

APUNTES DE FÍSICA FUNDAMENTAL

Carlos Ruiz Jiménez

Versión 01.08
2 de febrero de 2013

This work is licensed under the Creative Commons Attribution-NonCommercial-NoDerivs 3.0 Unported License. To view a copy of this license, visit

<http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/3.0/> or send a letter to Creative Commons, 444 Castro Street, Suite 900, Mountain View, California, 94041, USA.

(Los capítulos 7, 8, 9, 22 y la biografía de Sidney Coleman son obras de Jose I.Usera)

Índice general

I	SIMETRÍAS	1
1.	TEORÍA DE GRUPOS	3
1.1.	Introducción	3
1.2.	Definición y clases de grupos	4
1.3.	Generadores	5
1.4.	Grupos de Lie	6
1.4.1.	Definición y ejemplos	6
1.4.2.	Álgebra de Lie	8
1.5.	Representaciones	11
1.5.1.	Representaciones lineales	11
1.5.2.	Representaciones irreducibles	12
1.5.3.	Multipletes	14
2.	PRINCIPIO DE HAMILTON. MECÁNICA	15
2.1.	Introducción	15
2.2.	Coordenadas generalizadas	15
2.3.	Integral de acción	16
2.4.	Ecuaciones de Euler-Lagrange	17
2.5.	Elección de la lagrangiana	18
2.6.	Teoremas de conservación	19
3.	ECUACIONES DE HAMILTON	21
3.1.	Introducción	21
3.2.	Ecuaciones de Hamilton	21
3.3.	Transformaciones canónicas	23
3.4.	Función generatriz. Transformación identidad.	24
3.5.	Corchetes de Poisson	26
3.6.	Aplicaciones de los corchetes de Poisson	27
3.6.1.	Ecuaciones del movimiento	27
3.6.2.	Teorema de Poisson	28
3.6.3.	Transformaciones canónicas infinitesimales	28
3.7.	Ecuación de Hamilton-Jacobi	30
4.	PRINCIPIO DE HAMILTON. TEORÍA DE CAMPOS	33
4.1.	Introducción	33
4.2.	Integral de acción	33

4.3.	Ecuaciones de Euler-Lagrange	34
4.4.	Lagrangianos equivalentes	35
4.5.	Ecuaciones de Hamilton	35
4.6.	Corchetes de Poisson	36
5.	TEOREMA DE NOETHER	39
5.1.	Introducción	39
5.2.	Teorema	39
6.	TRASLACIONES. TENSOR ENERGÍA-MOMENTO	43
6.1.	Introducción	43
6.2.	Tensor Energía-Momento	43
6.2.1.	Forma canónica	43
6.2.2.	Forma simétrica	45
6.3.	Homogeneidad del tiempo. Energía	45
6.3.1.	Sistemas libres	45
6.3.2.	Sistemas con interacción	46
6.4.	Homogeneidad del espacio. Momento lineal	47
II	EL SUEÑO DEL RELOJERO	49
7.	MECÁNICA	53
7.1.	Introducción	53
7.2.	Leyes de Newton	53
7.2.1.	Partícula puntual. Vectores de posición, velocidad y aceleración . .	53
7.3.	Energía y momento lineal	55
7.3.1.	Momento lineal de un punto material	56
7.3.2.	Trabajo	56
7.3.3.	Energía cinética	56
7.3.4.	Energía potencial. Fuerzas conservativas. Teorema de conservación de la energía	56
7.3.5.	Teorema de conservación de la energía mecánica	57
7.3.6.	Momento angular. Teorema de conservación del momento angular .	58
7.4.	Principio de relatividad de Galilei	59
7.4.1.	Transformaciones de Galilei	59
7.4.2.	Grupo de Galilei	60
7.5.	Limitaciones a las leyes de Newton impuestas por la electrodinámica	60
8.	SISTEMAS DINÁMICOS	63
8.1.	Sistemas de partículas. Sólido rígido y mecánica del continuo	63
8.1.1.	Centro de masa de un sistema de partículas	63
8.1.2.	Momento lineal, energía y momento angular de un sistema de partículas	64
8.1.3.	Fuerzas exteriores y fuerzas internas. Dinámica del centro de masa .	64
8.1.4.	Sólido rígido	65

9. DINÁMICA ANALÍTICA	67
9.1. Espacio de fases	67
9.1.1. Dinámica analítica. Coordenadas y fuerzas generalizadas. Ligaduras	67
9.1.2. Espacio de fases de un sistema dinámico	68
9.2. Principio de conservación de la información	68
9.2.1. Ecuaciones de Hamilton	69
9.2.2. Paréntesis de Poisson y conexiones con la Mecánica Cuántica	69
III EL SUEÑO DE EINSTEIN	71
10.RELATIVIDAD RESTRINGIDA	75
10.1. Introducción	75
10.2. El éter luminífero	75
10.3. El experimento de Michelson	76
10.4. Principio de relatividad	78
10.5. Simultaneidad. Espacio de Minkowski	79
10.6. Transformaciones de Lorentz	81
11.INTRODUCCIÓN A LA COSMOLOGÍA	85
11.1. Cosmología. Breve historia	85
11.2. Principio cosmológico	88
11.3. Métrica de Robertson-Walker	89
IV LA RUPTURA	93
12.ESTADOS, PREPARACIONES Y OBSERVABLES	97
12.1. Introducción	97
12.2. Observables	97
12.3. Preparaciones	97
12.4. Estados	98
12.4.1. Estados puros	98
12.4.2. Estados mezcla	98
13.LOS POSTULADOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA	99
13.1. Introducción	99
13.2. Postulado I. Marco matemático.	100
13.2.1. Espacio dual. Notación de Dirac.	100
13.2.2. Cierre del espacio de Hilbert	100
13.2.3. Operadores lineales	101
13.3. Postulado II. Estados y observables.	103
13.3.1. Expresión de los estados. Matrices densidad y vectores.	103
13.3.2. Conjunto completo de operadores que conmutan.	104
13.4. Postulado III. Valores medios y probabilidad.	105
13.4.1. Valores medios.	106
13.4.2. Probabilidad.	106

14. LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER	109
14.1. Introducción	109
14.2. Transformaciones de simetría	109
14.3. Ecuaciones del movimiento. Partícula libre	111
14.4. Imágenes de evolución temporal	112
14.5. Representación de posición	114
14.6. Ecuación de continuidad	115
14.7. Soluciones de la ecuación de Schrödinger	116
14.7.1. Método general	116
14.7.2. Potencial cero. Partícula libre	116
14.7.3. Potencial cuadrado	118
14.8. El oscilador armónico unidimensional	123
14.8.1. Método analítico	124
14.8.2. Método algebraico	126
15. EL PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE	129
15.1. Introducción	129
15.2. Deducción de Heisenberg	130
15.3. Relaciones de conmutación	131
15.4. Deducción moderna	131
15.5. Interpretación	132
15.6. Relación de incertidumbre energía-tiempo	133
16. EL LÍMITE CLÁSICO	135
16.1. Introducción	135
16.2. Teorema de Ehrenfest	135
16.3. Evolución de incertidumbres	137
16.3.1. Partícula libre	137
16.3.2. Caso de potenciales a lo sumo cuadráticos	139
16.4. Evolución de paquetes	142
V LA SÍNTESIS	145
17. INTRODUCCIÓN A LAS TEORÍAS CUÁNTICAS DE CAMPOS	149
17.1. Introducción	149
17.2. Limitaciones de la Mecánica Cuántica	150
17.3. Unidades naturales	151
17.4. Escalas	153
17.5. Campo cuántico	155
17.6. Leyes de conservación	158
17.7. El electromagnetismo como teoría gauge	160
17.8. El electromagnetismo como conjunto de osciladores	164
17.9. Cuantificación del campo electromagnético	168
17.10. Bosones y fermiones. Conexión espín-estadística	170

18.PARTÍCULAS RELATIVISTAS DE SPIN 0	173
18.1. Introducción	173
18.2. La ecuación de Klein-Gordon	173
18.3. Soluciones. Energías negativas	174
18.4. El problema de la interpretación probabilística	175
18.5. Cuantificación canónica	179
18.6. Espacio de estados	182
19.ELECTRODINÁMICA CUÁNTICA	185
19.1. Introducción	185
VI MISTERIOS CUÁNTICOS	187
20.INTERPRETACIÓN DE COPENHAGUE-GOTINGA	191
20.1. Introducción	191
20.2. Principio de complementariedad	191
20.3. Positivismo	194
21.EL GATO DE SCHRÖDINGER	195
21.1. Introducción	195
21.2. Descripción	195
21.3. Análisis	196
21.4. Interpretaciones	196
21.4.1. Copenhague	196
21.4.2. Ortodoxa. Conciencia Cuántica	197
21.4.3. Negaciones del colapso	198
21.5. Decoherencia	199
21.6. Los calamares de Schrödinger	201
22.EL TEOREMA DE BELL	203
22.1. Introducción	203
22.2. Elementos de realidad	203
22.3. Variables ocultas	206
22.4. Enredamiento	206
22.5. Localidad	208
22.6. El teorema de Bell	210
22.7. El teorema de Gleason	214
22.8. El teorema de Kochen-Specker	215
22.9. GHZ	216
23.INFORMACIÓN CUÁNTICA	219
23.1. Introducción	219
23.2. El bit	220
23.3. El qubit	221
23.3.1. Esfera de Bloch	221
23.3.2. Base computacional	222

24.COMPUTACIÓN CUÁNTICA	223
24.1. Introducción	223
24.2. Puertas lógicas	224
24.2.1. Puertas unarias	224
24.2.2. Puertas múltiples	228
24.3. Teorema de no clonación	232
24.4. Circuitos cuánticos	233
24.4.1. Máquina de Turing cuántica	233
24.4.2. Generación de entrelazamiento	234
24.4.3. Paralelismo cuántico	235
24.4.4. Interferencia cuántica	236
24.4.5. Circuitos universales	236
24.4.6. Algoritmos cuánticos	239
24.5. Algoritmo de Deutsch	240
24.6. Algoritmo de Simon	243
24.7. Transformada cuántica de Fourier	245
24.8. Algoritmo de Grover	248
24.8.1. Descripción del problema	248
24.8.2. Estrategia	249
24.8.3. Cambio de signo	249
24.8.4. Inversión sobre el promedio	250
24.8.5. Descripción del algoritmo	253
24.8.6. Interpretación geométrica	254
24.8.7. Cálculo del número óptimo de iteraciones	255
24.8.8. Dependencia con el número de soluciones	256
24.8.9. Relación de recurrencia	258
24.8.10.Generalizaciones	259
VII EL RELICARIO	265
25.PAUL EHRENFEST(1880-1933)	269
25.1. Introducción	269
25.2. Biografía	269
25.3. Aportaciones científicas	270
26.MAX BORN (1882-1970)	271
26.1. Introducción	271
26.2. Biografía	271
26.3. Aportaciones científicas	271
27.ETTORE MAJORANA(1906-?)	273
27.1. Introducción	273
27.2. Biografía	273
27.3. Aportaciones científicas	274

28. JOSEPH ROTBLAT (1908-2005)	275
28.1. Introducción	275
28.2. Biografía	275
28.3. Aportaciones científicas	276
29. SIDNEY RICHARD COLEMAN (1937-2007)	277
29.1. Introducción	277
29.2. Biografía	277
29.3. Aportaciones científicas	277
Apéndices	281
A. Cálculo de la métrica Robertson-Walker con <i>Mathematica</i>	283
Bibliografía	289

Parte I
SIMETRÍAS

Los matemáticos no estudian objetos, sino relaciones entre los objetos; les resulta, pues, indiferente reemplazar esos objetos por otros, siempre que las relaciones no cambien. La materia no les importa, sólo la forma les interesa.

H.Poincaré [16]

Capítulo 1

TEORÍA DE GRUPOS

1.1. Introducción

Observar las simetrías que posee la Naturaleza es el objetivo principal de la Física Fundamental, ya que de ahí también podremos deducir las leyes que la gobiernan. El concepto de grupo está íntimamente ligado al de simetría y es por eso que antes debemos abordar este capítulo, fundamentalmente matemático, e intentar hacernos una visión general del funcionamiento de estos objetos.

Hay que decir primero que el origen de la teoría de grupos está en el intento de los matemáticos por resolver ecuaciones algebraicas de grados arbitrarios por medio de radicales, es decir, dando fórmulas a aplicar para sacar las raíces de la ecuación. Primero los árabes en la edad media y después los algebristas italianos en el siglo XVI sólo llegaron a obtener expresiones radicales para órdenes 2, 3 y 4.

No fue hasta los albores del siglo XIX cuando se resolvió el llamado problema de *la quinta insoluble* gracias al teorema del matemático noruego **Abel** en 1824, basado también en el trabajo del matemático italiano **Ruffini**, en el que demostraron que no se podían encontrar expresiones radicales en ecuaciones de grado mayor o igual a cinco (lo cual, lógicamente no negaba la existencia de esas soluciones, sino la forma de obtenerlas).

Hoy se sabe, no obstante, que todas estas aportaciones son parte de una teoría más general, debida al matemático francés **Galois**, el verdadero creador de la teoría de grupos. En su teoría no sólo se demuestra la imposibilidad de ecuaciones de grado mayor o igual que cinco, sino que además se da la razón por la cual las ecuaciones de grado menor que cinco se pudieron resolver por radicales, cosa que la teoría de Abel no hacía.

La trágica historia de Galois, muerto a los 20 años, es muy conocida entre los físicos teóricos y no le voy a dedicar demasiado espacio. Sólo dar un par de pinceladas y decir que resulta muy interesante por la personalidad del sujeto y los determinantes acontecimientos en los que se vio envuelto. Nacido en París en 1811, a pesar de sus indudables actitudes intelectuales, Galois fue rechazado en su examen de ingreso en la Escuela Politécnica y se matriculó en la Escuela Normal. Alentado no obstante por uno de sus profesores, dio vida a una de las teorías más influyentes de las matemáticas e intentó que muchos de los matemáticos de su época le

escucharan mandándoles sus trabajos. No tuvo éxito. Debido según unos a sus convicciones republicanas (llegó a estar encarcelado seis meses) y según otros a un desamor, fue retado a duelo el 29 de Mayo de 1832 y murió el día siguiente a consecuencia de una herida en el abdomen. Su trabajo sólo fue reconocido mucho después de su muerte.

La utilización del aparato de la teoría de grupos en la Mecánica Cuántica fue propuesta en la década de los años 30 del siglo pasado, casi simultáneamente, por **Wigner** y **Weyl**.

1.2. Definición y clases de grupos

Se llama **grupo** a cualquier conjunto G de transformaciones de simetría que cumple:

- 1) Existe una ley de composición interna, normalmente llamada multiplicación o suma:

$$G \times G \rightarrow G$$

$$a \quad b \rightsquigarrow ab \text{ ó } a + b$$

- 2) La ley es **asociativa**:

$$(ab)c = a(bc) \text{ ó } (a + b) + c = a + (b + c)$$

- 3) Existe un elemento **neutro** e :

$$ea = ae = e \text{ ó } e + a = a + e = a$$

a este elemento se le denomina **1** en la multiplicación o **0** en la suma.

- 4) Todo elemento a posee **inverso** a^{-1} (o $-a$ en la suma, en cuyo caso se suele llamar simétrico):

$$a^{-1}a = aa^{-1} = e \text{ ó } -a + a = a + (-a) = e$$

A veces los postulados 3) y 4) se sustituyen por otros más débiles pero equivalentes en donde sólo aparece la multiplicación (suma) por la izquierda.

Cuando un subconjunto H de G conserva las propiedades de grupo con la misma operación se denomina **subgrupo** de G . En todo grupo hay dos subgrupos, llamados impropios o triviales, que son él mismo y la identidad.

Si todos los elementos del grupo conmutan el grupo se denomina **conmutativo** o abeliano. Una forma de medir el grado de conmutatividad de un grupo es mediante la operación de *conjugación*:

$$g' \text{ es el conjugado de } g \Leftrightarrow \exists h \in G / g' = hgh^{-1} \text{ o bien } g'h = hg$$

lógicamente, si el grupo es conmutativo todos sus elementos coinciden con sus conjugados y sólo existirá una clase de equivalencia de conjugación.

Un subgrupo H de G se denomina **normal** o **invariante** o **autoconjugado** si sus conjugados con cualquier elemento de G permanecen en H (todo subgrupo de un grupo abeliano es normal). Si un grupo sólo tiene los subgrupos invariantes triviales se denomina **simple**. A los grupos triviales (la identidad y el mismo grupo) a veces se les denomina subgrupos **impropios**. Por tanto, un grupo será simple si no posee subgrupos normales propios. Diremos que un grupo es **semisimple** si no posee subgrupos normales abelianos propios.

El grupo se llamará **finito** si tiene un número finito de elementos. A este número se le llama orden del grupo y se denota como $|G|$. En caso contrario hablaremos de un grupo **infinito**.

Un ejemplo de grupo finito sería el grupo de permutaciones de 3 elementos, S_3 , perteneciente a los llamados **grupos simétricos** por coincidir con el conjunto de aplicaciones biyectivas que se pueden establecer, en este caso entre los tres elementos. Lógicamente, el orden aquí sería $|S_3| = 3! = 6$.

El grupo infinito más común es el conjunto de matrices invertibles de orden n sobre un cuerpo \mathbb{K} , que normalmente es el de los reales o los complejos, tomando como operación interna la multiplicación de matrices. Hay que tener en cuenta que el orden aquí no es el orden del grupo sino el de las matrices que lo representan. Este grupo se conoce con el nombre de **grupo general lineal de orden n** :

$$GL(n, \mathbb{K}) = (\{A = \{a_{ij}\} / \det A \neq 0, a_{ij} \in \mathbb{K}\}, \cdot)$$

Un grupo H es **homomorfo** a otro G si existe una correspondencia entre ambos que conserve la operación de grupo. Con esta condición, dos elementos del grupo inicial pueden ir al mismo del final pero la identidad se transformará en identidad en el otro grupo. Si este mapeo es biyectivo se denominará **isomorfismo** de grupos. Si el isomorfismo se realiza sobre el mismo grupo se llamará **automorfismo**.

1.3. Generadores

Para los grupos finitos se puede definir un subconjunto, denominado **sistema de generadores**, S , consistente en un conjunto de elementos del grupo tales que sus productos (o los productos de sus inversos) generan el grupo. El conjunto generado se denota de la siguiente forma:

$$\langle S \rangle = \{g_1 g_2 \cdots g_r / g_i \in S \text{ ó } g_i^{-1} \in S\}$$

Vamos a verlo con el conjunto de permutaciones de 3 elementos, que se sabe que tiene orden 6:

$$S_3 = \{[1, 2, 3], [2, 1, 3], [3, 2, 1], [1, 3, 2], [2, 3, 1], [3, 1, 2]\}$$

Los elementos del grupo se suelen denotar mejor como

$$S_3 = \{e, (12), (13), (23), (123), (132)\}$$

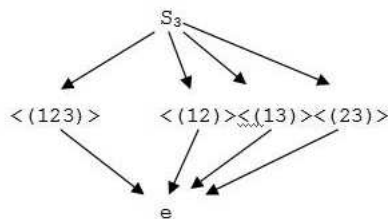


Figura 1.1: Grafo de Cayley para el grupo S_3

indicando las permutaciones de 1 o de 2 elementos. En general aquí vemos que es un grupo no abeliano, ya que:

$$(12)(13) = [2, 1, 3][3, 2, 1] = [3, 1, 2] = (132)$$

$$(13)(12) = [3, 2, 1][2, 1, 3] = [2, 3, 1] = (123)$$

en donde se ha usado la composición de permutaciones de la siguiente forma:

$$k = j \circ i = [j_1, j_2, j_3][i_1, i_2, i_3] = [j_{i_1}, j_{i_2}, j_{i_3}]$$

Se puede comprobar que las trasposiciones del primer elemento con el segundo y con el tercero generan todo el grupo:

$$\begin{aligned} S_3 = \langle (12), (13) \rangle &= \{(12), (12)^2, (13), (13)^2, (12)(13), [(12)(13)]^2, (13)(12), [(13)(12)]^2, \dots\} = \\ &= \{(12), e, (13), e, (132), (123), (123), (23)\} \end{aligned}$$

En general el grupo S_n se genera con $n - 1$ trasposiciones:

$$S_n = \{(12), (13), \dots, (1n)\}$$

Los grupos de permutaciones se pueden dividir en las permutaciones impares y las pares. En este caso, el grupo alternado de 3 elementos, A_3 , que es como se denominarían las permutaciones pares, cuyo orden es la mitad que el principal, sería de la forma:

$$A_3 = \langle (123) \rangle = \{(123), (123)^2, (123)^3, \dots\} = \{(123), (132), e\}$$

Una forma sencilla de representar las generaciones de un grupo finito es mediante los llamados **grafos de Cayley** (figura 1.1).

Como dato, sin entrar en detalles, decir que Galois asoció a cada polinomio un grupo de permutaciones de sus raíces. Abel había demostrado que el A_5 era un grupo simple y como consecuencia S_5 era no **resoluble**, es decir, no existía una serie de subgrupos invariantes contenidos consecuentemente (todo grupo abeliano es, obviamente, resoluble). Galois de hecho demostró que el primer grupo simple no abeliano tenía orden 60 (es decir, que el A_5 de Abel era el primero no resoluble).

1.4. Grupos de Lie

1.4.1. Definición y ejemplos

Para los grupos infinitos, podemos utilizar la estrategia de etiquetar sus elementos g_a , o bien, $g(a)$, entendiendo a como un conjunto de parámetros que viven en un espacio topológico. De esta forma, podremos hacer una correspondencia entre ese espacio y los elementos del

grupo, y muchas veces identificar ambos. Se asume que estos parámetros son *esenciales*, es decir, caracterizan completamente a cada elemento del grupo.

Dentro de los grupos infinitos, hay un conjunto importante, los denominados **grupos continuos**, que nos garantizan que si:

$$g(a)g(b) = g(c)$$

entonces c debe ser una función continua en los parámetros a y b .

A su vez, dentro de los grupos continuos hay un conjunto de grupos denominados **grupos de Lie**, en honor del matemático noruego **Sophus Lie** que los estudió a finales del siglo XIX, en donde se debe cumplir además que esa función de los parámetros sea analítica.

Como generalización de los grupos finitos, un grupo continuo con un número de parámetros finito a veces se denomina **grupo continuo finito** y el número de parámetros esenciales el orden del grupo.

