English translation.

[Ynd03] F. J. Ynduráin. *Mecánica cuántica.* Grupo Planeta, 2003.