No hay que confundir el orden del grupo de Lie con la dimensión del espacio donde viven sus parámetros. Por ejemplo, el grupo $GL(n, \mathbb{R})$ actúa sobre un espacio de dimensión n pero su orden es n^2 (el número de elementos de sus matrices), por tanto se puede decir que vive en el espacio \mathbb{R}^{n^2} . En el caso de que el cuerpo fuera el de los complejos, el orden del grupo sería $2n^2$. Este orden (a veces se le llama también dimensión, por abuso del lenguaje) se puede restringir si nos fijamos en los subgrupos. Por ejemplo, en el subgrupo de **matrices unitarias**:

$$U(n) = \{U \in GL(n, \mathbb{C}) / U^+ = U^{-1}\}$$

se tienen las n^2 condiciones:

$$U_{ji} = (U^{-1})_{ij}$$

lo que reduce el número de parámetros esenciales de nuevo a n^2 . Y si el grupo es especial, es decir, las matrices tienen determinante unidad:

$$SU(n) = \{U \in U(n) / \det U = 1\}$$

por la condición añadida se reduce el orden del grupo a $n^2 - 1$.

El grupo además será **compacto** si el dominio de variación de sus parámetros es cerrado y acotado. En este sentido, por ejemplo, el grupo de rotaciones es un grupo compacto (sus parámetros varían en el conjunto $[0, 2\pi]$) mientras que el grupo de traslaciones no es compacto.

Consideremos el grupo de matrices ortogonales, normalmente definido sobre el cuerpo real como:

$$O(n) = \{R \in GL(n, \mathbb{R}) / R^t = R^{-1}\}$$

este grupo, cuyo orden es $n(n-1)/2$, nos da las siguientes condiciones cuando se impone $R^t R = 1$:

$$R_{ij}R_{ik} = \delta_{jk}$$

utilizando el convenio de Einstein de suma sobre índices repetidos. Esto representa un conjunto de n^2 ecuaciones algebraicas, lo que implica que el dominio de los parámetros es cerrado. Además, es claro que $|R_{ij}| \leq 1$ (de hecho, $\sum_{ij} R_{ij}^2 = n$) luego el conjunto es acotado. Por tanto, los grupos ortogonales son compactos.

1.4.2. Álgebra de Lie

Sophus Lie mostró que las principales características de un grupo se pueden deducir de aquellos elementos que difieren infinitesimalmente de la identidad. De este modo a cada grupo de Lie podemos asociarle un álgebra de Lie, que captura totalmente la estructura local del grupo.

Para empezar decir que siempre podemos reparametrizar el grupo de forma que sus parámetros sean *normales*, es decir, que el origen de la variedad coincida con la identidad del grupo, $g(a = 0) = e$.

Si vamos más allá podemos incluso hacer la identificación ya mencionada de los elementos del grupo, $g(a)$, con la propia variedad, a . Se puede pensar así un grupo de Lie de orden r como el conjunto de transformaciones:

$$x'_i = f_i(x_1, \dots, x_n, a_1, \dots, a_r) \quad i = 1, 2, \dots, n$$

en donde n representa la dimensión del espacio sobre el que actúa y podemos reescribir por simplicidad como:

$$x' = f(x, a)$$

Estas transformaciones, lógicamente, deben cumplir las reglas de los grupos continuos. Por ejemplo, existirá un elemento inverso a^{-1} de forma que

$$x = f(x', a^{-1})$$

como podemos ver en el siguiente ejemplo de un grupo de orden 2 definido por la transformación:

$$x' = a_1 x + a_2 \quad a_1 \neq 0, a_i \in \mathbb{R}$$

cuyos elementos podemos denotar como (a_1, a_2) y cuyo producto podemos calcular como

$$(b_1, b_2)(a_1, a_2) = (b_1 a_1, b_1 a_2 + b_2)$$

siendo la identidad el elemento $(1, 0)$ y el elemento inverso:

$$(a_1, a_2)^{-1} = (1/a_1, -a_2/a_1)$$

como se puede comprobar despejando la x .

Como se ha dicho, si utilizamos parámetros normales se debe cumplir que

$$f(x, 0) = x$$

Si hacemos una transformación infinitesimal de coordenadas inducida por un cambio de parámetros del grupo obtenemos:

$$dx = \frac{\partial f(x, 0)}{\partial a} da \equiv u(x) da$$

o de forma más general

$$dx_i = \left. \frac{\partial f_i(x, a)}{\partial a_\nu} \right|_{a=0} da_\nu \equiv u_{i\nu}(x) da_\nu \quad i = 1, \dots, n$$

en donde el índice griego recorre la variación a lo largo de todos los parámetros del grupo hasta r .

Si aplicamos esto a cualquier función F de las coordenadas obtenemos

$$dF = \frac{\partial F}{\partial x_i} dx_i = da_\nu \left\{ \frac{\partial f_i(x, 0)}{\partial a_\nu} \frac{\partial}{\partial x_i} \right\} F$$

en los grupos de Lie al término entre llaves es lo que se suele llamar **generadores** del grupo, y habrá uno por cada parámetro esencial, es decir, se trata de un operador vectorial r -dimensional:

$$X_\nu \equiv u_{i\nu} \frac{\partial}{\partial x_i} \quad \nu = 1, 2, \dots, r$$

donde la suma recorre las dimensiones de la variedad hasta n .

El hecho de llamarlos generadores queda claro en la expresión:

$$g = e + da_\nu X_\nu$$

que representará el comportamiento del grupo en torno a la identidad en el llamado **espacio tangente** a la variedad diferenciable que definen sus transformaciones.

Este espacio tangente es el llamado **álgebra de Lie** del grupo y se trata de un espacio vectorial cuya dimensión es el orden del grupo por definición.

Lógicamente los generadores dependerán de la elección de los parámetros del grupo.

Vamos a indagar en las propiedades de este álgebra. Si nos preguntamos ahora por los elementos conjugados de g' respecto de un elemento dado g tendrán la forma:

$$gg'g^{-1} = e + da_\nu g X_\nu g^{-1}$$

que corresponderían a un subgrupo que tuviera como generadores:

$$X'_\nu = g X_\nu g^{-1} \cong (e + da_\mu X_\mu) X_\nu (e - da_\mu X_\mu) = X_\nu + da_\mu (X_\mu X_\nu - X_\nu X_\mu)$$

pero el primer miembro, al ser inducido por una transformación lineal de los parámetros, será una combinación lineal de generadores, y por independencia lineal también se puede afirmar que lo es el conmutador:

$$[X_\mu, X_\nu] = c_{\mu\nu\lambda} X_\lambda$$

donde $c_{\mu\nu\lambda}$ son números complejos llamados **constantes de estructura**.

Debido a la independencia lineal se puede afirmar que las constantes de estructura cumplen una ley de anticonmutatividad:

$$[X_\nu, X_\mu] = -[X_\mu, X_\nu] \Rightarrow c_{\mu\nu\lambda} = -c_{\nu\mu\lambda}$$

y asimismo se cumplirá la **identidad de Jacobi**:

$$[[X_\mu, X_\nu], X_\lambda] + [[X_\lambda, X_\mu], X_\nu] + [[X_\nu, X_\lambda], X_\mu] = 0$$

es decir

$$c_{\mu\nu\delta} c_{\delta\lambda\sigma} + c_{\lambda\mu\delta} c_{\delta\nu\sigma} + c_{\nu\lambda\delta} c_{\delta\mu\sigma} = 0$$

De esta forma, vemos cómo el espacio tangente definido por los generadores del grupo es un álgebra de Lie, pero esta definición es ampliable para cualquier espacio vectorial \mathcal{L} que verifique las siguientes propiedades:

1.- Existe una ley de composición llamada *conmutador* tal que

$$[L_1, L_2] = -[L_2, L_1] \in \mathcal{L}$$

lineal en ambos argumentos.

2.- Se cumple la *identidad de Jacobi* para cualesquiera tres elementos:

$$\sum_{\text{cíclica}} [[L_1, L_2], L_3] = 0$$

Si los conmutadores se anulan hablaremos de un álgebra **abeliana**. Si \mathcal{H} es un subespacio lineal de \mathcal{L} que es también álgebra de Lie, diremos que es **invariante** si para todo h en \mathcal{H} , l en \mathcal{L} , se cumple que $[h, l]$ sigue perteneciendo a \mathcal{H} . Diremos que es **simple** si no tiene subálgebras invariantes propias y **semisimple** si no tiene subálgebras invariantes propias no abelianas.

Ejemplo Sea el grupo de orden 2 sobre un espacio de dimensión 1 siguiente:

$$x' = \alpha_1 x + \alpha_2$$

Primero reparametrizamos el grupo para que el elemento identidad sea el cero (parámetros normales):

$$x' = (1 + a_1)x + a_2 \quad a = (a_1, a_2)$$

recordando nuestra notación:

$$\begin{aligned}
 f(x, a_1, a_2) &= (1 + a_1)x + a_2 \\
 f(x, 0, 0) &= x \\
 dx &= \left. \frac{\partial f}{\partial a_1} \right|_0 da_1 + \left. \frac{\partial f}{\partial a_2} \right|_0 da_2 = x da_1 + da_2
 \end{aligned}$$

Por tanto los generadores son

$$X_1 = x \frac{\partial}{\partial x} \quad X_2 = \frac{\partial}{\partial x}$$

Veamos los que vale el conmutador

$$[X_1, X_2] = \left[x \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial x} \right] = x \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial^2}{\partial x^2} = -X_2$$

y por tanto las constantes de estructura del grupo son:

$$c_{121} = 0 \quad c_{122} = -1$$

1.5. Representaciones

1.5.1. Representaciones lineales

Una representación lineal $D(g)$ de un grupo G es un homomorfismo de G sobre un grupo de operadores lineales actuando sobre un espacio vectorial V que recibe el nombre de espacio **soprote** de la representación y nos definirá la dimensión de la representación.

Si los operadores lineales son matrices hablaremos de una representación **matricial**.

Si la representación es un isomorfismo hablaremos de representación **fiel** (o exacta), por ejemplo, todos los grupos de matrices son representaciones fieles de ellos mismos. La representación **trivial** en la que $D(g) = 1$ para cualquier elemento del grupo no es fiel (no es isomorfismo).

Si la representación consiste en matrices unitarias $D(g)^+ = D(g)^{-1}$ se hablará de representación **unitaria**. Dos representaciones son equivalentes si se transforman entre sí por medio de una **transformación de similitud** (o semejanza):

$$D_2(g) = S D_1(g) S^{-1}$$

que constituye una relación de equivalencia. El operador lineal S deja invariante el álgebra en el sistema transformado:

$$\psi = D_1(g)\phi \left\{ \begin{array}{l} \phi' = S\phi \\ \psi' = S\psi \end{array} \right\} \psi' = S D_1(g)\phi = S D_1(g) S^{-1} \phi' \equiv D_2(g)\phi'$$

Una transformación unitaria es un caso particular de transformación de similitud. De hecho, un importante teorema demuestra que cualquier representación de un grupo finito o matricial

de un grupo de Lie se transforma semejantemente en una unitaria, por tanto cuando nos restringimos a las transformaciones unitarias no perderemos generalidad.

Si G es un grupo de matrices, se denomina representación **fundamental** a aquella definida por la acción natural de las matrices sobre el espacio vectorial, es decir $D(g)v = gv$. Por ejemplo, el grupo de rotaciones $SO(2)$ tiene una representación fundamental en el espacio de dos dimensiones consistente en las conocidas matrices de rotación respecto a XY :

$$D(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sen\alpha \\ -\sen\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}$$

pero también tiene otra de dimensión 3 sobre el espacio tridimensional:

$$D(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sen\alpha & 0 \\ -\sen\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

o incluso una no matricial sobre el cuerpo complejo:

$$D(\alpha) = e^{i\alpha}$$

1.5.2. Representaciones irreducibles

Sea una representación $D(g)$ de un grupo en un espacio V_n . Si existe un subespacio V_k ($k < n$) que sea **invariante** (o estable) respecto a todas las transformaciones $D(g)$, es decir:

$$\forall x \in V_k \Rightarrow D(g)x \in V_k$$

entonces la representación se denomina **parcialmente reducible**, y se puede encontrar una base de V_n en la que la representación tenga la forma:

$$\left(\begin{array}{cccc|cccc} D_{11} & D_{12} & \dots & D_{1k} & D_{1k+1} & \dots & D_{1n} & \\ D_{21} & D_{22} & \dots & D_{2k} & D_{2k+1} & \dots & D_{2n} & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \\ \hline D_{k1} & D_{k2} & \dots & D_{kk} & D_{kk+1} & \dots & D_{kn} & \\ \hline 0 & 0 & \dots & 0 & D_{k+1k+1} & \dots & D_{k+1n} & \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots & \dots & \dots & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \\ 0 & 0 & \dots & 0 & D_{nk+1} & \dots & D_{nn} & \end{array} \right) \equiv \begin{pmatrix} D_1(g) & \chi(g) \\ 0 & D_2(g) \end{pmatrix}$$

simplemente eligiendo los primeros k vectores columna como base de V_k y completando hasta lograr una base de V_n .

Cuando la representación no es reducible se denomina **irreducible**. No obstante en el caso unitario también se puede encontrar una transformación de similaridad que nos dé una representación **totalmente irreducible**, de la forma:

$$\begin{pmatrix} D_1(g) & 0 \\ 0 & D_2(g) \end{pmatrix}$$

o como se conoce normalmente, diagonal por bloques. Esto se puede hacer siempre que la representación reducible sea unitaria. Basta con trabajar también con el subespacio suplementario o complemento ortogonal V_{n-k} :

$$\left. \begin{array}{l} x \in V_k \\ y \in V_{n-k} \end{array} \right\} 0 = (D(g)x, y) = (x, D^+(g)y) = (x, D^{-1}(g)y) = (x, D(g^{-1})y) \Rightarrow D(g^{-1})y \in V_{n-k}$$

y como el inverso también puede recorrer todo el grupo, en este caso V_{n-k} también es invariante y se podrá encontrar la forma indicada.

En el caso de los grupos compactos toda representación reducible es totalmente reducible y se dice que se puede descomponer en **suma directa** de representaciones:

$$D = D_1 \oplus D_2 \oplus \dots$$

Un resultado que se utilizará mucho es el llamado **lema de Schur**, que afirma que *una matriz que conmuta con todas las matrices de una representación irreducible es múltiplo de la identidad*.

Un conjunto de números que nos proporcionan información sobre cada una de las clases de equivalencia de las representaciones son los **caracteres de una representación**, $\chi(g)$, que se definen como las trazas de las matrices de la representación. Todas las representaciones equivalentes tienen el mismo conjunto de caracteres. Esto es obviamente consecuencia de la ciclicidad de la traza que no se ve afectada por transformaciones de similitud.

Como ejemplo estudiemos la paridad P en 2D o reflexión respecto a la identidad. Esta operación tiene como generadores e y p , siendo su representación fundamental:

$$D(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D(p) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Si escogemos como matriz de similitud una rotación de 45°:

$$S = \begin{pmatrix} \cos 45 & \sen 45 \\ -\sen 45 & \cos 45 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

obtenemos una representación equivalente

$$D'(e) = S^{-1}D(e)S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$D'(p) = S^{-1}D(p)S = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

vemos que las trazas son las mismas, representan los caracteres de la representación. Además la representación se puede poner como suma directa de dos representaciones actuando en dos subespacios, de los cuales en este caso sólo interesa el segundo, que corresponde a la paridad par o impar dependiendo únicamente de un signo aplicado a la segunda coordenada.

1.5.3. Multipletes

Los vectores base de una representación unitaria irreducible correspondiente a una transformación de simetría nos definen una serie de estados mecánicos denominados **multipletes**.

En efecto, si consideramos una función dinámica, que normalmente como veremos será el llamado hamiltoniano, invariante bajo una transformación unitaria $U(a)$ se cumple, para un autoestado ϕ_n del hamiltoniano:

$$\begin{aligned} H\phi_n &= E_n\phi_n \\ UH\phi_n &= UHU^{-1}U\phi_n = E_nU\phi_n \end{aligned}$$

en donde hemos hecho la manipulación habitual de introducir la identidad. De esta forma se puede decir que bajo la transformación:

$$\left. \begin{aligned} H' &= UHU^{-1} \\ \phi'_n &= U\phi_n \end{aligned} \right\}$$

y dado que hemos supuesto el hamiltoniano invariante bajo la transformación U ($H' = H$), se obtiene el resultado:

$$H'\phi'_n = H\phi'_n = E_n\phi'_n$$

Lo que representa un conjunto de estados ϕ'_n para cada parámetro del grupo a que tienen la misma energía. En este caso se dice que los estados están degenerados, y la representación correspondiente será forzosamente irreducible de modo que no se puedan mezclar estados con energías distintas. Este es uno de los motivos más importantes para descomponer una representación en sus partes irreducibles.

Capítulo 2

PRINCIPIO DE HAMILTON. MECÁNICA

2.1. Introducción

En los siglos siguientes al establecimiento de la Mecánica newtoniana (XVIII y XIX), muchos fueron los autores que dedicaron su tiempo a intentar fundamentarla teóricamente, entre ellos cabe destacar a D'Alembert, Euler, Maupertuis, Laplace, Lagrange, Legendre, Gauss, Liouville, Poisson, Jacobi y Hamilton. Vamos a entender ahora alguno de estos pilares matemáticos en los que se fundamenta la moderna teoría de campos, empezando por el llamado *principio de acción estacionaria o de Hamilton*.

2.2. Coordenadas generalizadas

Las coordenadas clásicas de un sistema físico en un espacio N-dimensional son los vectores de posición de cada uno de sus puntos materiales, r_1, r_2, \dots, r_N , las cuales normalmente están sujetas a algunas ligaduras del tipo:

$$f(r_1, r_2, \dots, r_N, t) = 0 \quad (2.1)$$

Esta clase de ligaduras o enlaces se denominan *de posición u holónomas*, y son las que estudiaremos con detalle en los siguientes puntos. Los sistemas con esta clase de enlaces se denominan *sistemas holónomos*. **No existe una manera general de abordar los problemas no holónomos** (habría que utilizar en este caso la técnica de los multiplicadores de Lagrange y tener en cuenta las ligaduras concretas). No obstante, a efectos de deducciones de leyes fundamentales, no se pierde generalidad al considerar que todos los sistemas son holónomos, dado que siempre se consideran sistemas de partículas y los efectos no holónomos son tópicos de los sistemas macroscópicos.

Si un sistema está restringido a un conjunto de k ligaduras como la anterior en realidad sus grados de libertad efectivos no coincidirán con los físicos, y se lo podrá estudiar con menos parámetros, digamos n:

$$N \text{ partículas libres} \longrightarrow 3N \text{ grados de libertad}$$

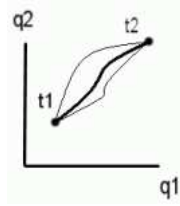


Figura 2.1: Trayectorias en el espacio de configuraciones

N partículas con k ligaduras $\rightarrow n \equiv 3N - k$ grados de libertad

Se definen entonces unas nuevas coordenadas para el sistema, que no tienen que tener correspondencia con el espacio físico real, llamadas *coordenadas generalizadas*, q_1, q_2, \dots, q_n , que forman el llamado *espacio de configuraciones*. En general para estudiar la trayectoria de un sistema físico necesitamos también conocer las llamadas *velocidades generalizadas*, $\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_n$, que junto con las coordenadas anteriores constituyen un conjunto de $2n$ variables que fue designado por Gibbs con el nombre de *espacio de las fases*. En este diagrama se representan las coordenadas en el eje x y las velocidades o momentos en el eje y .

2.3. Integral de acción

Se pueden obtener las ecuaciones del movimiento de un sistema a partir de un principio que considere el movimiento entero entre los tiempos t_1 y t_2 y pequeñas variaciones virtuales del movimiento respecto al real. En un espacio de configuraciones de 2 dimensiones se vería como en la figura 2.1.

Normalmente se usan q y \dot{q} para significar los dos conjuntos de coordenadas y velocidades respectivamente.

El **principio de Hamilton** trata de ver cuál de todas las trayectorias $q(t)$ es la real a partir de extremar la siguiente función integral:

$$S \equiv \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt \quad (2.2)$$

llamada *integral de acción*. S es una funcional que asigna un número a cada función $q(t)$ definida en el intervalo (t_1, t_2) . A la función L se la conoce con el nombre de *lagrangiana del sistema*, y es la función que debemos encontrar. La variable t juega el valor de un parámetro ya que se supone que L **no depende explícitamente del tiempo**.

2.4. Ecuaciones de Euler-Lagrange

Sea $q(t)$ la trayectoria real del sistema. Entonces las trayectorias virtuales serán de la forma:

$$q(t) + \delta q(t)$$

cumpliéndose en los extremos de los intervalos que todas las funciones deben tomar los mismos valores:

$$\delta q(t_1) = \delta q(t_2) = 0 \quad (2.3)$$

La variación de la acción se puede poner como:

$$S(q + \delta q) - S(q) = \delta S + O(\delta q^2) = \int_{t_1}^{t_2} \delta L dt$$

que será igual a cero si utilizamos la condición de extremal que sugiere el principio propuesto para la integral de acción:

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \right) dt = 0$$

integrando el segundo término por partes:

$$\delta \dot{q} = \frac{d}{dt}(\delta q)$$

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \frac{d}{dt}(\delta q) dt = \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q dt$$

por tanto:

$$\delta S = \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} \left[\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \right] \delta q dt = 0$$

en donde el primer sumando se anula dada la condición de coincidencia en los extremos (2.3).

Como la integral debe anularse para todo valor de δq , llegamos a las *ecuaciones de Euler-Lagrange*, que deberá cumplir nuestra función lagrangiana:

$$\boxed{\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) = 0} \quad (2.4)$$

que en realidad son n ecuaciones diferenciales que establecen la relación entre las aceleraciones, las velocidades y las coordenadas, es decir, son las *ecuaciones del movimiento* del sistema.

2.5. Elección de la lagrangiana

Para encontrar las ecuaciones del movimiento habrá que elegir una función lagrangiana adecuada. El llamado *programa de Einstein* sugiere que se construya ésta a partir de las simetrías del sistema y que las cantidades conservadas y las leyes del movimiento surjan como consecuencia de éstas.

Debe señalarse que **hay infinitas lagrangianas que definen las mismas ecuaciones del movimiento**. En efecto, cualquier otra lagrangiana del tipo:

$$L'(q, \dot{q}, t) = L(q, \dot{q}, t) + \frac{dF(q, \dot{q}, t)}{dt} \quad (2.5)$$

dará lugar a una acción que diferirá de la original en un término constante que desaparecerá al hacer la variación:

$$S' = \int_{t_1}^{t_2} L' dt = \int_{t_1}^{t_2} L dt + F(q_2, \dot{q}_2, t_2) - F(q_1, \dot{q}_1, t_1)$$

En general pues haremos consideraciones de simetría. Para, por ejemplo, la lagrangiana de una partícula libre se supone que *el tiempo es homogéneo y que el espacio es homogéneo e isotrópico*. De esta forma la lagrangiana no podrá depender explícitamente de t (homogeneidad del tiempo), pero tampoco podrá depender de \vec{r} (homogeneidad del espacio) ni de la dirección de \vec{v} (isotropía del espacio). Será por tanto una función proporcional al cuadrado de la velocidad. Por razones históricas se suele llamar T y expresar como:

$$L = T = \frac{1}{2}mv^2 \quad (2.6)$$

Cabe hacer notar que la multiplicación de la lagrangiana por una constante arbitraria no afecta a las ecuaciones del movimiento sino sólo a una arbitrariedad natural en la elección de las unidades de medida, en este caso de la masa. Pero los cocientes de las masas de las distintas partículas, que son los únicos que tienen sentido físico real, permanecen invariables.

Esto ocurre así incluso para un sistema de partículas, en donde *la propiedad de aditividad de la lagrangiana* consiste en admitir que las partes de un sistema que no interactúan con otras no pueden contener magnitudes pertenecientes a esas otras. Así para dos partículas tendríamos:

$$T = \frac{1}{2}m_1v_1^2 + \frac{1}{2}m_2v_2^2$$

Las consideraciones de simetría las hemos realizado en función de las coordenadas físicas. En función de las coordenadas generalizadas, dado que para una partícula:

$$v = \frac{dr}{dt} = \frac{\partial r}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial r}{\partial t}$$

$$v^2 = \left(\frac{\partial r}{\partial t} \right)^2 + 2 \frac{\partial r}{\partial t} \frac{\partial r}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial r}{\partial q_i} \frac{\partial r}{\partial q_j} \dot{q}_i \dot{q}_j$$

en donde se usa el *convenio de Einstein* de suma sobre índices repetidos. Definiendo:

$$M_0 = \frac{1}{2}m \left(\frac{\partial r}{\partial t} \right)^2$$

$$M_i = m \frac{\partial r}{\partial t} \frac{\partial r}{\partial q_i}$$

$$M_{ij} = m \frac{\partial r}{\partial q_i} \frac{\partial r}{\partial q_j}$$

se puede poner la lagrangiana libre como:

$$\boxed{L = T = M_0 + M_i \dot{q}_i + \frac{1}{2} M_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j = T_0 + T_1 + T_2} \quad (2.7)$$

es decir, como suma de tres funciones, independiente, lineal y cuadrática respectivamente en relación con las velocidades generalizadas.

Cuando las ecuaciones de transformación no dependen explícitamente del tiempo (*ligaduras esclerónomas*), T será siempre una forma cuadrática homogénea de las velocidades generalizadas.

En el caso de un sistema de partículas que interactúen entre sí se le suele añadir a la lagrangiana otra función que caracteriza las interacciones en la forma:

$$\boxed{L = T(q, \dot{q}, t) - U(q, \dot{q}, t)} \quad (2.8)$$

veremos en breve la interpretación de estas cantidades como energías cinética y potencial respectivamente.

2.6. Teoremas de conservación

Las ecuaciones de Euler-Lagrange forman un sistema de n ecuaciones diferenciales de segundo orden con n funciones desconocidas $q_i(t)$, por tanto, la solución general contendrá $2n$ constantes arbitrarias que se determinarán por las condiciones iniciales del sistema (teorema de Cauchy-Kowalevski, apéndice ??). Como se supone que las ecuaciones del movimiento no dependen explícitamente del tiempo, el origen de éste es arbitrario. Por tanto, tendremos $2n - 1$ constantes arbitrarias, función de las coordenadas y las velocidades generalizadas. A estas constantes se las denomina *integrales del movimiento o cantidades conservadas*. Entre estas habrá que elegir las más relevantes atendiendo a su sentido físico, es decir, a las simetrías con las que están relacionadas.

En realidad, la mayoría de los sistemas no son integrables totalmente, pero siempre se podrán sacar conclusiones físicas importantes por consideraciones de simetría.

Cuando la lagrangiana de un sistema no dependa de una coordenada dada q_i la ecuación de Euler-Lagrange correspondiente quedará:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = 0$$

a la cantidad:

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad (2.9)$$

se la denomina *cantidad de movimiento canónica o generalizada* (no tiene por qué tener las dimensiones de una cantidad de movimiento clásica). Por tanto, **cuando las ecuaciones del sistema no dependen de una coordenada, su cantidad de movimiento se conserva:**

$$\boxed{L \neq f(q_i) \Rightarrow p_i = cte} \quad (2.10)$$

a la coordenada aludida q_i se la suele denominar **coordenada cíclica o ignorable**.

Capítulo 3

ECUACIONES DE HAMILTON

3.1. Introducción

Después de abordar la teoría de Lagrange sobre los sistemas mecánicos y el principio de Hamilton del que se deducen las ecuaciones del movimiento en el espacio de configuración o de coordenadas, vamos a ver ahora una formulación ligeramente diferente para conseguir las ecuaciones del movimiento de un sistema físico descritas en el *espacio de fases*, es decir, de coordenadas y velocidades.

En el fondo se trata de formulaciones equivalentes, pero el formalismo de Hamilton nos dará potentes herramientas que podremos exportar más allá de la Mecánica Clásica, como veremos en los temas dedicados a la Mecánica Cuántica, por ejemplo.

3.2. Ecuaciones de Hamilton

Las ecuaciones de Euler-Lagrange son n ecuaciones de 2º orden cuyas soluciones, las n funciones $q_i(t)$, vienen determinadas por $2n$ valores iniciales correspondientes a las coordenadas y velocidades iniciales. El enfoque de Hamilton será ahora conseguir $2n$ ecuaciones diferenciales de primer orden con esas mismas $2n$ condiciones iniciales. Ahora las soluciones, además de las $q_i(t)$, serán otras n variables independientes, las cantidades de movimiento generalizadas definidas por:

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$$

Esto por tanto definirá un nuevo marco de descripción en el llamado *espacio de fases* (q, p) frente a la anterior descripción (q, \dot{q}) . El paso de una descripción a otra viene definido por la llamada *transformación de Legendre* que explicamos a continuación.

Vamos a trabajar por claridad con solo un par de variables en las funciones. Se trata de, dada una función en unas variables, pasar a otra transformada de forma que las primeras derivadas sean la inversa una de la otra, es decir:

$$f(x_1, x_2) \rightarrow g(v_1, v_2)$$

de forma que $v_i = \frac{\partial f}{\partial x_i} \Rightarrow x_i = \frac{\partial g}{\partial v_i}$

Esto se consigue por ejemplo si ensayamos para la función g la forma:

$$g = x_i v_i - f$$

de este modo

$$\begin{aligned} dg &= \frac{\partial g}{\partial v_i} dv_i = x_i dv_i + v_i dx_i - df = \\ &= x_i dv_i + v_i dx_i - \frac{\partial f}{\partial x_i} dx_i = \\ &= x_i dv_i + v_i dx_i - v_i dx_i = x_i dv_i \\ &\Rightarrow x_i = \frac{\partial g}{\partial v_i} \end{aligned}$$

Así, en el caso de que las funciones dependan de otras variables que no formen parte de la transformación:

$$f(x_i, w_i) \quad g(v_i, w_i)$$

se tendrá

$$\begin{aligned} dg &= x_i dv_i + \cancel{v_i dx_i} - \frac{\partial f}{\partial x_i} \cancel{dx_i} - \frac{\partial f}{\partial w_i} dw_i = \\ &= x_i dv_i - \frac{\partial f}{\partial w_i} dw_i \\ &\Rightarrow \frac{\partial g}{\partial w_i} = - \frac{\partial f}{\partial w_i} \end{aligned}$$

Trasladando esto a nuestro problema de Mecánica tenemos que buscar una nueva función:

$$L(q, \dot{q}, t) \rightarrow H(q, p, t)$$

de forma que $p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \Rightarrow \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}$

para ello se define la *hamiltoniana* con la forma:

$$H = p\dot{q} - L$$

y así

$$\begin{aligned}
 dH &= \frac{\partial H}{\partial q} dq + \frac{\partial H}{\partial p} dp + \frac{\partial H}{\partial t} dt = \\
 &= \dot{q} dp + p d\dot{q} - dL = \\
 &= \dot{q} dp + p d\dot{q} - \left(\frac{\partial L}{\partial q} dq + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} d\dot{q} + \frac{\partial L}{\partial t} dt \right)
 \end{aligned}$$

lo cual nos lleva a

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial H}{\partial p} &= \dot{q} \\
 \frac{\partial H}{\partial q} &= -\frac{\partial L}{\partial q} = -\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) = -\dot{p} \\
 \frac{\partial H}{\partial t} &= -\frac{\partial L}{\partial t}
 \end{aligned}$$

en donde se han aplicado las ecuaciones de Euler-Lagrange en la segunda identidad.

Hemos llegado pues a las ecuaciones que buscábamos. A partir de una nueva función definida en el espacio de fases, la hamiltoniana del sistema:

$$\boxed{H(q, p, t) \equiv \dot{q}_i p_i - L(q, \dot{q}, t)}$$

llegamos a un sistema de $2n$ ecuaciones del movimiento de primer orden equivalentes a las de Euler-Lagrange, las ecuaciones canónicas de Hamilton:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Euler - Lagrange} \\ n \text{ ecs. } 2^\circ \text{ orden} \\ \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0 \end{array} \right\} \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{Ecs. Hamilton} \\ 2n \text{ ecs. } 1^\circ \text{ orden} \\ \\ \dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{array} \right.$$

3.3. Transformaciones canónicas

Para resolver problemas en Mecánica es crucial elegir las coordenadas generalizadas más simétricas según el problema de que se trate de modo que todas o la mayor parte de ellas sean cíclicas. De este modo, de cada coordenada cíclica saldrá una ecuación de integración inmediata:

$$\begin{aligned}
 \dot{p}_i &= -\frac{\partial H}{\partial q_i} = 0 \Rightarrow p_i = \alpha_i \\
 \dot{q}_i &= \frac{\partial H}{\partial p_i} = f_i(t) \Rightarrow q_i = \int f_i dt + \beta_i
 \end{aligned}$$

que como vemos será de inmediata integración si la hamiltoniana no depende del tiempo. Cada coordenada cíclica dependerá de dos constantes de integración (α_i, β_i) . Si todas son cíclicas el problema por supuesto depende de las $2n$ condiciones.

Es por ello crucial encontrar una transformación de coordenadas que nos lleve a una descripción máximamente simétrica, y en el formalismo de Hamilton habrá que incluir también los momentos, por medio de las siguientes transformaciones:

$$\begin{aligned} q_i &\rightarrow Q_i(q_i, p_i, t) \\ p_i &\rightarrow P_i(q_i, p_i, t) \end{aligned}$$

Pero además, en este formalismo tan solo nos interesarán las nuevas coordenadas que están relacionadas por las ecuaciones de Hamilton, llamadas *coordenadas canónicas*, y por tanto las *transformaciones canónicas* exigirán que exista una nueva función:

$$H(q_i, p_i, t) \rightarrow K(q_i, p_i, t)$$

que actúe como hamiltoniana del nuevo marco, es decir, que se cumpla:

$$\begin{aligned} \dot{Q}_i &= \frac{\partial K}{\partial P_i} \\ \dot{P}_i &= -\frac{\partial K}{\partial Q_i} \end{aligned}$$

Por supuesto para que se cumplan las ecuaciones del movimiento es necesario que se siga cumpliendo el principio de Hamilton tanto en las nuevas coordenadas como en las antiguas, es decir:

$$\begin{aligned} \delta \int (p_i \dot{q}_i - H(q, p, t)) dt &= 0 \\ \delta \int (P_i \dot{Q}_i - K(q, p, t)) dt &= 0 \end{aligned}$$

o, dicho de otro modo, la diferencia entre los dos integrandos debe ser una diferencial exacta:

$$(p_i \dot{q}_i - H) - (P_i \dot{Q}_i - K) = \frac{dF}{dt}$$

A la función F se la conoce como *función generatriz* de la transformación porque nos hará de puente entre las antiguas variables y las nuevas.

3.4. Función generatriz. Transformación identidad.

Como las ecuaciones de transformación son $2n$ relaciones entre las $4n$ variables, en realidad sólo $2n$ variables son independientes, por lo que se puede elegir la forma funcional de la función generatriz de cuatro maneras distintas según las circunstancias del problema:

$$F_1(q_i, Q_i, t) \quad F_2(q_i, P_i, t) \quad F_3(p_i, Q_i, t) \quad F_4(p_i, P_i, t)$$

En el primer caso se tiene:

$$\frac{dF_1}{dt} = \frac{\partial F_1}{\partial t} + \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \dot{Q}_i$$

y sustituyéndolo en la diferencia de hamiltonianas y teniendo en cuenta que todas las $2n$ variables elegidas q_i y Q_i son independientes se llega a:

$$p_i \dot{q}_i - H - P_i \dot{Q}_i + K = \frac{\partial F_1}{\partial t} + \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \dot{Q}_i$$

$$\left\{ \begin{array}{l} p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i} \\ P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \\ K = H + \frac{\partial F_1}{\partial t} \end{array} \right.$$

Para los siguientes casos hay que seguir utilizando F_1 y por medio de transformaciones de Legendre se llega a los siguientes conjuntos de ecuaciones:

$$F_1(q_i, Q_i, t) = F_2(q_i, P_i, t) - Q_i P_i \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} \\ Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \\ K = H + \frac{\partial F_2}{\partial t} \end{array} \right.$$

$$F_1(q_i, Q_i, t) = F_3(p_i, Q_i, t) + q_i p_i \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} q_i = -\frac{\partial F_3}{\partial p_i} \\ P_i = -\frac{\partial F_3}{\partial Q_i} \\ K = H + \frac{\partial F_3}{\partial t} \end{array} \right.$$

$$F_1(q_i, Q_i, t) = F_4(p_i, P_i, t) + q_i p_i - Q_i P_i \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} q_i = -\frac{\partial F_4}{\partial p_i} \\ Q_i = \frac{\partial F_4}{\partial p_i} \\ K = H + \frac{\partial F_4}{\partial t} \end{array} \right.$$

Por ejemplo, si ensayamos una función de la forma

$$F_2(q_i, P_i) = q_i P_i$$

las ecuaciones de transformación serán:

$$\begin{cases} p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} = P_i \\ Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = q_i \\ K = H \end{cases}$$

en este caso F_2 genera la *transformación identidad*.

3.5. Corchetes de Poisson

Vamos a estudiar uno de los más importantes de los llamados *invariantes canónicos*, es decir, aquellas expresiones que conservan la forma bajo transformaciones canónicas. Si consideramos las dos funciones:

$$u = u(q_i, p_i) \quad v = v(q_i, p_i)$$

se puede definir el llamado *corchete de Poisson* de las funciones u y v con respecto a las variables q y p como:

$$[u, v]_{q,p} \equiv \frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial v}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i} \frac{\partial v}{\partial q_i}$$

expresión bilineal antisimétrica de estructura simpléctica.

Lógicamente si u y v se eligen como las propias variables canónicas se tiene:

$$\begin{aligned} [q_j, q_k] &= [p_j, p_k] = 0 \\ [q_j, p_k] &= -[p_k, q_j] = \delta_{jk} \end{aligned}$$

a estos últimos corchetes se los denomina *fundamentales* y no se pone subíndice porque valen para todo sistema de variables canónicas. Son por tanto invariantes canónicos.

Manipulando ligeramente los corchetes de partida haciendo la variación sobre otras variables canónicas se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial v}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i} \frac{\partial v}{\partial q_i} &= \frac{\partial u}{\partial q_i} \left(\frac{\partial v}{\partial Q_j} \frac{\partial Q_j}{\partial p_i} + \frac{\partial v}{\partial P_j} \frac{\partial P_j}{\partial p_i} \right) - \frac{\partial u}{\partial p_i} \left(\frac{\partial v}{\partial Q_j} \frac{\partial Q_j}{\partial q_i} + \frac{\partial v}{\partial P_j} \frac{\partial P_j}{\partial q_i} \right) = \\ &= \frac{\partial v}{\partial Q_j} \left(\frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial Q_j}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i} \frac{\partial Q_j}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial v}{\partial P_j} \left(\frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial P_j}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i} \frac{\partial P_j}{\partial q_i} \right) \end{aligned}$$

o, de forma más compacta:

$$[u, v]_{q,p} = \frac{\partial v}{\partial Q_j} [u, Q_j]_{q,p} + \frac{\partial v}{\partial P_j} [u, P_j]_{q,p}$$

Pero por otra parte se tiene, aplicando la misma identidad anterior, que

$$\begin{aligned} [u, Q_j] &= -[Q_j, u] = -\frac{\partial u}{\partial Q_k} [Q_j, Q_k] - \frac{\partial u}{\partial P_k} [Q_j, P_k] = \\ &= -\frac{\partial u}{\partial P_k} \delta_{jk} = -\frac{\partial u}{\partial P_j} \\ [u, P_j] &= -[P_j, u] = -\frac{\partial u}{\partial Q_k} [P_j, Q_k] - \frac{\partial u}{\partial P_k} [P_j, P_k] = \\ &= -\frac{\partial u}{\partial Q_k} (-\delta_{jk}) = \frac{\partial u}{\partial Q_j} \end{aligned}$$

en donde se omiten los subíndices por ser expresiones canónicamente invariantes. Pero usándolas vemos que el mismo corchete de Poisson es un invariante canónico, ya que

$$[u, v]_{q,p} = \frac{\partial v}{\partial Q_j} \left(-\frac{\partial u}{\partial P_j} \right) + \frac{\partial v}{\partial P_j} \frac{\partial u}{\partial Q_j} = [u, v]_{Q,P}$$

y por tanto a partir de ahora se pueden omitir los índices en todos los corchetes de Poisson.

Veremos más adelante que existe una formulación de la Mecánica Clásica, paralela a la de Hamilton, formulada con corchetes de Poisson. Con esta formulación es particularmente sencillo el paso a la Mecánica Cuántica, mediante el llamado *principio de correspondencia* y una adecuada definición del conmutador de operadores cuánticos.

3.6. Aplicaciones de los corchetes de Poisson

3.6.1. Ecuaciones del movimiento

Si hacemos $u = H$ en las fórmulas obtenidas en el apartado anterior se pueden poner las ecuaciones de Hamilton como

$$\begin{aligned} \dot{q}_i &= [q_i, H] \\ \dot{p}_i &= [p_i, H] \end{aligned}$$

que constituyen un caso particular de la ecuación de movimiento generalizada para una función arbitraria $f(q, p, t)$ ya que, con las ecuaciones de Hamilton se tiene

$$\begin{aligned} \frac{df}{dt} &= \frac{\partial f}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial f}{\partial p_i} \dot{p}_i + \frac{\partial f}{\partial t} = \\ &= \frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} + \frac{\partial f}{\partial t} = \\ &= [f, H] + \frac{\partial f}{\partial t} \end{aligned}$$

De hecho se puede deducir que si f es constante del movimiento $df/dt = 0$ se tiene:

$$f(q, p, t) \text{ constante} \Leftrightarrow [H, f] = \frac{\partial f}{\partial t}$$

con lo que se tiene que **las funciones constantes del movimiento que no dependan explícitamente del tiempo deben tener un valor de corchete de Poisson nulo con la hamiltoniana:**

$$\left\{ \begin{array}{l} f(q, p) \text{ constante} \\ f \text{ no depende del tiempo} \end{array} \right\} \Leftrightarrow [f, H] = 0$$

Este hecho nos proporciona un método para buscar constantes del movimiento.

3.6.2. Teorema de Poisson

Una de las propiedades más conocidas del corchete de Poisson es que cumple la *identidad de Jacobi*:

$$[f, [g, h]] + [g, [h, f]] + [h, [f, g]] = 0$$

Con esta identidad se pueden demostrar el llamado teorema de Poisson, que afirma que **el corchete de dos constantes es también una constante del movimiento:**

$$\left\{ \begin{array}{l} [f, H] = 0 \\ [g, H] = 0 \end{array} \right\} \Leftrightarrow [[f, g], H] = 0$$

3.6.3. Transformaciones canónicas infinitesimales

Se trata de considerar las transformaciones del tipo

$$\begin{aligned} q_i &\rightarrow Q_i = q_i + \delta q_i \\ p_i &\rightarrow P_i = p_i + \delta p_i \end{aligned}$$

La función generatriz por tanto deberá diferir muy poco de la estudiada en el caso de la transformación identidad, es decir

$$F_2(q_i, p_i, t) = q_i P_i + \epsilon G(q_i, P_i, t)$$

en donde ϵ es un factor infinitesimal y llamaremos a G función generatriz de la transformación infinitesimal.

Aplicando las ecuaciones de transformación

$$\left\{ \begin{array}{l} p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} = P_i + \epsilon \frac{\partial G}{\partial q_i} \\ Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} = q_i + \epsilon \frac{\partial G}{\partial P_i} \end{array} \right.$$

lo que implica

$$\delta p_i = -\epsilon \frac{\partial G(q_i, P_i, t)}{\partial q_i}$$

$$\delta q_i = \epsilon \frac{\partial G(q_i, P_i, t)}{\partial P_i}$$

Pero además, si nos quedamos sólo con infinitésimos de primer orden podemos poner que:

$$\delta p_i = -\epsilon \frac{\partial G(q_i, p_i, t)}{\partial q_i}$$

$$\delta q_i = \epsilon \frac{\partial G(q_i, p_i, t)}{\partial p_i}$$

Particularmente, si consideramos la hamiltoniana como función generatriz de la transformación infinitesimal y el parámetro un cambio infinitesimal del tiempo se tiene:

$$\delta p_i = -dt \frac{\partial H}{\partial q_i} = dt \dot{p}_i = dp_i$$

$$\delta q_i = dt \frac{\partial H}{\partial p_i} = dt \dot{q}_i = dq_i$$

y se puede describir el movimiento del sistema como una transformación infinitesimal generada por la hamiltoniana. De hecho, dado que el movimiento de un sistema mecánico es una evolución continua de transformaciones infinitesimales, **la hamiltoniana es la generatriz del movimiento del sistema con el tiempo.**

Por otra parte, para cualquier función de las coordenadas y los momentos, $u(q_i, p_i)$, se tiene:

$$\delta u = u(Q_i, P_i) - u(q_i, p_i) = \frac{\partial u}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial u}{\partial p_i} \delta p_i$$

que, aplicando las ecuaciones canónicas de transformación infinitesimal vistas, se tiene:

$$\delta u = \epsilon \left(\frac{\partial u}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial u}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} \right) = \epsilon [u, G]$$

y en particular para el cambio en la hamiltoniana se tendría

$$\delta H = \epsilon [H, G]$$

lo que indica que **las constantes del movimiento** (cuyo corchete con la hamiltoniana se anula) **serán también las generatrices de las transformaciones canónicas infinitesimales** (que dejarán invariante la hamiltoniana).

En particular las coordenadas cíclicas, cuyas transformaciones podemos poner, por ejemplo en el caso de una q_j como:

$$\begin{aligned}\delta q_i &= \epsilon \delta_{ij} \\ \delta p_i &= 0\end{aligned}$$

definirán como se sabe una constante del movimiento, su momento canónico conjugado, que representará la función generatriz de la transformación infinitesimal:

$$G = p_j$$

3.7. Ecuación de Hamilton-Jacobi

La teoría de Hamilton-Jacobi se basa en encontrar una transformación canónica de forma que las nuevas variables nos den precisamente las $2n$ constantes del movimiento, es decir, que sean los $2n$ valores iniciales (q_0, p_0) en $t = 0$. Esto lo conseguimos exigiendo que la hamiltoniana transformada K se anule:

$$K = 0 \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} = 0 \Rightarrow Q_i = q_{0i} \\ \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} = 0 \Rightarrow P_i = p_{0i} \end{array} \right\} \Rightarrow L = p_i \dot{q}_i - H = \frac{dF}{dt}$$

que en todos los posibles casos de dependencia estudiados para la función generatriz F conduce a la expresión:

$$H(q, p, t) + \frac{\partial F}{\partial t} = 0$$

Se acostumbra a designar por S a la solución de esta ecuación, llegando a la forma más conocida de la ecuación de Hamilton-Jacobi:

$$\boxed{H + \frac{\partial S}{\partial t} = 0}$$

Nótese que S , la llamada *función principal de Hamilton*, es una primitiva de la lagrangiana:

$$L = p_i \dot{q}_i - H = \frac{dS}{dt} \Rightarrow S = \int L dt + Cte$$

pero este hecho carece de validez práctica, ya que para calcular esa integral debemos conocer la dependencia de las coordenadas con el tiempo, es decir, haber resuelto primero el problema mecánico que es precisamente el que intentamos resolver.

La ecuación de Hamilton-Jacobi es una ecuación diferencial de primer orden con $n + 1$ variables, las coordenadas y el tiempo, y por lo tanto dependerá de $n + 1$ constantes de integración. Sin embargo, como la propia S no aparece en la ecuación, existe la posibilidad de sumar cualquier constante a la función S y seguirá siendo solución:

$$S \text{ solución} \rightarrow S' = S + Cte \text{ solución}$$

y por tanto una de las constantes, que aparezca en forma aditiva, será irrelevante, y la función principal de Hamilton será de la forma:

$$S = S(q_1, \dots, q_n; \alpha_1, \dots, \alpha_n; t)$$

en donde podemos suponer que se trata de una función generatriz de tipo F_2 y tomar las constantes de integración como las nuevas cantidades de movimiento:

$$P_i = \alpha_i$$

y las ecuaciones de transformación nos darán la solución del problema mecánico:

$$\left. \begin{aligned} p_i &= \frac{\partial S(q, \alpha, t)}{\partial q_i} \\ Q_i = \beta_i &= \frac{\partial S(q, \alpha, t)}{\partial \alpha_i} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{cases} q_i = q_i(\alpha, \beta, t) \\ p_i = p_i(\alpha, \beta, t) \end{cases}$$

Nótese que la primera de las ecuaciones en el instante inicial nos relaciona las constantes de integración α con los valores iniciales q_{0i} y p_{0i} .

Capítulo 4

PRINCIPIO DE HAMILTON. TEORÍA DE CAMPOS

4.1. Introducción

Hemos aplicado el principio extremal de Hamilton para deducir las leyes que nos engendrarán a su vez aquellas que rigen el movimiento de los sistemas en Mecánica Clásica, en donde las variables incógnita de los problemas eran las coordenadas $q_i(t)$ de las partículas puntuales. Una visión más general de los sistemas físicos nos la da la *Teoría de Campos*, en donde las variables dependientes a estudiar pueden ser campos en 1+3 dimensiones, $u_n(x)$, como los campos electromagnético y gravitacional, densidades de carga, densidades de probabilidad, etc.

En estas teorías la variable independiente ya no es el tiempo sino el cuadrivector x del espacio-tiempo. Ya no hablaremos pues de intervalos temporales de integración sino de entornos espacio-temporales de integración. Las correspondencias principales serían:

$$t \rightarrow x^\mu$$

$$q_i(t) \mapsto u_n(x)$$

$$\dot{q}_i(t), \ddot{q}_i(t), \dots \rightarrow u_{n,\mu}(x), u_{n,\mu\nu}(x), \dots$$

siguiendo el convenio de usar las comas para derivar parcialmente respecto de componentes del cuadrivector.

4.2. Integral de acción

En general tendremos un conjunto de campos $u_n(x)$ que pueden ser escalares, vectoriales, tensoriales, espinoriales, etc. Para simplificar, vamos a considerar un solo campo $u(x)$, que no mermará generalidad a nuestras teorías dado el carácter aditivo de la lagrangiana.

Definimos en este caso la llamada densidad lagrangiana como la función:

$$\mathcal{L} \equiv \mathcal{L}[x, u] \equiv \mathcal{L}(x, u, Du, DDu, \dots)$$

donde Du es el "vector" de componentes:

$$D_\mu u(x) \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu} u(x) = u_{,\mu}(x) \quad (4.1)$$

(veremos que en realidad en general este objeto tendrá otras componentes n relativas a los índices de su naturaleza y que harán que no sea un verdadero vector, pero en esta simplificación que hacemos nos valdrán este tipo de consideraciones.)

Esta densidad será un **objeto local real que no dependerá explícitamente de la posición x** .

La lagrangiana total será entonces la integral de esta densidad extendida al dominio de x que define al sistema:

$$L(x^0) \equiv \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \mathcal{L}(x)$$

y la acción tiene una expresión análoga a la de Mecánica Clásica:

$$S \equiv \int_{x^0_{(1)}}^{x^0_{(2)}} \int_{\mathbb{R}^3} d^3x \mathcal{L}(x) = \int_{x^0_{(1)}}^{x^0_{(2)}} L(x^0) dx^0 \quad (4.2)$$

expresión no demasiado general debido al hecho de que la separación entre las componentes espaciales y temporal depende del sistema de referencia. De forma más compacta se suele poner:

$$S \equiv \int_{\Omega} d^4x \mathcal{L}(x) \quad (4.3)$$

en donde Ω denota un volumen cuatridimensional.

4.3. Ecuaciones de Euler-Lagrange

El principio de Hamilton en este caso tendrá la forma:

$$\delta S = \delta \int_{\Omega} d^4x \mathcal{L}(x) = 0$$

en donde **la variación de los campos $\delta u(x)$ se anulará en la superficie Σ de contorno de la región de integración**. Una posible descripción para estas variaciones es:

$$\begin{aligned} x_\mu &\mapsto x'_\mu = x_\mu + \delta x_\mu \\ u(x) &\mapsto u'(x') = u(x) + \delta u(x) \end{aligned}$$

En general, para aproximaciones en primer orden, la variación general de la acción será debida por una parte a la variación general del lagrangiano y por otra a la variación del elemento de volumen debida al cambio de coordenadas. Esto no ocurre en las transformaciones de jacobiano unidad (apéndice ??), en las que se puede afirmar que:

$$\delta S = 0 \iff \delta \mathcal{L}(x) = 0$$

Para lagrangianos dependientes hasta primeras derivadas de los campos se tiene:

$$\delta\mathcal{L} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial u}\delta u + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial u_{,\mu}}\delta u_{,\mu}$$

Como la variación y la derivación conmutan, se podrá integrar por partes el segundo sumando:

$$\int_{\Omega} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial u_{,\mu}} D_{\mu}(\delta u(x)) d^4x = \left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial u_{,\mu}} \delta u \right]_{\Sigma} - \int_{\Omega} D_{\mu} \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial u_{,\mu}} \right) \delta u(x) d^4x$$

en donde el primer término se anula por anularse la variación de los campos en el contorno, quedando las ecuaciones de Euler-Lagrange en la forma:

$$\boxed{\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial u} - D_{\mu} \left(\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial u_{,\mu}} \right) = 0} \quad (4.4)$$

que representan un sistema de ecuaciones en derivadas parciales para cada una de las cantidades campo.

4.4. Lagrangianos equivalentes

De nuevo aquí se cumple que lagrangianos distintos pueden dar lugar a las mismas ecuaciones de evolución de los campos. Esto sucede por ejemplo para los lagrangianos que difieren en una divergencia:

$$\mathcal{L}' = \mathcal{L} + D_{\mu}V^{\mu}$$

$$S' = \int_{\Omega} d^4x (\mathcal{L} + D_{\mu}V^{\mu}) = S + \int_{\Sigma} d\sigma_{\mu}V^{\mu}$$

en donde se ha aplicado el teorema de Gauss Ostrogradsky (apéndice ??). Como vemos la nueva integral de acción difiere solamente en un término de superficie, quedando:

$$\delta S' = \delta S + \int_{\Omega} d^4x D_{\mu}(\delta V^{\mu}) = \delta S + \cancel{[\delta V]_{\Sigma}} = \delta S$$

ya que las variaciones de los campos se anulan sobre las superficies límite.

Por otra parte, cuando hay más de un campo, es posible a veces encontrar lagrangianos que conducen a sistemas de ecuaciones de evolución equivalentes y que sin embargo no difieren en una divergencia. En este caso diremos que los lagrangianos son equivalentes no trivialmente.

4.5. Ecuaciones de Hamilton

En analogía con las ecuaciones de la Mecánica se define el momento conjugado a un campo como

$$\pi(\vec{x}, t) = \frac{\partial\mathcal{L}(\vec{x}, t)}{\partial\dot{u}(\vec{x}, t)}$$

Y el hamiltoniano también, asociándolo con la llamada *densidad hamiltoniana*:

$$H = \int_V \mathcal{H} d^3x = \int_V [\pi(x)\dot{u}(x) - \mathcal{L}(x)] d^3x$$

Aquí debemos pararnos un momento. Tanto en el caso del hamiltoniano como en el anterior del lagrangiano en teoría de campos, debemos interpretar estas cantidades más que como funciones como *funcionales* que actúan sobre funciones- de esta forma H habría que interpretarlo como $H[u, \pi]$, y cuando derivamos estas cantidades respecto a sus argumentos en realidad lo que estamos haciendo son derivadas funcionales δ del tipo:

$$\frac{\delta H(t)}{\delta u(\vec{x}, t)} = \lim_{\delta V^i \rightarrow 0} \frac{1}{\delta V^i} \frac{\partial H(t)}{\partial u^i}$$

De esta forma las ecuaciones de Hamilton en teoría de campos quedan

$$\begin{cases} \dot{\pi}(x) = -\frac{\delta H(t)}{\delta u(x)} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial u(x)} \\ \dot{u}(x) = \frac{\delta H(t)}{\delta \pi(x)} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi(x)} \end{cases}$$

4.6. Corchetes de Poisson

De la misma forma que en la teoría mecánica, en este caso si una funcional concreta $F[u, \pi]$ no depende explícitamente del tiempo se tiene como definición de los *corchetes de Poisson*:

$$\dot{F}(t) = [F, H]_{u, \pi} \equiv \int_V \left(\frac{\delta F}{\delta u} \frac{\delta H}{\delta \pi} - \frac{\delta F}{\delta \pi} \frac{\delta H}{\delta u} \right) d^3x$$

Si escribimos

$$\begin{aligned} u(\vec{x}, t) &= \int_V \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') u(\vec{x}', t) d^3x' \\ \pi(\vec{x}, t) &= \int_V \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}') \pi(\vec{x}', t) d^3x' \end{aligned}$$

las derivadas funcionales son

$$\frac{\delta u(\vec{x}, t)}{\delta u(\vec{x}', t)} = \frac{\delta \pi(\vec{x}, t)}{\delta \pi(\vec{x}', t)} = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}')$$

Este resultado nos permite calcular por un lado las ecuaciones de Hamilton en función de los corchetes de Poisson:

$$\left. \begin{aligned} [u, H] &= \frac{\delta H}{\delta \pi} \\ [\pi, H] &= -\frac{\delta H}{\delta u} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{cases} \dot{u} = [u, H] \\ \dot{\pi} = [\pi, H] \end{cases}$$

y por otro derivar las relaciones fundamentales de conmutación, que retomaremos en teoría cuántica de campos:

$$[u(\vec{x}, t), \pi(\vec{x}', t)] = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}')$$

$$[u(\vec{x}, t), u(\vec{x}', t)] = [\pi(\vec{x}, t), \pi(\vec{x}', t)] = 0$$

Teniendo en cuenta que los campos pueden estar expresados en una representación de un grupo de simetría interno G estas expresiones se deberán ampliar a

$$[u^\alpha(\vec{x}, t), \pi_\beta(\vec{x}', t)] = \delta_\beta^\alpha \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}')$$

$$[u^\alpha(\vec{x}, t), u^\beta(\vec{x}', t)] = [\pi_\alpha(\vec{x}, t), \pi_\beta(\vec{x}', t)] = 0$$

y en el caso de campos complejos

$$[u(\vec{x}, t), \pi(\vec{x}', t)] = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}')$$

$$[u^*(\vec{x}, t), \pi^*(\vec{x}', t)] = \delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{x}')$$

Capítulo 5

TEOREMA DE NOETHER

5.1. Introducción

En el contexto de la teoría de campos, e influenciada por su formación matemática en teoría de invariantes, Emmy Noether (1882-1935), propuso en 1918 el que probablemente es uno de los teoremas más bellos de la física-matemática. Viene a ser en el contexto continuo el análogo a las comentadas coordenadas cíclicas y cantidades conservadas en Mecánica.

Para el desarrollo de este teorema utilizaremos un principio que veremos en muchas ocasiones a lo largo de estos apuntes, consistente en suponer ciertas condiciones generales que deben cumplir las leyes físicas. Este principio, llamado de *covariancia* o *invarianza de forma*, afirma que **las leyes de la naturaleza deben tener la misma forma en todos los sistemas de referencia equivalentes**. Esta es la formulación más general del principio y en cada teoría el experimento nos dará el conjunto de sistemas de referencia que en efecto son equivalentes, que en general estarán relacionados unos con otros por las transformaciones debidas a las simetrías del sistema.

5.2. Teorema

Teorema 5.2.1. (Noether) *A toda transformación continua de las coordenadas o/y los campos que deje invariante la acción en un volumen cuatridimensional le corresponde una corriente conservada j^μ en la evolución que cumple $D_\mu j^\mu = 0$.*

Dem: Si consideramos el conjunto de transformaciones de punto y de campo:

$$\begin{aligned}x_\mu &\mapsto x'_\mu = x_\mu + \delta x_\mu \\u(x) &\mapsto u'(x) = u(x) + \delta_o u(x) \\u(x) &\mapsto u'(x') = u(x) + \delta u(x)\end{aligned}\tag{5.1}$$

en donde ponemos subíndice **o** a la variación del campo en un punto particular. Inducida se tiene la variación correspondiente de la lagrangiana:

$$\mathcal{L}(u(x), u_{,\mu}(x)) \mapsto \mathcal{L}'(u'(x'), u'_{,\mu}(x'))$$

Si suponemos la *covarianza* del lagrangiano, éste presentará la misma forma funcional para las cantidades transformadas que =para las cantidades originales, es decir:

$$\mathcal{L}'(u', u'_{,\mu}) = \mathcal{L}(u, u_{,\mu})$$

Otra de las suposiciones del teorema es la *invarianza de escala*, es decir, que la magnitud de la integral de acción sea invariante ante la transformación:

$$S' = S$$

estas dos últimas condiciones reflejan las propiedades de simetría para coordenadas cíclicas ya vistas con anterioridad.

Combinando las dos últimas ecuaciones se tiene:

$$\int_{\Omega'} \mathcal{L}(u', u'_{,\mu}) d^4x' - \int_{\Omega} \mathcal{L}(u, u_{,\mu}) d^4x = 0$$

o bien, como la x' será muda:

$$\int_{\Omega'} \mathcal{L}(u', u'_{,\mu}) d^4x - \int_{\Omega} \mathcal{L}(u, u_{,\mu}) d^4x = 0$$

que, haciendo simbólicamente $\Omega' = \Omega + \delta x$, se puede poner como:

$$\int_{\Omega} [\mathcal{L}(u', u'_{,\mu}) - \mathcal{L}(u, u_{,\mu})] d^4x + \int_{\delta x} \mathcal{L}(u', u'_{,\mu}) d^4x = 0$$

que en primer orden se convierte en:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} [\mathcal{L}(u', u'_{,\mu}) - \mathcal{L}(u, u_{,\mu})] d^4x + [\delta x \mathcal{L}(u, u_{,\mu})]_{\Sigma} = \\ & = \int_{\Omega} \{ \mathcal{L}(u', u'_{,\mu}) - \mathcal{L}(u, u_{,\mu}) + D_{\nu}[\mathcal{L}(u, u_{,\mu}) \delta x^{\nu}] \} d^4x = 0 \end{aligned} \quad (5.2)$$

Por las ecuaciones de transformación (5.1) podemos poner en primer orden:

$$\begin{aligned} u'(x) &= u(x) + \delta_o u(x) \\ \mathcal{L}(u', u'_{,\mu}) &= \mathcal{L}(u, u_{,\mu}) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} \delta_o u + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_{,\mu}} \delta_o u_{,\mu} \end{aligned} \quad (5.3)$$

como el subíndice o representa un cambio en un punto fijo va a conmutar con la derivación espacial, y tenemos:

$$\mathcal{L}(u', u'_{,\mu}) - \mathcal{L}(u, u_{,\mu}) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} \delta_o u + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_{,\mu}} D_{\mu} \delta_o u$$

o utilizando las ecuaciones de campo de Lagrange (4.4):

$$\mathcal{L}(u', u'_{,\mu}) - \mathcal{L}(u, u_{,\mu}) = D_{\mu} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_{,\mu}} \right) \delta_o u + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_{,\mu}} D_{\mu} \delta_o u = D_{\mu} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_{,\mu}} \delta_o u \right]$$

con lo que la condición de invariancia (5.2) queda:

$$\int_{\Omega} D_{\mu} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_{,\mu}} \delta_o u + \delta x^{\mu} \mathcal{L} \right] d^4 x = 0$$

que tiene la forma de una ecuación de corriente conservada. Si definimos:

$$j^{\mu} \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_{,\mu}} \delta_o u + \delta x^{\mu} \mathcal{L} \quad (5.4)$$

Con lo que el teorema de Noether se expresa en primer orden como:

$$\delta^{(1)} S = \int_{\Omega} d^4 x D_{\mu} j^{\mu} = 0 \quad (5.5)$$

o bien aplicando el teorema de Gauss, para campos que satisfagan las ecuaciones de Euler-Lagrange, la variación general de la integral de acción en primer orden se reduce a una integral de superficie:

$$\delta^{(1)} S = \int_{\Sigma} d\sigma_{\mu} j^{\mu} = 0 \quad (5.6)$$

o bien directamente en su forma diferencial, la llamada ley de conservación:

$$\boxed{D_{\mu} j^{\mu} = 0} \quad (5.7)$$

□

Hay que hacer notar que la corriente j^{μ} no está unívocamente definida ya que es posible sumarle una corriente $C^{\mu}(x)$ conservativa trivial de forma que $D_{\mu} C^{\mu}(x) = 0$.

Estas relaciones generales puramente matemáticas nos permitirán en lo que sigue obtener resultados físicos de gran interés.

Capítulo 6

TRASLACIONES. TENSOR ENERGÍA-MOMENTO

6.1. Introducción

En este capítulo vamos a estudiar el origen del Tensor Energía-Momento que nos llevará a tratar de forma general las dos leyes de conservación relacionadas con las simetrías traslacionales, la del momento lineal y la de la energía. Este último concepto lo veremos como invariante del movimiento relacionándolo con la llamada *función hamiltoniana*. Probaremos también formalmente el conocido hecho de que la energía de un sistema aislado se conserva.

6.2. Tensor Energía-Momento

6.2.1. Forma canónica

A partir de las ecuaciones (5.1) podemos definir una traslación infinitesimal ε como el conjunto de transformaciones de punto y de campo siguientes:

$$\begin{aligned}\delta x^\mu &= x'^\mu - x^\mu \equiv \varepsilon^\mu \\ \delta u(x) &= u'(x') - u(x) = 0\end{aligned}\tag{6.1}$$

Por otra parte podemos relacionar esta variación general del campo con la variación en cada punto por medio del desarrollo infinitesimal:

$$\begin{aligned}\delta u(x) &= u'(x + \delta x) - u(x) = \\ &= u'(x) + [D_\mu u'(x)]\varepsilon^\mu + O(\varepsilon^2) - u(x) = \\ &= \delta_0 u(x) + [D_\mu u'(x)]\varepsilon^\mu + O(\varepsilon^2) = \\ &= \delta_0 u(x) + [D_\mu (u(x) + \delta_0 u(x))]\varepsilon^\mu + O(\varepsilon^2) \simeq \\ &\simeq \delta_0 u(x) + u_{,\mu}(x)\varepsilon^\mu\end{aligned}\tag{6.2}$$

que representa el hecho de que la variación de los campos en cada punto puede ser debida a una variación intrínseca de los campos independiente de las coordenadas o consecuencia de una transformación de las mismas.

Como en este caso los campos no varían se tiene sólo la variación en cada punto que sobre estos induce la traslación:

$$\delta_0 u(x) = -u_{,\mu}(x)\varepsilon^\mu \quad (6.3)$$

y la corriente conservada según la fórmula (5.4) del teorema de Noether será:

$$\begin{aligned} j^\mu &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_{,\mu}}(-u_{,\mu}\varepsilon^\mu) + \varepsilon^\mu \mathcal{L} = \\ &= -\varepsilon_\nu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_{,\mu}} u^{,\nu} - \eta^{\mu\nu} \mathcal{L} \right) \end{aligned} \quad (6.4)$$

Definiendo el llamado *tensor canónico de energía-momento* de segundo orden como:

$$\Theta^{\mu\nu} \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_{,\mu}} u^{,\nu} - \eta^{\mu\nu} \mathcal{L} \quad (6.5)$$

queda el teorema de Noether en su forma diferencial como:

$$D_\nu \Theta^{\mu\nu}(x) = 0 \quad (6.6)$$

expresión que representa n leyes de conservación, $\mu = 0,1,2$ y 3 para el caso n=4 cuatridimensional.

Con este tensor se puede calcular la energía y el momento en cualquier volumen tridimensional:

$$P^\nu \equiv \int_{\Sigma'} \Theta^{\mu\nu} d\sigma_\mu \quad (6.7)$$

en particular para volúmenes de tiempo constante:

$$P^\nu = \int_{\mathbb{R}^3} \Theta^{0\nu}(x) d^3x \quad (6.8)$$

en donde $\Theta^{0\nu}$ recibe el nombre de *densidad de energía-momento*, siendo P^ν un cuatrivector que representa la energía del sistema (cP^0) y los momentos totales del sistema (P^j). El resto de componentes espaciales se relacionan con las presiones del sistema.

Hay que hacer notar que la conservación de $\Theta^{\mu\nu}$ se puede deducir también a partir de las ecuaciones de Euler-Lagrange (4.4):

$$\begin{aligned} D_\mu \mathcal{L} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x^\mu} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial x^\mu} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_{,\lambda}} \frac{\partial u_{,\lambda}}{\partial x^\mu} = \\ &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x^\mu} + \left(D_\lambda \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_{,\lambda}} \right) u_{,\mu} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_{,\lambda}} u_{,\lambda\mu} = \\ &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x^\mu} + D_\lambda \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u_{,\lambda}} u_{,\mu} \right) \end{aligned} \quad (6.9)$$

y, por tanto

$$\boxed{D_\lambda \Theta^{\lambda\nu} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_\nu}} \quad (6.10)$$

En resumen, una condición suficiente para que exista un P^ν (energía-momento) conservado es que \mathcal{L} no dependa explícitamente de las coordenadas, en cuyo caso las corrientes conservadas son las $\Theta^{\mu\nu}$.

6.2.2. Forma simétrica

En general el tensor canónico de energía-momento no es simétrico, lo que como veremos conlleva que en esta forma no se pueda usar como fuente del campo gravitatorio. No obstante, existe una técnica general de simetrización debida a **Belinfante** que aprovecha el hecho de que este tensor no es único, y se puede construir otro tensor equivalente al anterior que dé lugar a la misma Física.

En efecto, si al tensor canónico le añadimos una divergencia de un tensor de tercer orden $\theta^{\lambda\mu\nu}(x)$ antisimétrico en los dos primeros índices y tal que $\theta^{0i\nu}(x)$ se anule en el infinito tridimensional:

$$\boxed{T^{\mu\nu} \equiv \Theta^{\mu\nu} + D_\lambda \theta^{\lambda\mu\nu}} \quad (6.11)$$

se podrá elegir convenientemente este nuevo término de forma que el nuevo tensor sea simétrico.

Veamos que en efecto este nuevo tensor representa las mismas propiedades físicas, es decir, también es conservado y nos da la misma energía y momento totales:

I) $D_\mu T^\mu = D_\mu \Theta^{\mu\nu} + \cancel{D_\mu D_\lambda \theta^{\lambda\mu\nu}}$, ya que el segundo término se anula por la antisimetría de los dos primeros índices.

II) $P^\nu(T) = \int_\Sigma d\sigma_\mu T^{\mu\nu} = P^\nu(\Theta) + \cancel{\int_\Sigma d\sigma_\mu D_\lambda \theta^{\lambda\mu\nu}}$, ya que el segundo término se anula por la condición de contorno impuesta.

6.3. Homogeneidad del tiempo. Energía

6.3.1. Sistemas libres

Cuando la lagrangiana no depende explícitamente del tiempo se puede desarrollar en serie en la forma:

$$\frac{dL}{dt} = \frac{\partial L}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i$$

utilizando las ecuaciones de Euler-Lagrange se puede poner como

$$\frac{dL}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \ddot{q}_i = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i \right)$$

o bien

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i - L \right) = 0$$

luego, recordando la definición de momento generalizado (2.9), la cantidad:

$$\boxed{H \equiv p_i \dot{q}_i - L = cte} \quad (6.12)$$

llamada *hamiltoniano*, *función hamiltoniana* o, a veces, *energía del sistema*, se conserva en la evolución.

Recordemos que en el caso de un sistema libre cuyas transformaciones no dependen del tiempo la lagrangiana era la forma cuadrática:

$$L = \frac{1}{2} M_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j$$

que arroja la siguiente expresión para el momento generalizado:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = M_{ij} \dot{q}_j \quad (6.13)$$

Por tanto, la expresión de la energía de un sistema de partículas libres será, según (6.12):

$$H = T = M_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j - L = 2L - L = \frac{1}{2} M_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j$$

y la lagrangiana misma del sistema se conservará. A esta hamiltoniana particular se la conoce con el nombre de *energía cinética*, T , por ser una cantidad conservada que sólo depende de las velocidades generalizadas y las masas del sistema.

Hay que tener en cuenta que **la función H no siempre coincide con la energía física del sistema**, aunque por abuso del lenguaje se le llama energía por ser una cantidad conservada. En estos casos la verdadera energía E no se conserva, y suelen coincidir con sistemas que no están verdaderamente aislados y son *rehónomos* (sus ligaduras dependen del tiempo). En ese caso $T = T_0 + T_1 + T_2$ y se tienen las expresiones:

$$p_k = M_k + M_{ki} \dot{q}_i$$

$$H = \frac{1}{2} M_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j - M_0$$

en este caso la invariante H se denomina *integral de Jacobi* o de *Jacobi-Panlevé*.

6.3.2. Sistemas con interacción

Como se ha dicho, en la mayoría de los casos en Mecánica los sistemas con interacción se pueden definir con una lagrangiana con la forma:

$$L = T(q, \dot{q}) - U(q, \dot{q}) \quad (6.14)$$

Usando la definición de hamiltoniano (6.12) se obtiene:

$$H = \frac{1}{2}M_{ij}\dot{q}_i\dot{q}_j + U - M_0 - \dot{q}\frac{\partial U}{\partial \dot{q}_i}$$

expresión que, suponiendo que la función U no depende de las velocidades (caso de sistemas conservativos), y que las ecuaciones de transformación de coordenadas no dependen del tiempo (sistema esclerónomo), se reduce a la famosa:

$$\boxed{H(q, \dot{q}) = T(\dot{q}) + U(q)} \quad (6.15)$$

que coincide con la energía del sistema. De ahí que al término U se le conozca también como *energía potencial*, por ser una cantidad normalmente relativa a las coordenadas de las partículas.

6.4. Homogeneidad del espacio. Momento lineal

A partir de las ecuaciones de Lagrange ya vimos que para cada coordenada cíclica o ignorable existía un momento canónico conjugado conservado:

$$p_j \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}$$

y vimos que en el caso de coordenadas generalizadas este momento tendría la forma:

$$p_j = M_j + M_{ji}\dot{q}_i$$

que en sistemas de referencia no dependientes del tiempo conservaría sólo el segundo término.

Para las coordenadas físicas, este momento toma la forma familiar:

$$p_j = m\dot{r}_j \quad (6.16)$$

o bien, la más conocida, como vector

$$\vec{p} = m\vec{v} \quad (6.17)$$

Esto constituye también una forma de definir los sistemas de referencia, dado que, respecto a un sistema de referencia arbitrario, el espacio sería no homogéneo, es decir, que aunque un cuerpo no interactúe con ningún otro, sus distintas posiciones en el espacio no serían mecánicamente equivalentes.

El hecho de buscar sistemas de referencia en donde esto no ocurra es la razón por la cual la lagrangiana no debería contener el vector posición, y vemos así que de esta premisa, homogeneidad del espacio, hemos deducido de nuevo una ley de conservación, la del momento lineal.

Parte II

EL SUEÑO DEL RELOJERO

Una inteligencia que en un momento determinado conociera todas las fuerzas que animan a la naturaleza, así como la situación respectiva de los seres que la componen, si además fuera lo suficientemente amplia como para someter a análisis tales datos, podría abarcar en una sola fórmula los movimientos de los cuerpos más grandes del universo y los del átomo más ligero; nada le resultaría incierto y tanto el futuro como el pasado estarían presentes ante sus ojos.

P.S.Laplace [12]

Capítulo 7

MECÁNICA

7.1. Introducción

La Mecánica es la parte de la Física que estudia *el movimiento de los cuerpos mediante el análisis de sus causas* (fuerzas) en términos matemáticos. En los albores de la Física, desde los griegos (Aristóteles, Euclides, Pitágoras, Arquímedes) hasta el final de la Edad Media (Copérnico, Kepler, Galileo), el estudio del movimiento se había centrado más bien en la Cinemática (con la posible excepción de Arquímedes), es decir, la simple descripción del movimiento en términos de geometría. Todo esto cambia con Isaac Newton. A partir de Newton, existe la posibilidad de *predecir* el movimiento de los cuerpos.

7.2. Leyes de Newton

7.2.1. Partícula puntual. Vectores de posición, velocidad y aceleración

La descripción del movimiento de un *punto material* o partícula se da mediante la especificación de una función vectorial del parámetro tiempo t . Dicho parámetro tiene un *carácter absoluto* (es independiente del sistema de referencia; véase la sección Principio de relatividad de Galilei).

$$\mathbf{r}(t) = (x(t), y(t), z(t)) \quad (7.1)$$

En esta idealización, los sistemas físicos son puntos matemáticos, y por tanto carecen de estructura interna. Su estado en todo momento está dado por las proyecciones sobre unos ejes cartesianos de referencia: $x(t), y(t), z(t)$. Si conocemos estas tres funciones para todo instante de tiempo, entonces conocemos toda la historia del sistema. Esta descripción es demasiado optimista: normalmente uno no conoce de partida la historia de un punto material (su posición para todo t).

Pero supongamos por un momento que ya hemos resuelto el problema dinámico y conocemos la trayectoria del punto material, $\mathbf{r}(t)$. Los vectores de velocidad y aceleración en cada instante t se definen como las sucesivas derivadas temporales:

$$\mathbf{v}(t) = \frac{d\mathbf{r}(t)}{dt} = (\dot{x}(t), \dot{y}(t), \dot{z}(t)) \quad (7.2)$$

$$\mathbf{a}(t) = \frac{d\mathbf{v}(t)}{dt} = \frac{d^2\mathbf{r}(t)}{dt^2} = (\ddot{x}(t), \ddot{y}(t), \ddot{z}(t)) \quad (7.3)$$

Las leyes de Newton garantizan que no sea necesario conocer de partida las variaciones temporales de orden arbitrariamente alto de estas funciones coordenadas, bastando especificar la posición y velocidad iniciales del punto material para reconstruir el movimiento completo. Esto es debido a que una relación entre fuerza y aceleración nos permite ir más allá de una mera definición sin más a una verdadera herramienta matemática predictiva mediante la especificación de una *ley de fuerza*, $\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{r})$.

Las leyes de Newton son:

I. Toda partícula libre permanece en reposo o se mueve con movimiento rectilíneo y uniforme (a velocidad constante):

$$\mathbf{F} = 0 \Rightarrow \mathbf{v} = \text{const.} \quad (7.4)$$

II. La fuerza sobre una partícula es el producto de su *masa inercial* por la aceleración de la misma:

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a} \quad (7.5)$$

III. Principio de acción y reacción: La fuerza que ejerce la partícula 1 sobre la partícula 2 es igual en magnitud y opuesta en dirección a la fuerza recíproca) y se sitúa en la línea que une ambas.

$$\mathbf{F}_{12} = -\mathbf{F}_{21} \quad (7.6)$$

Observaciones:

(i) La ley (I) es una consecuencia inmediata de la II, y la ley III viene a ser una expresión de que el sistema compuesto por dos subsistemas 1 y 2 nunca produce una fuerza neta como resultado de fuerzas mutuas: $\mathbf{F}_{12} + \mathbf{F}_{21} = 0$, con lo que es la expresión de la ley I para el sistema compuesto 1+2.

(ii) La masa inercial así definida no tiene nada que ver con la llamada masa gravitatoria, que define el acoplamiento gravitatorio de dos cuerpos por medio de la *ley de Gravitación universal*:

$$\mathbf{F} = -G \frac{m_g m'_g}{r^2} \mathbf{e}_r \quad (7.7)$$

(donde $\mathbf{e}_r \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mathbf{r}}{r}$ es el vector unitario en la dirección que une los centros de masa de ambos cuerpos y va de m'_g a m_g , el cuerpo cuyo movimiento estamos considerando.)

Es una ley física llamada *Principio de Equivalencia* la que afirma que ambas masas son proporcionales: $m_g = \lambda m$ con una constante universal λ que las relaciona. Por ser universal, esta constante siempre se puede elegir como la unidad, con lo que se justifica el nombre de

masa para ambos parámetros. Si esto no fuera así, la cantidad m_g en (7.7) nunca se habría llamado *masa*, sino probablemente *carga gravitatoria*.

(iii) Si conocemos la ley de fuerza, que en su forma más general adopta la forma $\mathbf{F} = \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t)$, entonces es posible plantear el problema dinámico como una ecuación diferencial:

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{F}(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) \quad (7.8)$$

Esta ecuación puede siempre resolverse con datos iniciales $\mathbf{r}(t_0)$ y $\mathbf{v}(t_0)$ al menos en un intervalo y siempre que la función \mathbf{F} sea suficientemente regular (básicamente que la función \mathbf{F} sea diferenciable en torno a la condición inicial).

7.3. Energía y momento lineal

Siempre es posible en principio reducir el estudio de un sistema mecánico a la resolución de las ecuaciones de Newton. Sin embargo, en muchas ocasiones resulta conveniente hacerlo mediante el uso de *cantidades conservadas*; es decir, ciertas funciones de las coordenadas y las velocidades que se mantienen constantes en el curso de la evolución, de la forma:

$$\begin{aligned} f_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N) &= 0 \\ f_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N, \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_N) &= 0 \\ &\dots \end{aligned}$$

Si existiera un número suficiente de tales funciones, el movimiento estaría determinado para todo t . Si el sistema es autónomo (el tiempo no aparece explícitamente en la dinámica, sino solo implícitamente en las coordenadas y velocidades) bastará un número $6N - 1$ de tales condiciones para resolverlo. En general, el movimiento de los sistemas dinámicos no es resoluble de esta forma, pero si así ocurre se dice que el sistema *se ha reducido a cuadraturas*.

Esta es una lista de las cantidades conservadas que aparecen en mecánica con más frecuencia, tres de ellas fundamentales o universales y otras dos más exóticas:

- Momento lineal (universal)
- Energía (universal)
- Momento angular (universal)
- Virial
- Vector de Runge-Lenz

Las tres primeras son universales. La 4ª es una cantidad conservada de los gases ideales y de cualquier sistema que sea invariante bajo dilataciones, y la 5ª es una cantidad conservada en potenciales centrales, como el problema de Kepler o el átomo de hidrógeno.

7.3.1. Momento lineal de un punto material

Definimos el momento lineal de una partícula como el producto de su masa por su velocidad:

$$\mathbf{p} \stackrel{\text{def}}{=} m\mathbf{v} \quad (7.9)$$

7.3.2. Trabajo

Se define el *trabajo* ejercido por la fuerza \mathbf{F} para llevar la partícula del punto de coordenadas \mathbf{r}_1 al punto de coordenadas \mathbf{r}_2 como:

$$W_{1,2} \stackrel{\text{def}}{=} - \int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} \quad (7.10)$$

Observaciones:

El trabajo depende en general no solo de los puntos inicial y final, sino de la trayectoria seguida para ir de uno al otro.

Si varias fuerzas actúan a la vez sobre una partícula material, la definición se puede extender aditivamente, de forma que el trabajo total (trabajo realizado por la resultante) es igual a la suma de los trabajos individuales realizados por cada una de las componentes.

En algunos textos se encuentra la expresión “trabajo ejercido *contra* la fuerza \mathbf{F} ”, para dar cuenta del signo negativo en (7.10). Esta distinción puramente filosófica es en realidad innecesaria, pues el signo se reduce a una cuestión de convención, y cuando las fuerzas son conservativas (véase más adelante) no tiene en realidad interés distinguir quién realiza la fuerza. Hemos de decir, no obstante, que la elección de signo en (7.10) es universal.

7.3.3. Energía cinética

La energía cinética de una partícula puntual se define como:

$$K \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}mv^2 \quad (7.11)$$

donde $v^2 \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$

7.3.4. Energía potencial. Fuerzas conservativas. Teorema de conservación de la energía

Hemos dicho anteriormente que el trabajo depende del camino que recorre la partícula para ir de un punto a otro. Denotando dicho camino por Γ , en realidad deberíamos haber escrito la definición de trabajo en términos de su verdadera dependencia:

$$W[\Gamma] \stackrel{\text{def}}{=} - \int_{\Gamma} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r}$$

Tiene sentido preguntarse por la existencia de campos de fuerza para los cuales esta integral de línea sea especialmente simple, en particular dependa solo de los puntos inicial y final. El teorema matemático que garantiza esto se llama teorema del gradiente, que asegura que si un

campo vectorial \mathbf{F} tiene integral de línea nula sobre cualquier trayectoria cerrada, lo que se representa:

$$\oint \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = 0 \quad (7.12)$$

entonces \mathbf{F} puede escribirse como el gradiente de un campo escalar V :

$$\mathbf{F} = -\nabla V(\mathbf{r}) \quad (7.13)$$

(de nuevo el signo negativo es una convención.)

Observaciones:

7.3.5. Teorema de conservación de la energía mecánica

Supongamos que una partícula puntual se mueve desde una posición \mathbf{r}_1 hasta una posición \mathbf{r}_2 bajo la acción de una fuerza conservativa. Usando la definición de trabajo y (7.13):

$$\begin{aligned} W_{1,2} &= - \int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = V(\mathbf{r}_2) - V(\mathbf{r}_1) = \\ &= - \int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2} m \frac{d\mathbf{v}}{dt} \cdot d\mathbf{r} = - \int_{\mathbf{r}_1}^{\mathbf{r}_2} m \frac{d\mathbf{r}}{dt} \cdot d\mathbf{v} = -m \int_1^2 \mathbf{v} \cdot d\mathbf{v} \\ &= -m \int_1^2 v dv = K_1 - K_2 \end{aligned}$$

Por lo tanto:

$$\boxed{\frac{1}{2}mv_1^2 + V(\mathbf{r}_1) = \frac{1}{2}mv_2^2 + V(\mathbf{r}_2)} \quad (7.14)$$

La cantidad $E \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}mv^2 + V(\mathbf{r})$ se llama *energía total* (mecánica) de una partícula puntual en un campo conservativo de energía potencial $V(\mathbf{r})$. La hemos deducido para dos puntos arbitrarios de la trayectoria. Demostremos la versión continua; es decir, que la derivada temporal de la cantidad:

$$\boxed{E = \frac{1}{2}mv^2 + V(\mathbf{r})} \quad (7.15)$$

es nula. En efecto:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}E &= \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2}mv^2 + V(\mathbf{r}) \right) = m\mathbf{v} \cdot \dot{\mathbf{v}} + \nabla V \cdot \dot{\mathbf{r}} = \\ &= \mathbf{v} \cdot \dot{\mathbf{p}} + \nabla V \cdot \dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v} \cdot \mathbf{F} - \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} = 0 \end{aligned}$$

que corrobora el resultado obtenido punto a punto.

7.3.6. Momento angular. Teorema de conservación del momento angular

El momento angular de una partícula masa m , posición \mathbf{r} y momento lineal \mathbf{p} se define como:

$$\mathbf{L} \stackrel{\text{def}}{=} \mathbf{r} \wedge \mathbf{p} \quad (7.16)$$

Para una partícula libre, no solo el momento lineal \mathbf{p} es una constante. También lo es la combinación de las coordenadas y el momento lineal definida en (7.16). En efecto:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{L} = \frac{d}{dt}(\mathbf{r} \wedge \mathbf{p}) = \mathbf{v} \wedge m\mathbf{v} + \mathbf{r} \wedge \frac{d}{dt}\mathbf{p}$$

El 1^{er} término es cero por ser el producto vectorial de dos vectores proporcionales, y el segundo lo es por ser $\dot{\mathbf{p}} = \mathbf{F} = 0$ (partícula libre).

Existen casos en que se conserva el momento angular aunque la partícula esté sometida a una fuerza. Un ejemplo es el problema de Kepler (un planeta en órbita gravitatoria alrededor del Sol). La fuerza en este caso es $\mathbf{F} = -G\frac{mm_{\odot}}{r^2}\mathbf{e}_r$, con lo que tenemos:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{L} = \mathbf{r} \wedge \frac{d}{dt}\mathbf{p} = \mathbf{r} \wedge \mathbf{F} = -G\frac{mm_{\odot}}{r^2}\mathbf{r} \wedge \frac{\mathbf{r}}{r} = 0$$

Aquí la conservación del momento angular se debe a la existencia de una simetría en el problema, y es común a todos los campos de fuerzas centrales, ya que lo único que hemos utilizado es la perpendicularidad entre \mathbf{F} y \mathbf{r} . Esta es una característica general de todos los sistemas dinámicos lagrangianos: *la existencia de una simetría continua implica la existencia de una función de coordenadas y velocidades que se mantiene constante* (constante del movimiento; véase Teorema de Noether).

Ejemplo: Problema de Kepler

Leyes de Kepler:

K1. La órbita de todo planeta es una elipse, con el Sol situado en uno de sus focos.

K2. La línea que une un planeta con el Sol barre áreas iguales en tiempos iguales

K3. El cuadrado del período orbital de un planeta es directamente proporcional al cubo del semieje mayor de su órbita.

La 2^a ley de Kepler es en realidad, como hemos dicho, la conservación del momento angular. En efecto, el área que barre dicha línea por unidad de tiempo es $\frac{1}{2}r\frac{rd\theta}{dt} = \frac{1}{2}r^2\omega = \text{const.}$ Pero $\frac{1}{2}r^2\omega = \left|\frac{1}{2}\mathbf{r} \wedge (\mathbf{r} \wedge \boldsymbol{\omega})\right| = \left|\frac{1}{2}\mathbf{r} \wedge \mathbf{v}\right| = \left|\frac{\mathbf{r} \wedge \mathbf{p}}{2m}\right| = \left|\frac{\mathbf{L}}{2m}\right|$

La 3^a ley depende específicamente de que la fuerza es del tipo $\propto r^{-2}$ (inversa del cuadrado). Suponiendo órbitas circulares para simplificar, dado que $\omega = \frac{2\pi}{T}$, podemos escribir:

$$\frac{mv^2}{r} = G\frac{mm_{\odot}}{r^2} \Rightarrow \frac{r^2\omega^2}{r} = G\frac{m_{\odot}}{r^2} \Rightarrow \frac{r^3}{T^2} = \frac{Gm_{\odot}}{4\pi^2}$$

donde hemos partido de la identificación entre fuerza centrípeta y gravitatoria y el resultado indica que la proporción entre el cubo de la distancia y el cuadrado de los periodos no depende de las condiciones iniciales, y por lo tanto es la misma para cualquier objeto astronómico en una órbita circular.

7.4. Principio de relatividad de Galilei

Al escribir las ecuaciones (7.4), (7.5) y (7.6) podíamos habernos preguntado en qué sistema de referencia son válidas. Es obvio que el concepto de partícula libre definido por estas leyes no cambia si nos vamos a un sistema de referencia que a su vez se mueve con velocidad constante respecto al 1^{er} sistema en el que estas leyes se suponen válidas, pues su velocidad seguirá siendo constante. Si las coordenadas de la partícula en dicho sistema inicial S de origen O son x, y, z , las correspondientes a un sistema S' con origen O' que se desplaza a velocidad constante v respecto al primero en la dirección positiva del eje de las x se transforman según las:

7.4.1. Transformaciones de Galilei

Fue Galileo Galilei el primero en preguntarse cómo correlacionan los distintos observadores las leyes físicas tal como las perciben en su cuadro de referencia en su famoso experimento mental del barco en 1638:

Encerraos con un amigo en la cabina principal bajo la cubierta de un barco grande, y llevad con vosotros moscas, mariposas, y otros pequeños animales voladores [...] colgad una botella que se vacíe gota a gota en un amplio recipiente colocado por debajo de la misma [...] haced que el barco vaya con la velocidad que queráis, siempre que el movimiento sea uniforme y no haya fluctuaciones en un sentido u otro. [...] Las gotas caerán [...] en el recipiente inferior sin desviarse a la popa, aunque el barco haya avanzado mientras las gotas están en el aire[...] las mariposas y las moscas seguirán su vuelo por igual hacia cada lado, y no sucederá que se concentren en la popa, como si cansaran de seguir el curso del barco[...]

Diálogos sobre los dos máximos sistemas del mundo

GALILEO GALILEI

La observación anterior que Galilei pone en boca de Salvatius se expresa matemáticamente como:

$$\begin{aligned}x' &= x - vt \\y' &= y \\z' &= z \\t' &= t\end{aligned}$$

Es decir, la lectura que ambos observadores en movimiento relativo uniforme hacen de las coordenadas (obsérvese que incluimos el tiempo como una coordenada más) se reduce a la adición de un “término de arrastre” proporcional al tiempo transcurrido, que ha de contarse igual en ambos sistemas de referencia (véase fig. 7.1). Si v tiene una dirección arbitraria, pueden escribirse de forma más general como:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{v}t$$

Y por último, si ambos observadores se diferencian además en un cambio de orientación (rotación) constante de matriz de rotación R_{ij} y una traslación constante que indica su separación vectorial en el instante $t=0$, sus observaciones de las coordenadas se relacionan mediante la expresión más general de un elemento del grupo de Galilei (véase más adelante).

Es inmediato ver que la 2ª ley de Newton sigue cumpliéndose si decretamos que tanto la masa como el vector de fuerza no cambian bajo las transformaciones de Galilei; esto es, $\mathbf{F}'(\mathbf{r}') = \mathbf{F}(\mathbf{r})$:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \mathbf{F}'(\mathbf{r}') = m \frac{d^2 \mathbf{r}'}{dt'^2} = m \frac{d^2}{dt'^2} (\mathbf{r} - \mathbf{v}t) = m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2}$$

7.4.2. Grupo de Galilei

Las transformaciones más generales que preservan las ecuaciones de Newton constituyen un grupo. Un elemento cualquiera del grupo de Galilei está caracterizado por 9 parámetros reales, y la transformación más general de este tipo se da en términos de una rotación (3 parámetros) y un desplazamiento del origen de coordenadas a velocidad constante (otros 3 parámetros), a los que se añade una traslación arbitraria fija del origen de coordenadas, \mathbf{r}_0 , y se escribe:

$$\mathbf{r}' = R\mathbf{r} - \mathbf{v}t + \mathbf{r}_0$$

Veamos que en efecto esta ley de transformación constituye un grupo.

$$\mathbf{r}' = R_1\mathbf{r} - \mathbf{v}_1t + \mathbf{r}_1$$

$$\mathbf{r}'' = R_2\mathbf{r}' - \mathbf{v}_2t + \mathbf{r}_2$$

La composición de las dos transformaciones de parámetros respectivos $(R_1, \mathbf{v}_1, \mathbf{r}_1)$ y $(R_2, \mathbf{v}_2, \mathbf{r}_2)$ está dada por:

$$\mathbf{r}'' = R_2\mathbf{r}' - \mathbf{v}_2t + \mathbf{r}_2 = R_2(R_1\mathbf{r} - \mathbf{v}_1t + \mathbf{r}_1) - \mathbf{v}_2t + \mathbf{r}_2 = R_2R_1\mathbf{r} - R_2\mathbf{v}_1t + R_2\mathbf{r}_1 - \mathbf{v}_2t + \mathbf{r}_2$$

La composición da unos valores para los parámetros de rotación R_{ij} , arrastre o *boost* \mathbf{v} y traslación constante \mathbf{r}_0 :

$$R = R_2R_1$$

$$\mathbf{v} = -R_2\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2$$

$$\mathbf{r}_0 = R_2\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2$$

La inversa de una transformación galileana de parámetros $(R, \mathbf{v}, \mathbf{r}_0)$ es la transformación de parámetros $(R^{-1}, -R^{-1}\mathbf{v}, -R^{-1}\mathbf{r}_0)$. La transformación identidad tiene los parámetros $(I, \mathbf{v} = 0, \mathbf{r}_0 = 0)$, donde I representa a la matriz identidad.

7.5. Limitaciones a las leyes de Newton impuestas por la electrodinámica

Antes de llegar a las limitaciones más fundamentales que llevaron a la formulación de la Mecánica Cuántica, la mecánica newtoniana se topó con diversas dificultades que llevaron a Einstein, Lorentz, Poincaré y Minkowski a construir la Teoría Especial de la Relatividad,

que es el marco geométrico en el que se encuadra la electrodinámica. Sorprendentemente, la generalización de todos los conceptos dinámicos, como fuerza, energía o momento lineal es casi inmediata. Incluso la ley del movimiento (la segunda ley de Newton) sobrevive a esta generalización.

Existen varios conceptos y principios en la mecánica de Newton que han resultado ser obstáculos irresolubles para cualquier descripción que pretenda ser más detallada o menos ingenua de la realidad física debido a simplificaciones excesivas que solo con el paso de varios siglos llegaron a solventarse, al menos parcialmente. Los más relevantes son:

- *Autofuerza*: La fuerza que ejerce una partícula sobre sí misma no es estrictamente nula. Es necesario algún tipo autofuerza para explicar la reacción de la radiación. Dado que un electrón acelerado radía ondas electromagnéticas, es necesario que se frene espontáneamente para dar cuenta del hecho obvio de que no puede radiar indefinidamente. Este problema lo trata rigurosamente la Electrodinámica Cuántica.
- *Propagación de las interacciones a velocidad finita*: El principio de acción y reacción requiere que una partícula detecte instantáneamente el cambio de posición de otra que se halla en su presencia para que el balance entre acción y reacción se mantenga todo el tiempo. Este problema lo trata rigurosamente la electrodinámica al incluir el campo electromagnético en el balance de las cantidades conservadas. De forma más rigurosa y consistente con nuestro conocimiento actual de las leyes fundamentales de la Naturaleza, que no pueden ignorar la Mecánica Cuántica, este problema es resuelto por la Electrodinámica Cuántica.
- *La rigidez de los sólidos es incompatible con la causalidad relativista*. En efecto, para que las distancias se mantengan constantes en presencia de interacciones que tienden a desplazar los cuerpos como un todo, una repentina aceleración de una de sus partes tendría que propagarse a velocidad infinita a través del cuerpo para que se acelere como un todo consistentemente con la ligadura de distancia constante.
- *El concepto de partícula puntual es inconsistente con la electrodinámica*. En realidad, ningún modelo de partícula rígida es consistente con las simetrías de la electrodinámica. En un primer intento de resolver este problema, podría pensarse que lo más natural es suponer que el electrón (y cualquier partícula elemental, por el mismo motivo) es una especie de sustancia continua con propiedades elásticas. Henri Poincaré trató de dar base matemática a esta imagen mediante su modelo de electrón extenso con fuerzas de cohesión interna (llamadas fuerzas de Poincaré), pero la imagen correcta según los principios cuánticos es que la entidad matemática que representa al electrón es lo que se llama un campo cuántico relativista, el paradigma teórico sobre el que se basa la moderna Teoría Cuántica de Campos.

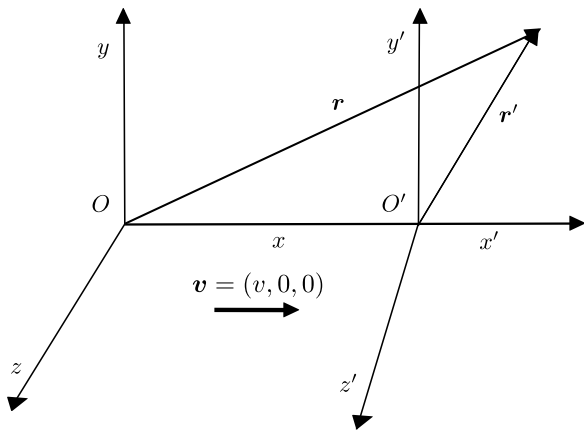


Figura 7.1: Las observaciones de la coordenada x leída por los observadores O y O' se diferencian en un término que aumenta proporcionalmente al tiempo.

Capítulo 8

SISTEMAS DINÁMICOS

8.1. Sistemas de partículas. Sólido rígido y mecánica del continuo

Hasta ahora hemos hablado únicamente de la dinámica de puntos materiales o partículas puntuales.

Reduccionismo mecánico:

Principio del reduccionismo mecánico: Es posible dividir un sistema físico en subsistemas más pequeños identificando los términos correspondientes de fuerza y posición (y de estos últimos, los derivados de velocidad y aceleración) sobre las partes constituyentes correspondientes.

8.1.1. Centro de masa de un sistema de partículas

Consideremos un sistema de N partículas materiales, de vectores de posición respectivos $r_1(t), r_2(t) \dots, r_N(t)$. Se define su centro de masa como:

$$\mathbf{r}_{\text{CM}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\sum_{i=1}^N m_i \mathbf{r}_i}{\sum_{i=1}^N m_i} \quad (8.1)$$

Es decir, el centro de masa no es más que la media ponderada vectorial de las posiciones de cada una de las partículas que integran el sistema. Dicha media está ponderada en proporción a la masa, de tal manera que si duplicamos la masa de una de las partículas, contribuirá el doble en el nuevo promedio.

8.1.2. Momento lineal, energía y momento angular de un sistema de partículas

$$\mathbf{P} = \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{v}_i$$

$$E = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m_i v_i^2 + \sum_{i=1}^N V_i^{(\text{ext})}(\mathbf{r}_i) + \sum_{i,j=1}^N V_{ij}(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$$

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \wedge \mathbf{p}_i$$

8.1.3. Fuerzas exteriores y fuerzas internas. Dinámica del centro de masa

Para un sistema de partículas, supongamos que podemos distinguir para cada partícula la fuerza exterior ejercida por ciertas interacciones externas $\mathbf{F}_i^{(\text{ext})}$ y las fuerzas mutuas que se pueden agrupar en pares \mathbf{F}_{ji} . \mathbf{F}_{ji} se lee como "fuerza ejercida por la partícula j -ésima sobre la partícula i -ésima. La 3ª ley de Newton para la partícula i -ésima se escribe:

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{F}_i^{(\text{ext})} + \sum_{j=1}^N \mathbf{F}_{ji} \quad (8.2)$$

Sumando en i :

$$\sum_{i=1}^N m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i^{(\text{ext})} + \sum_{i,j=1}^N \mathbf{F}_{ji}$$

Pero en la suma $\sum_{i,j=1}^N \mathbf{F}_{ji}$, y para cualquier elección del par i, j tenemos un término correspondiente con los índices permutados. Es decir:

$$\sum_{i,j=1}^N \mathbf{F}_{ji} = \sum_{1=i<j}^N (\mathbf{F}_{ji} + \mathbf{F}_{ji}) = 0$$

Un corolario inmediato de la 3ª ley de Newton es que no existen las autofuerzas; es decir $\mathbf{F}_{ii} = 0$. Véase la sección Limitaciones a las leyes de Newton impuestas por la electrodinámica.

Si llamamos $\sum_{i=1}^N m_i = M$ (masa total del sistema de partículas), entonces:

$$\sum_{i=1}^N m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \frac{d^2}{dt^2} \left(\sum_{i=1}^N m_i \mathbf{r}_i \right) = \frac{d^2}{dt^2} M \mathbf{r}_{\text{CM}} = M \frac{d^2 \mathbf{r}_{\text{CM}}}{dt^2}$$

Por lo que se deduce:

$$M \frac{d^2 \mathbf{r}_{\text{CM}}}{dt^2} = \sum_{i=1}^N \mathbf{F}_i^{(\text{ext})} \quad (8.3)$$

que es la segunda ley de Newton aplicada al centro de masa del sistema y donde las fuerzas internas han desaparecido y el término \mathbf{F} que aparece es la resultante de las fuerzas exteriores. Este teorema es el que justifica que a cierto nivel de descripción podamos olvidarnos de la estructura interna de los sistemas mecánicos y estudiar su movimiento como un todo.

Existe un resultado paralelo para el momento angular. Multipliquemos la ecuación de Newton para la partícula i -ésima 8.2 vectorialmente por \mathbf{r}_i y sumemos en i :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \wedge m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} &= \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \wedge \mathbf{F}_i^{(\text{ext})} + \sum_{i,j=1}^N \mathbf{r}_i \wedge \mathbf{F}_{ji} = \\ &= \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \wedge \mathbf{F}_i^{(\text{ext})} + \sum_{1=i<,j}^N \mathbf{r}_i \wedge (\mathbf{F}_{ji} + \mathbf{F}_{ij}) \end{aligned}$$

Manipulando los índices i y j en el segundo término:

$$\sum_{1=i<,j}^N \mathbf{r}_i \wedge (\mathbf{F}_{ji} + \mathbf{F}_{ij}) = \sum_{1=i<,j}^N (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \wedge \mathbf{F}_{ij}$$

Esto no es más que la suma de los pares de fuerzas internos. Si llamamos momento de las fuerzas externas a:

$$\mathbf{M}^{(\text{ext})} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \wedge \mathbf{F}_i^{(\text{ext})}$$

tenemos un resultado bastante lógico: que el momento total de todas las fuerzas es la resultante de los momentos externos más la de los internos:

$$\sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \wedge m_i \frac{d^2 \mathbf{r}_i}{dt^2} = \mathbf{M}^{(\text{ext})} + \sum_{1=i<,j}^N (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \wedge \mathbf{F}_{ij} \quad (8.4)$$

Observación: el 1^{er} término depende de la elección del origen, pero el segundo término es independiente de tal elección.

8.1.4. Sólido rígido

Un sólido rígido es un sistema de partículas sometido a la ligadura de que la distancia entre dos cualesquiera de estas partículas permanece constante:

$$|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j| = \text{const.}$$

Un sistema con estas características define un campo de velocidades $\mathbf{v} = \mathbf{v}(\mathbf{r})$ cuando el movimiento se refiere a un punto fijo cualquiera del sólido, ya que fijada la posición de este punto, lo único que pueden hacer los demás puntos del sólido es rotar respecto al mismo. El campo de velocidades definido por un sólido rígido es:

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\omega} \wedge \mathbf{r} \quad (8.5)$$

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \wedge m_i \mathbf{v}_i = \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \wedge (m_i \boldsymbol{\omega} \wedge \mathbf{r}_i)$$

donde hemos utilizado el campo rotacional de velocidades (8.5) para expresar la velocidad de la partícula i -ésima. Usando la identidad $\mathbf{a} \wedge (\mathbf{b} \wedge \mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})$, tenemos:

$$\sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \wedge (m_i \boldsymbol{\omega} \wedge \mathbf{r}_i) = \sum_{i=1}^N m_i \mathbf{r}_i \wedge (\boldsymbol{\omega} \wedge \mathbf{r}_i) = \sum_{i=1}^N m_i [r_i^2 \boldsymbol{\omega} - \mathbf{r}_i (\mathbf{r}_i \cdot \boldsymbol{\omega})]$$

Lo que hemos demostrado es que el momento angular de un sólido rígido referido a su centro de masa es proporcional a la velocidad angular $\boldsymbol{\omega}$, es decir, es lineal en $\boldsymbol{\omega}$, pero no necesariamente tiene la misma dirección. Esta relación de linealidad genérica es lo que se conoce en matemáticas como una expresión matricial. En una notación más compacta:

$$\boxed{\mathbf{L} = I \boldsymbol{\omega}} \quad (8.6)$$

donde:

$$I \stackrel{\text{def}}{=} \begin{pmatrix} \sum_i m_i (r_i^2 - x_i^2) & -\sum_i m_i x_i y_i & -\sum_i m_i x_i z_i \\ -\sum_i m_i x_i y_i & \sum_i m_i (r_i^2 - y_i^2) & -\sum_i m_i y_i z_i \\ -\sum_i m_i x_i z_i & -\sum_i m_i y_i z_i & \sum_i m_i (r_i^2 - z_i^2) \end{pmatrix}$$

es la *matriz de inercia* del sólido rígido. No es difícil demostrar, con un poco de gimnasia de índices, que la energía cinética de rotación de un sólido rígido es:

$$\boxed{K_{\text{rot}} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\omega}^T I \boldsymbol{\omega}} \quad (8.7)$$

Capítulo 9

DINÁMICA ANALÍTICA

9.1. Espacio de fases

9.1.1. Dinámica analítica. Coordenadas y fuerzas generalizadas. Ligaduras

En los siglos XVIII y XIX la mecánica recibió un impulso considerable que la separó de la formulación inicial intuitiva y fácilmente visualizable de Newton, basada en conceptos como fuerza, momento lineal y angular, etc. Esta nueva formulación es lo que se conoce como dinámica analítica, y se debe fundamentalmente a los trabajos de Lagrange, Euler, Poisson, Hamilton y otros, muchos de ellos matemáticos preocupados en dar generalidad al formalismo de la mecánica y crear herramientas matemáticas para su estudio que permitieran simplificar problemas complejos, así como investigar relaciones geométricas que pudieran estar implícitas en la consideración de los sistemas dinámicos como variedades diferenciables y que no serían evidentes en la formulación vectorial de Newton. Conviene recordar que el formalismo de Newton todavía no era usado en la forma vectorial invariante impuesta por Oliver Heaviside en el siglo XIX, y las ecuaciones se escribían en coordenadas, con la aparatosisidad que esto supone. Otra cuestión de singular importancia en esta nueva expresión de la mecánica es el énfasis en el aspecto *local* de las leyes de la física, lo que se manifiesta en el abundante uso de relaciones expresadas en términos de *transformaciones infinitesimales*, es decir, de las relaciones entre las variables físicas en el entorno de un punto.

La idea inicial de la dinámica analítica es eliminar las variables de la mecánica que no intervienen explícitamente en las leyes del movimiento debido a que están sujetas a ligaduras, siendo por tanto ignorables.

El ejemplo más inmediato es el péndulo simple: una partícula moviéndose en un plano y fijada al extremo de una cuerda bajo una energía potencial gravitatoria $V(x, y)$.

La mecánica de Newton describe este caso como:

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= -\frac{\partial V}{\partial x} \\ m\ddot{y} &= -\frac{\partial V}{\partial y} \end{aligned}$$

La dinámica analítica de Lagrange se basa en observar que basta la asignación de una sola

variable, el ángulo θ , para describir el movimiento del sistema.

$$\begin{aligned}x &= l \cos \theta \\y &= l \sin \theta\end{aligned}$$

Coordenadas generalizadas

Fuerzas generalizadas

$$Q_j \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{\partial V}{\partial q_j}$$

La clave del método de Lagrange es observar que las fuerzas que obligan al sistema a permanecer sujeto a una ligadura especialmente simple, llamada holónoma, no realizan trabajo.

$$\delta W = \sum_j \frac{\partial K}{\partial q_j} \delta q_j$$

El método de Lagrange se basa en la construcción de una función llamada función lagrangiana del sistema. Es la diferencia entre la energía cinética y la energía potencial:

$$L = K - V = \frac{1}{2}ml^2\dot{\theta}^2 - V(l \cos \theta, l \sin \theta)$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} - \frac{\partial L}{\partial \theta} = 0$$

Expresamos ahora, por ejemplo, la energía potencial gravitatoria $V = mgy = mgl \cos \theta$, lo que da:

$$ml^2\ddot{\theta} - mgl \sin \theta$$

que es la ecuación del péndulo.

9.1.2. Espacio de fases de un sistema dinámico

9.2. Principio de conservación de la información

Cuando la mecánica se expresa en función de las llamadas variables canónicas (posición y momento generalizados), emerge un principio tan profundo de la dinámica que raras veces se expresa explícitamente. Es lo que el físico Leonard Susskind ha acuñado como *principio de conservación de las distinciones*. Existen otras formas de frasear este principio: principio de conservación de la entropía microscópica (o de grano fino), o más rigurosamente quizá, teorema de Liouville. Lo que viene a decir es que *condiciones dinámicas diferentes permanecen diferentes en el transcurso de la evolución temporal*.

9.2.1. Ecuaciones de Hamilton

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} \quad (9.1)$$

$$\dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} \quad (9.2)$$

9.2.2. Paréntesis de Poisson y conexiones con la Mecánica Cuántica

$$\{A(p, q), B(p, q)\} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_j \left(\frac{\partial A}{\partial q_j} \frac{\partial B}{\partial p_j} - \frac{\partial B}{\partial q_j} \frac{\partial A}{\partial p_j} \right)$$

$$\begin{aligned} \dot{A} &= \frac{\partial A}{\partial t} + \sum_j \left(\frac{\partial A}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial A}{\partial p_j} \dot{p}_j \right) = \frac{\partial A}{\partial t} + \sum_j \left(\frac{\partial A}{\partial q_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial A}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial q_j} \right) = \\ &= \frac{\partial A}{\partial t} + \{A, H\} \end{aligned}$$

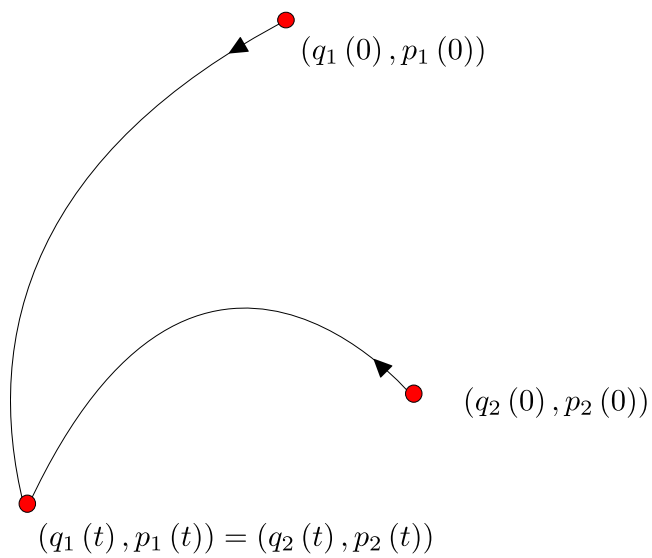


Figura 9.1: Conservación de las distinciones. Dos condiciones iniciales para la coordenada q y su momento asociado p no pueden en ningún instante cruzarse en el curso de la evolución temporal. *En la imagen se representa una situación imposible en mecánica.*

Parte III
EL SUEÑO DE EINSTEIN

Ubi materia, ibi geometria.

J.Kepler [10]

Capítulo 10

RELATIVIDAD RESTRINGIDA

10.1. Introducción

Los orígenes de la Relatividad restringida, también llamada Relatividad especial, se hallan en los éxitos conseguidos por la teoría electromagnética de Maxwell en el siglo XIX.

Los experimentos diseñados para hallar la velocidad de la luz en el vacío que surgía de las ecuaciones de onda de **Maxwell** para el campo electromagnético, parecían indicar que ésta era siempre la misma independientemente del estado de movimiento del emisor. Estos hechos, unidos a la desestimación experimental del llamado "éter luminífero", condujeron a los físicos a pensar lo inevitable: la incorrección de la mecánica newtoniana establecida dos siglos atrás.

Como es costumbre en la historia de la ciencia, primero se intentaron hacer algunas mejoras adicionales pequeñas, y los primeros intentos se deben al irlandés **G.F. Fitzgerald** y al holandés **H.A. Lorentz** en 1892. Pero fue Albert Einstein el que en 1905, su conocido "annus mirabilis" ("año milagroso"), resolvió el problema mediante una revisión profunda de los conceptos de espacio, tiempo y energía en su famoso artículo "Zur Elektrodynamik bewegener Körper" ("Sobre la electrodinámica de los cuerpos en movimiento") en el número 17 de la revista alemana *Annalen der Physik*.

10.2. El éter luminífero

En aquel momento lógicamente nadie había tenido ningún problema al hablar de conceptos como la velocidad del sonido al relacionarlos con la ley de adición de velocidades de Galileo (relatividad galileana). El sonido siempre se propaga con una velocidad relativa al aire, y las propiedades de éste pueden ser estudiadas, además de por la propagación del sonido, por los más diversos métodos físicos y químicos de investigación. Es decir, en general, cuando decimos que la velocidad del sonido tiene un cierto valor, sabemos que en realidad medimos la velocidad de una onda con relación al medio en el que se propaga. El sonido no se propaga en el vacío.

Sin embargo, ¿qué ocurre con la velocidad de la luz? Las ecuaciones de Maxwell le confieren un valor determinado, de $c=300.000$ km/s aproximadamente, en cuanto a su propagación en el vacío. Sin embargo, la relatividad galileana exige un sistema de referencia en reposo respecto

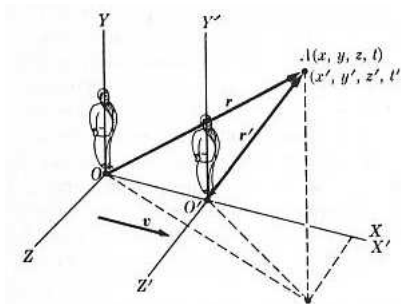


Figura 10.1: Movimiento relativo al éter

del cual podamos definir esa velocidad de propagación, y para todos los sistemas móviles respecto a él habría que aplicar las conocidas **transformaciones de Galileo**. Por ejemplo, las coordenadas y los tiempos que se deben medir en un sistema móvil (x', y', z', t') que se mueve alejándose en la dirección x con velocidad constante v respecto de un sistema en reposo (x, y, z, t) (figura 10.1) serían:

$$\left. \begin{aligned} x' &= x - vt \\ y' &= y \\ z' &= z \\ t' &= t \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \text{Transformaciones} \\ \text{de Galileo} \end{array}$$

Parecía entonces urgente encontrar ese sistema de reposo absoluto respecto al vacío en donde estaban bien definidas las ecuaciones de Maxwell. En este laboratorio la luz se propagaría en todas direcciones con igual velocidad c , y en cualquier otro laboratorio debería haber desviaciones. Es por esto que los físicos, tomando prestado un término aristotélico, introdujeron el concepto del *éter* como el sustrato cuyas vibraciones se manifestaban en forma de luz y por el que todos los cuerpos se podían mover libremente. Sería este el sistema de reposo absoluto respecto al vacío.

Sin embargo, la hipótesis del éter parecía ser bastante arbitraria y provocaba más de un interrogante. Parecía no intervenir en ningún proceso físico y ser absolutamente indetectable. Además, no debería infligir a los cuerpos ninguna clase de rozamiento. Los físicos ya antes habían tenido experiencias infructuosas al introducir el *flogisto* y el *calórico* para explicar las combustiones y algunos fenómenos térmicos.

Aunque algunos físicos ya intuían la futilidad de este concepto, se hacía necesario diseñar algún experimento para confirmarlo o deshecharlo.

10.3. El experimento de Michelson

El primero en realizar un experimento que confirmara la teoría del éter fue el físico americano de origen polaco **Albert Abraham Michelson** en 1881. Lo que se pretendía medir era la diferencia entre los recorridos de la luz dependiendo de su dirección respecto a un laboratorio móvil respecto al éter. ¿Y qué mejor laboratorio móvil que nuestro propio planeta? Además con una velocidad bastante importante, de unos 30 km/s en su órbita alrededor del

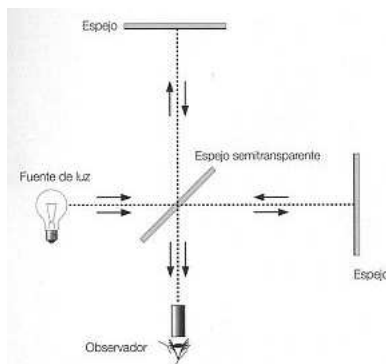


Figura 10.2: Experimento de Michelson

Sol (prescindimos del movimiento de rotación que tiene una velocidad de medio kilómetro por segundo aproximadamente).

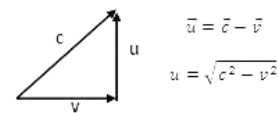
Por tanto, considerando pues que la Tierra se mueve con una velocidad v respecto al éter de forma rectilínea (en la ínfima parte de un segundo que requerirá nuestro experimento, se puede decir que la Tierra se mueve respecto al éter con movimiento rectilíneo uniforme), el recorrido que hará la luz en ir desde una fuente luminosa situada a la izquierda hasta un espejo en la derecha a una longitud L de distancia y volver, siempre en la dirección de v , será:

$$t_1 = \frac{L}{c-v} + \frac{L}{c+v} = \frac{2cL}{c^2-v^2} = \frac{2L}{c} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1} \approx \frac{2L}{c} \left(1 + \frac{v^2}{c^2}\right)$$

Al principio físicos como Maxwell pensaban que esta desviación del orden de $v^2/c^2 = 10^{-8}$ no se podría medir experimentalmente, sin embargo Michelson empezó a pensar en un método que le permitiese conseguirlo. Y en 1881 diseñó su primer experimento, con el interferómetro que se muestra en la figura 10.2.

La luz procedente de una fuente incide sobre una lámina de cristal inclinada que posee una capa de cristal semitransparente en su cara anterior y está situada a una distancia L de dos espejos. Esta lámina divide a la luz en dos partes. Una la atraviesa y llega al espejo de la derecha y a la vuelta se refleja y llega al observador (telescopio). La otra va por reflexión al espejo de arriba y vuelve atravesándola otra vez hasta el observador, pasando antes por una lámina de compensación para conseguir la simetría óptica (que los dos haces pasen por el mismo espesor de cristal).

En cuanto al haz vertical, aplicando cálculo vectorial básico tendrá una velocidad respecto al éter de $u = \sqrt{c^2 - v^2}$. por tanto el tiempo que emplea este haz será por su parte:



$$t_2 = \frac{2L}{\sqrt{c^2 - v^2}} = \frac{2L}{c} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2} \approx \frac{2L}{c} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{v^2}{c^2}\right)$$

Figura 10.3: Velocidad respecto al éter para el haz vertical

y por tanto la diferencia de tiempos de los dos rayos será:

$$\Delta t = t_1 - t_2 = \frac{2L}{c} \left(\frac{v^2}{c^2} - \frac{1}{2} \frac{v^2}{c^2}\right) = \frac{Lv^2}{c^3}$$

Esta diferencia de tiempos ha de detectarse observando la interferencia de los dos haces de luz. Debido a la dificultad que supone conseguir que los dos trayectos sean de la misma longitud con la precisión requerida, se observa el diagrama interferencial de los dos haces y luego se hace girar el aparato completo 90° . La rotación produce una diferencia de tiempos como la anterior para cada haz. La diferencia de tiempo total de $2\Delta t$ es equivalente a una diferencia de trayectos de $2c\Delta t$. Las franjas de interferencia observadas en la primera orientación deberán así desplazarse en un número de franjas δ dado por:

$$\delta = \frac{2c\Delta t}{\lambda} = \frac{2L v^2}{\lambda c^2} = \frac{2(v/c)^2}{\lambda/L}$$

en donde λ es la longitud de onda de la luz utilizada. Los valores de L y c también son conocidos, pero, ¿qué valor deberemos dar a v ? Ya hemos dicho que se había aceptado para ello la velocidad de la Tierra en su órbita, de unos 30 km/s, lo que hacía que $v/c \approx 10^{-4}$. En el primer intento de Michelson en 1881 los demás valores eran $\lambda \approx 6 \times 10^{-7} \text{ m}$ y $L = 1,2 \text{ m}$, se tiene que $\lambda/L \approx 5 \times 10^{-7}$. Por tanto el corrimiento debía ser de $\delta \approx 0,04$ franjas. Este efecto es muy pequeño, pero podría haberse observado de no ser que, para sorpresa de Michelson, no hubo ningún corrimiento de franjas. En la presentación de su resultado se puede leer: "El resultado de la hipótesis de la existencia de un éter estacionario demuestra, por tanto, que es incorrecto".

Este resultado era tan inesperado y tan difícil de explicar que condujo a renovados esfuerzos, en especial por parte del gran físico holandés H.A. Lorentz, quien para reconciliarlo con otros fenómenos ópticos propuso una teoría de acuerdo con la cual podría existir un arrastre parcial del éter por parte de la Tierra. Era oportuna una repetición más precisa del experimento y **Lord Rayleigh** escribió a Michelson urgiéndole a que la realizara. Así fue cómo Michelson, ahora en colaboración con **E. W. Morley**, emprendió una investigación mucho más precisa, basada en caminos ópticos unas 10 veces más largos que en el primer experimento. El corrimiento esperado ahora era de unas 0,4 franjas, pero en los resultados obtenidos se observó un corrimiento de unas 0,005 franjas a lo sumo. Esta versión refinada del experimento, llevada a cabo en 1887, es considerada como uno de los pilares experimentales básicos sobre los que descansa la Relatividad Especial.

10.4. Principio de relatividad

A pesar del resultado del experimento de Michelson, los físicos se aferraban a la idea del éter, un sistema de referencia en reposo absoluto. El irlandés G.F.Fitzgerald y el holandés H.A. Lorentz independientemente propusieron la idea de que lo que se producía era una contracción real de la longitud de los cuerpos según la dirección en que se mueven a través del éter, y además esa contracción en la dirección de la velocidad tendría que valer exactamente $(1 - v^2/c^2)^{1/2}$ para explicar el hecho de que el corrimiento de franjas era nulo.

No obstante, se podía intuir que esto era una explicación *ad hoc* un poco forzada. Fue Einstein el que pudo dar una explicación natural retomando un principio clásico de la Física, el principio de relatividad de Galileo:

Relatividad de Galileo. Todas las leyes de la Dinámica deben ser las mismas para todos los observadores inerciales, moviéndose con velocidad constante unos con respecto a otros.

Einstein sabía que este principio era sobre el que debía descansar la Física, por su belleza y simpleza. Y quería extenderlo a los nuevos fenómenos físicos descubiertos en Óptica. Empezó a imaginarse qué ocurriría si se viajara en un rayo de luz a velocidad constante y supusiéramos que el viajero debería ver la misma física que el observador en reposo. Y fue entonces cuando se dio cuenta de que si se aceptaban las transformaciones de velocidad de Galileo aquello no podía funcionar. El viajero en la luz debería ver un campo electromagnético estático, cosa que no existía en la teoría electromagnética. La luz por tanto debería seguir moviéndose a la velocidad descrita por las ecuaciones de Maxwell. Esto fue lo que le condujo a enunciar su principio de relatividad, añadiendo la constancia de la velocidad de la luz.

Relatividad de Einstein.

- 1.- La velocidad de la luz en el espacio libre, c , es una constante de la Naturaleza, independiente del estado de movimiento de la fuente.
- 2.- Todas las leyes de la Naturaleza (no solamente de la Dinámica) deben ser las mismas para todos los observadores inerciales moviéndose con velocidad constante unos con respecto a otros.

Una vez así aceptada como ley natural la constancia de la velocidad de la luz, el principio de relatividad restringida reafirmaba las leyes del electromagnetismo. Pero el precio a pagar era, sin embargo, una revisión de la mecánica newtoniana que haría cambiar dramáticamente nuestra concepción del espacio y, sobretodo, del tiempo.

10.5. Simultaneidad. Espacio de Minkowski

Una vez admitidos estos postulados, Einstein se dio cuenta de sus implicaciones. Una de las más asombrosas era que el concepto de simultaneidad dejaba de tener sentido, o al menos sólo lo tenía cuando se comparaban dos relojes en reposo. El tiempo era, pues, relativo.

En efecto, imaginemos un tren que se mueve a velocidad constante en cuyo vagón central hay una fuente de luz, y supongamos que en el primer y último vagón hay instaladas unas puertas que se abren al recibir esa luz. Lógicamente, para un observador situado en el centro del tren las dos puertas se abrirán simultáneamente. Pero, qué es lo que verá un observador situado en el andén si la fuente se enciende a su paso? Recordemos

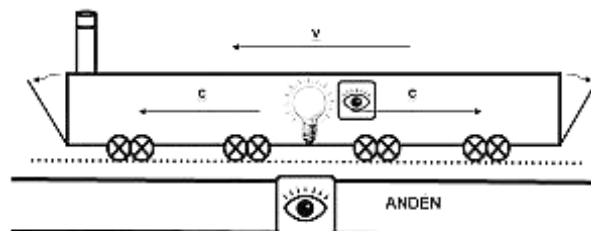


Figura 10.4: La relatividad de la simultaneidad

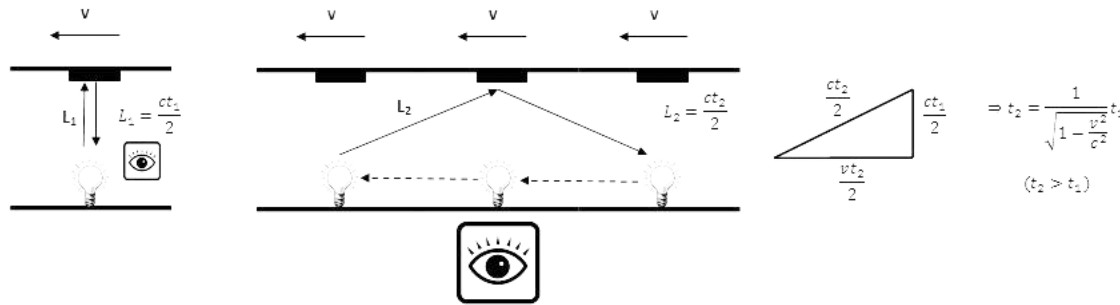


Figura 10.5: Relatividad de la duración

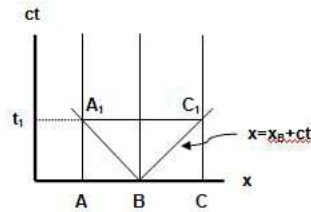


Figura 10.6: Tren en reposo

que la velocidad de la luz respecto a él tiene exactamente el mismo valor que respecto al viajero. De aquí se deduce que, dado que las traseras del tren van al encuentro del rayo de luz, este observador verá la puerta trasera abrirse antes que la delantera y, por tanto, para él los sucesos no serán simultáneos.

Todavía, no obstante, se pueden obtener consecuencias más chocantes. si imaginamos que el mismo pasajero del vagón tiene una linterna que apunta a un espejo en el techo, la trayectoria de la luz para él será una línea vertical hacia arriba y de vuelta hacia abajo y si usa un cronómetro muy preciso, el tiempo que mide será $t_1 = L_1/c$. Sin embargo, para el observador del andén, la trayectoria de la luz, al estar el tren en movimiento, será mayor, $L_2 > L_1$, consistirá en dos líneas oblicuas de ida y vuelta, y por tanto medirá un tiempo mayor, $t_2 = L_2/c$ (figura 10.5). De lo que se deduce que, si estos dos observadores se citan un día podrán constatar que para el que estuvo en movimiento pasó menos tiempo que para el que estuvo en reposo. ¡Los relojes en movimiento se atrasan inevitablemente!

Para clarificar los conceptos asociados a la Relatividad Especial fueron de mucha utilidad los gráficos introducidos en 1908 por el matemático alemán Hermann Minkowski. Según este sistema, si llamamos A y C a los puntos extremos del primer tren y B donde se ubica la fuente de luz, tendremos definida una "superficie" de simultaneidad como A_1C_1 , que para el caso de un tren en reposo será como en la figura 10.6. Obsérvese que las llamadas líneas de universo de un objeto en reposo son rectas verticales y las de un rayo de luz son paralelas a las bisectrices de los ejes.

Para el caso en que A , B y C estén en movimiento, las líneas de A y C estarán ahora inclinadas y los sucesos no serán simultáneos en el sistema en reposo (figura 10.7).

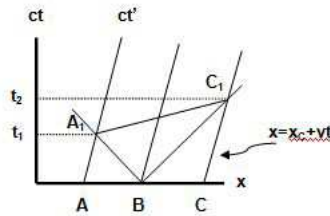


Figura 10.7: Tren en movimiento

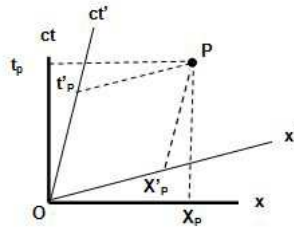


Figura 10.8: Sistemas inerciales

Hay que tener en cuenta que estos diagramas se han hecho bidimensionales por comodidad, pero en realidad tendríamos siempre tres dimensiones espaciales y la temporal. Para un suceso dado P podemos dar sus coordenadas en cualquiera de los sistemas inerciales mediante las líneas oblicuas anteriormente explicadas. En la figura 10.8 tenemos el caso de dos sistemas de coordenadas superpuestos, uno con velocidad v respecto al otro.

10.6. Transformaciones de Lorentz

Vamos a buscar las relaciones entre los diferentes sistemas inerciales. Si suponemos que cuando los dos sistemas coinciden se emite un rayo de luz, para ambos sistemas este rayo tendrá la ecuación de la bisectriz $x = ct$ o $x' = ct'$.

Para el observador en reposo, el origen del sistema de coordenadas en movimiento se ve lógicamente con la trayectoria $OO' = vt$, luego lo que buscamos serán unas transformaciones simétricas de la forma:

$$\begin{aligned} x' &= \gamma(x - vt) \\ x &= \gamma(x' + vt') \end{aligned}$$

de forma que si $x' = 0$ el desplazamiento sea el del origen $x = vt$. Si sustituimos la expresión del rayo luminoso y eliminamos las dos variables temporales:

$$\left. \begin{aligned} ct &= \gamma(c + v)t' \\ ct' &= \gamma(c - v)t \end{aligned} \right\} \Rightarrow \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

Y una vez obtenidas estas ecuaciones podemos deducir también las relaciones para los tiempos:

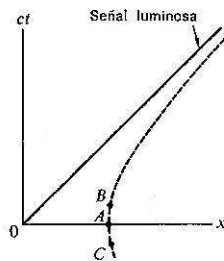


Figura 10.9: Invariante espacio-tiempo

$$t = \gamma(t' + vx'/c^2)$$

$$t' = \gamma(t - vx/c^2)$$

Y podemos ya escribir las **transformaciones de Lorentz** de la Relatividad Restringida:

$$\left. \begin{array}{l} x' = \gamma(x - vt) \\ y' = y \\ z' = z \\ t' = \gamma(t - vx/c^2) \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{Transformaciones} \\ \text{de Lorentz} \end{array} \quad \text{con } \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

llamados así debido a que el primero en introducirlas fue Lorentz en 1904 para explicar el resultado del experimento de Michelson, aunque fue Albert Einstein el que les dio su verdadero significado.

Es fácil comprobar que estas transformaciones son las de Galileo a bajas velocidades y que definen el llamado **invariante espacio-tiempo**:

$$s^2 = (ct)^2 - (x)^2 = (ct')^2 - (x')^2$$

en donde por comodidad hemos vuelto al caso unidimensional. Este invariante nos proporciona un método para "calibrar" los diagramas de Minkowsky, como se muestra en la figura 10.9, de forma que la hipérbola rectangular:

$$x^2 - (ct)^2 = 1$$

nos definirá una distancia unidad para todos los ejes inerciales, es decir, es el lugar geométrico en el espacio-tiempo de todos los sucesos que representan el tiempo cero y la coordenada x igual a la unidad en sistemas inerciales diferentes.

Obsérvese que en este último caso $s^2 = -1$, ¿cómo se puede interpretar este invariante? Podemos denominarlo intervalo entre dos sucesos en el espacio-tiempo; se hace nulo para aquellos sucesos conectados mediante una señal luminosa, se dice que están conectados por una **líneas de luz** (rayo de luz), que en los diagramas de Minkowsky se representan por las rectas $x = \pm ct$, que en dimensión 2+1 define lo que se conoce como **cono de luz** (figura 10.10). Si $s^2 > 0$ se habla de intervalo de **género tiempo**, son sucesos que acontecen en el mismo lugar para algún sistema inercial, de forma que entre ellos se puede establecer una

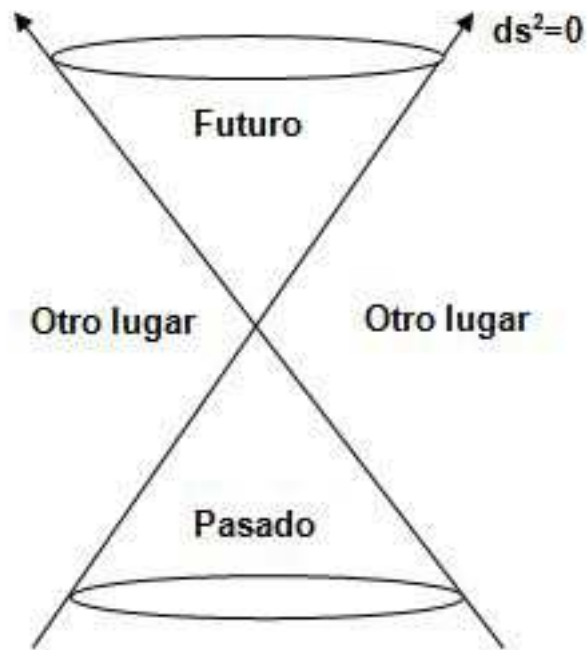


Figura 10.10: Sistemas inerciales

relación de causalidad. Si $s^2 < 0$ se habla de intervalo de **género espacio**, en donde siempre habrá una transformación Lorentz que nos lleve a un inercial en el que estos sucesos sean simultáneos, con lo que no estarán conectados por ninguna relación causal por necesitarse una velocidad de transmisión superior a la de la luz.

Capítulo 11

INTRODUCCIÓN A LA COSMOLOGÍA

11.1. Cosmología. Breve historia

"La Cosmología es la ciencia que estudia el origen y la evolución del Universo como un todo". Esta definición o alguna parecida son las que se pueden encontrar en las enciclopedias, pero de hecho tienen su lado discutible. A mi juicio una definición más realista sería la que denota su significado etimológico: "discurso sobre el Cosmos", ya que en realidad en más de una ocasión esta materia ha estado alejada del método científico tal y como lo conocemos desde el Renacimiento.

En efecto, tanto en sus inicios con las teorías griegas como en épocas más recientes, el desarrollo de la Cosmología no ha ido de la mano de la observación experimental, por ser esta en general muy difícil de realizar, y sólo se utilizan ciertos hechos empíricos para dar argumentos de plausibilidad a tal o cual teoría imposible de comprobar experimentalmente hasta sus últimos términos. En la actualidad el experimento, especialmente las sondas enviadas al espacio y las radiaciones que del cosmos medimos en la Tierra, están impulsando una época dorada en la teoría cosmológica, y de nuevo los hechos nos sobrepasan. Pero todos somos conscientes de la parte especulativa que inevitablemente está asociada a esta rama de la Física. Pero hagamos un breve repaso.

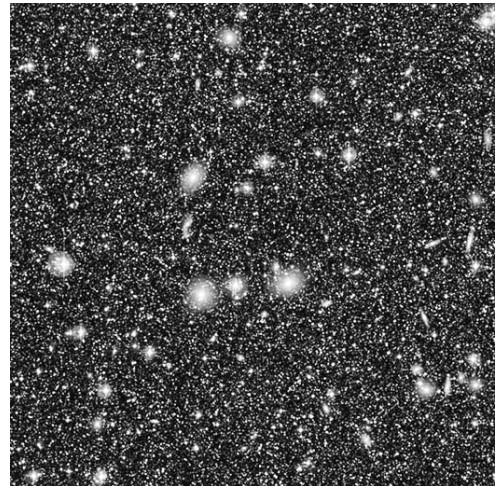


Figura 11.1: Grupo de galaxias del Gran Atractor

Podemos situar el comienzo de la cosmología occidental hace 2500 años, en época griega. La primera gran teoría cosmológica, que perduró hasta el Renacimiento, fue la defendida por Platón y, sobre todo, **Aristóteles**, con sus cuatro elementos: tierra, agua, aire y fuego; y el movimiento eterno y perfecto de los objetos celestes fijados en ocho esferas cristalinas rotan-

tes, cuya materia era la llamada quinta esencia. Todo impulsado por un Gran Hacedor, con la Tierra, por supuesto, en el centro.

La longevidad de esta cosmología aristotélica también se puede explicar por las modificaciones *ad hoc* que hizo el astrónomo **Claudio Ptolomeo** para explicar las obvias anomalías que se observaban en el movimiento de los astros (en especial la retrogradación de los planetas).

No fue hasta el año 1543 cuando el modelo geocéntrico de Aristóteles fue cambiado por el heliocéntrico del matemático polaco **Nicolás Copérnico**, que precisamente el año de su fallecimiento publicó su trabajo *Sobre la revolución de las esferas celestes*. Estas ideas se fueron aceptando gradualmente y perfeccionando por astrónomos como el alemán **Johannes Kepler** hasta el nuevo Universo gravitacional del inglés **Isaac Newton**, que perduró hasta que en el siglo XX **Albert Einstein** enunciara su teoría de la Relatividad General. En la última época de la Cosmología el discurso ha sufrido un cambio importante: el conocimiento del Universo a gran escala no podía separarse del estudio de la física de lo más pequeño, era inevitable que la Astronomía y la Física de Partículas fueran de la mano para elaborar cualquier teoría cosmológica.

Pero veamos brevemente algunas de las efemérides de la época moderna de la Cosmología:

- 1915. Einstein da a conocer su teoría de la **Relatividad General**.
- 1916. El físico alemán **Karl Schwarzschild** publica un trabajo sobre las ecuaciones de campo de Einstein sobre un cuerpo con tal masa que su velocidad de escape supera a la de la luz (concepto que en 1967 llamaría **agujero negro** el americano **John Archibald Wheeler**).
- 1917. Einstein introduce una **constante cosmológica** en sus ecuaciones para producir un universo estático.
- 1919. El astrofísico británico **Arthur Eddington** mide en un eclipse la curvatura que experimenta la luz al pasar cerca del Sol, confirmando la teoría de la relatividad.
- 1922. El matemático ruso **Alexander Friedman** descubre las primeras soluciones cosmológicas de la Relatividad General, correspondientes a un universo en expansión.
- 1929. El astrónomo estadounidense **Edwin Hubble** establece su **ley de expansión** del Universo basada en el corrimiento al rojo de las galaxias distantes.
- 1931. El sacerdote y astrofísico belga **George Lemaitre** propone la idea de una gran explosión como origen del Universo a partir de un solo cuanto de energía (conocida más adelante como **Big Bang** gracias a un comentario del astrofísico inglés **Fred Hoyle**, precisamente uno de sus detractores).
- 1932. Einstein retira su constante cosmológica y propone un modelo de universo en expansión junto con el físico holandés **Willem de Sitter**.
- 1933. El astrónomo búlgaro **Fritz Zwicky** introduce el término **materia oscura** al observar el relativamente pequeño volumen y las grandes velocidades de las galaxias en un cúmulo.

1934. El físico americano **Richard Tolman** publica un monográfico sobre la aplicación de la **Termodinámica** a la Cosmología.
1935. El astrofísico británico **Edward Arthur Milne** introduce el **principio cosmológico**.
1935. El americano **Howard Percy Robertson** y el inglés **Arthur Geoffrey Walker** completan el modelo cosmológico de Friedman y Lemaitre (de sus iniciales se cogieron las siglas para la llamada **métrica FLRW**).
1942. El físico ucraniano **George Gamow** comenzó el estudio de la **nucleosíntesis primordial**, apoyando las ideas de expansión del universo y prediciendo la **radiación de fondo**.
1961. El físico estadounidense **Sheldon Glashow** comienza a desarrollar la teoría actual de la materia, desarrollado junto con el paquistaní **Abdus Salam** y el también estadounidense **Steven Weinberg**. Por esto se les concedería el Nobel de Física en 1979.
1963. El físico estadounidense **Murray Gell-Mann** comienza a desarrollar la **cromodinámica cuántica**. Por sus logros en física de partículas se le concedería el Nobel de Física en 1969.
1965. Los físicos alemán y estadounidense **Arno Penzias** y **Robert Wilson** descubren accidentalmente la **radiación de fondo** de microondas en los laboratorios Bell. Se les concedió por esto el premio Nobel de Física en 1978.
- 1981 El físico estadounidense **Alan Guth** y el ruso **Andrei Linde** proponen las primeras teorías del **universo inflacionario**.
- 1992 El satélite **COBE** (Cosmic Background Explorer) de la NASA confirma el espectro de cuerpo negro del fondo de microondas y detecta por primera vez **anisotropías** en la temperatura, apoyando las hipótesis del principio cosmológico y de la formación de galaxias. Por esta razón sus promotores, los estadounidenses **George Smoot** y **John Mather** recibieron el Nobel de Física en 2006.
- 1998 Los astrofísicos estadounidenses Adam Riess, Saul Perlmutter y Brian Schmidt hallan una **reaceleración** en el ritmo de expansión del Universo midiendo la luminosidad de varias decenas de supernovas de tipo Ia muy lejanas, por resultar menor que la esperada. Se admite de nuevo la constante cosmológica en los modelos. En 2011 se les concedió el premio Nobel de Física por este hecho.
- 1998 El cosmólogo **Michael Turner** acuña el término **energía oscura** como causante de la reaceleración del universo.
- 2000 El globo estratosférico italo-norteamericano **BOOMERANG** (Balloon Observations of Millimetric Extragalactic Radiation and Geophysics) confirma que las secciones espaciales del Universo son euclídeas apoyando la idea de su **planitud**. Asimismo aumenta la precisión de los picos acústicos del baño de microondas apuntados por el COBE.
- 2003 El satélite **WMAP** (Wilkinson Microwave Anisotropy Probe) de la NASA aumenta la precisión en el estudio de las anisotropías del fondo invalidando algunos modelos inflacionarios no estándar.

2009 El 14 de mayo de 2009 se lanza desde el Puerto espacial de Kourou (Guayana Francesa) el satélite **Planck Surveyor** de la ESA que se espera que de una precisión y una sensibilidad diez veces mejor que WMAP. Esta misión tiene una importante participación española (experimento QUIJOTE). Ya está dando mapas completos del cielo (2011).

Resumiendo, la Cosmología contemporánea se basa en tres grandes pilares: el principio cosmológico, la teoría del Big Bang y el paradigma inflacionario. Actualmente se admite que vivimos en un universo plano de unos 13.700 millones de años de edad que está en expansión, actualmente acelerada, y que posee unas anisotropías en el fondo de radiación, consecuencia de fluctuaciones cuánticas en el periodo de inflación, que originaron las galaxias por colapsos gravitacionales. Asimismo se ha deducido que sólo el 4,5 % de la materia-energía del universo es bariónica, siendo el resto de la materia sólo el 22,5 % del total, la **materia oscura** desconocida, de la que conocemos sólo sus efectos gravitacionales; y el resto, el 73 % sería una **energía oscura** no detectada y de la que sólo conocemos sus efectos aceleradores. El modelo cosmológico más defendido actualmente es el **modelo Lambda-CDM** (Lambda-Cold Dark Matter).

11.2. Principio cosmológico

El estudio del Universo requiere ciertas suposiciones que a veces son lamentablemente olvidadas. La primera por supuesto es que lo suponemos comprensible con la Física que elaboramos en nuestros laboratorios terrestres, es decir, se espera que las leyes físicas dentro del Sistema Solar sean aplicables al Universo entero a escala cosmológica, que las constantes físicas sigan siendo constantes, etc.

Una de las suposiciones más importantes es el llamado **principio cosmológico**, que afirma que **todos los observadores fundamentales ven la misma cosmohistoria**. Aunque veremos con detalle qué significan estos conceptos, adelantar que por observador fundamental se entiende aquel que habita en una galaxia promedio. En cierta medida este principio es opuesto a los llamados principios antrópicos, en donde nuestra posición en el Universo sería privilegiada.

Una de las consecuencias directas del principio cosmológico es suponer la homogeneidad e isotropía del Universo a gran escala. Hay indicios observacionales considerables de que la estructura del Universo presenta una extraordinaria uniformidad de materia y radiación en escalas de 10^8 **años luz** (al), es decir, unos cuantos cientos de millones de años luz (las galaxias típicas tienen cientos de miles de años luz de diámetro, 10^5). Cuando decimos uniformidad hablamos principalmente de densidad, presión y temperatura. Es obvio que en condiciones terrestres la materia no es homogénea e isotrópica, sin embargo si tomamos como unidad el **parsec** (pc), la unidad astronómica equivalente a $3 \cdot 10^6$ m, poco más de 3 años luz, la cosa se ve mucho más homogénea. Actualmente la escala de homogeneidad e isotropía que se acepta es de 200 Mpc:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Isotropía} \\ \text{Homogeneidad} \end{array} \right\} \Leftrightarrow 200 \text{ Mpc} \simeq 652 \text{ Mal}$$

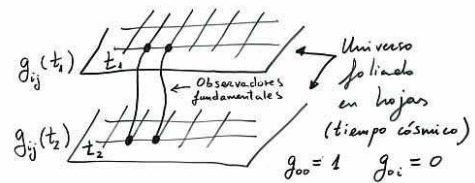
Así, si promediamos la densidad del Universo dentro de un cubo de arista 200 Mpc y trasla-

damos ese cubo una distancia mayor, la densidad media en el primer lugar será casi igual a la del segundo lugar.

11.3. Métrica de Robertson-Walker

El principio cosmológico también predice la geometría que debemos aplicar para medir distancias e intervalos temporales en esta escala, y para ello debemos encontrar la métrica que rige esta geometría a gran escala. Estos cálculos se basan por supuesto en la Relatividad General de Einstein, pero no hay que olvidar que todo se funda a su vez en los trabajos de los grandes geómetras, y aparte de los del padre de la geometría, **Euclides**, los trabajos de las geometrías no euclideas de los alemanes **Carl Friedrich Gauss** y **Bernhard Riemann**, el húngaro **János Bolyai** y el ruso **Nikolái Lobachevski**, en el siglo XIX, fueron determinantes. Veamos pues cómo se deduce la métrica.

Normalmente se parte del llamado **postulado de Weyl** que asume la uniformidad del Universo como un sustrato o fluido perfecto en el cual las geodésicas son ortogonales a una familia de hipersuperficies de género espacio. Dicho de otra forma, se trabajará con lo que se conoce como **coordenadas comóviles**, que se definen por medio de las caídas libres de los observadores fundamentales, de forma que dos geodésicas no se intersecan excepto en algún punto singular del pasado o del futuro. Si los observadores fundamentales sincronizan sus relojes cuando para todos ellos los parámetros cosmológicos tienen los mismos valores (temperatura, presión, densidad media, etc) el tiempo común resultante es lo que se conoce como **tiempo cósmico t**, que definirá las superficies de simultaneidad. Los apuntes de los parámetros vistos por los observadores fundamentales es lo que llamamos **cosmohistoria**.



Hay muchas forma de llegar a la métrica con la simetría que buscamos, vamos a escoger aquí el camino rápido suponiendo ciertos conocimientos de Relatividad General. Para empezar admitiendo la isotropía del problema lo que estamos buscando es un invariante de la forma:

$$ds^2 = dt^2 - [A(r)dr^2 + r^2d\Omega^2] \quad \text{con } d\Omega^2 \equiv d\theta^2 + \text{sen}^2\theta d\phi^2$$

ya que el postulado de Weyl nos asegura que no haya términos cruzados y la homogeneidad nos permite olvidarnos de la dependencia temporal y trabajar sin ella de momento en una de las hipersuperficies u hojas en las que dividimos el espacio-tiempo. También la homogeneidad nos prescribe que el escalar de curvatura de **Ricci** debe ser constante en todo punto. Vamos a suponer para simplificar los cálculos que existen sólo dos dimensiones espaciales, con lo que tenemos los siguientes valores no nulos para la métrica:

$$\begin{array}{l} g_{00} = 1 \quad g_{11} = -A(r) \quad g_{22} = -r^2 \\ g^{00} = 1 \quad g^{11} = -A(r)^{-1} \quad g^{22} = -r^{-2} \end{array}$$

que nos dará, recordando la definición de conexión afín, los siguientes símbolos de Christoffel

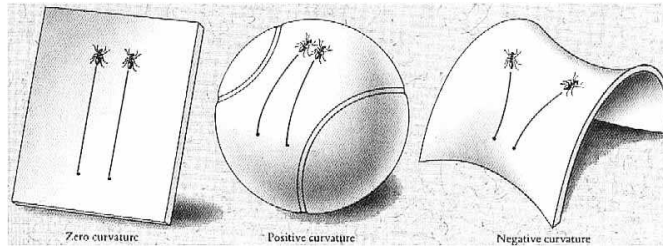


Figura 11.2: Superficies de curvatura constante

no nulos:

$$\begin{aligned}\Gamma_{11}^1 &= \frac{1}{2}A^{-1}A' & \Gamma_{21}^2 &= \frac{1}{r} \\ \Gamma_{22}^1 &= -rA^{-1} & \Gamma_{12}^2 &= \frac{1}{r}\end{aligned}$$

que nos dejan los siguientes valores para los elementos diagonales del tensor de Ricci:

$$R_{00} = 0 \quad R_{11} = \frac{A'}{2Ar} \quad R_{22} = \frac{A'r}{2A^2}$$

Sólo queda calcular el escalar de curvatura con nuestra métrica obteniendo una ecuación diferencial fácil de resolver:

$$\mathcal{R} = R_{\alpha}^{\alpha} = g^{\alpha\beta} R_{\alpha\beta} = -A^{-1} \frac{A'}{2Ar} - r^{-2} \frac{A'r}{2A^2} = -\frac{A'}{rA^2} = cte \quad \text{con } A(0) = 1 \Rightarrow A(r) = \frac{1}{1 - cte r^2/2}$$

en donde hemos impuesto la condición inicial de que para entornos pequeños el espacio sea plano. Ahora sólo queda hacer la reescala:

$$r \mapsto \sqrt{\frac{2}{|cte|}} r$$

obteniendo la llamada métrica FLRW (Friedman-Lemaitre-Robertson-Walker), más conocida como **métrica Robertson-Walker**:

$$ds^2 = dt^2 - R^2(t) \left[\frac{1}{1 - kr^2} dr^2 + r^2 d\Omega^2 \right] \quad \text{con } R^2 = \frac{2}{|cte|} \text{ y } k = \frac{cte}{|cte|} = 0, \pm 1$$

En donde se ha introducido el **índice de curvatura k** y el llamado **factor de escala $R(\mathbf{t})$** , con dimensiones de longitud (r es adimensional en el modelo), ya con la dependencia temporal, que nos dará una información valiosa sobre nuestro universo. Nótese que la curvatura constante en el caso simplificado estudiado está dada por $2k/R^2$.

En el caso de 3+1 dimensiones se pueden concluir las mismas expresiones. En este caso las coordenadas (t, r, θ, ϕ) se llaman comóviles debido a que dos objetos permanecen en esas

coordenadas todo el tiempo mientras lo que cambia es la distancia entre ellos de acuerdo al factor de escala $R(t)$. El conocimiento de $R(t)$ y, por supuesto, de k , es objeto de observación experimental e interpretación teórica por medio de las ecuaciones de la Relatividad General.

A menudo se suele ver la métrica de Robertson-Walker en la forma más compacta:

$$ds^2 = dt^2 - R^2(t) [d\chi^2 + s_k^2(\chi)d\Omega^2]$$

denominada **representación comóvil**, en donde la distancia propia es siempre proporcional a la coordenada radial comóvil, definiendo esta χ de forma que:

$$r = s_k(\chi) = \begin{cases} \left. \begin{array}{l} \text{sen } \chi \\ \chi \\ \text{senh } \chi \end{array} \right\} \text{ para } k = \begin{cases} +1 \\ 0 \\ -1 \end{cases} \left\{ \begin{array}{l} 0 \leq \chi < \pi \\ 0 \leq \theta < \pi \\ 0 \leq \phi < 2\pi \\ 0 \leq \chi < \infty \\ 0 \leq \theta < \pi \\ 0 \leq \phi < 2\pi \\ 0 \leq \chi < \infty \\ 0 \leq \theta < \pi \\ 0 \leq \phi < 2\pi \end{array} \right\} \begin{array}{l} \text{Esfera tridimensional } S^3 \\ \text{(topología cilíndrica } \mathbb{R} \times S^3) \\ \text{Espacio euclídeo tridimensional } \mathbb{R}^3 \\ \text{(topología euclídea } \mathbb{R}^4) \\ \text{Hiperboloide tridimensional } H^3 \\ \text{(topología minkowskiana } \mathbb{R}^4) \end{array}$$

Como se puede ver, el caso del índice de curvatura positivo $k = +1$ es el único que nos da un espacio-tiempo cerrado, siendo los otros dos casos abiertos. Las topologías que aquí se muestran son las triviales, pero otro tipo de topologías también son posibles identificando puntos e intervalos. Asimismo hay otras formas de la métrica Robertson-Walker, como la conforme, en donde se reescala el tiempo para que juegue el mismo papel que el espacio, o la isotrópica, en donde se utiliza la curvatura gaussiana del espacio, pero todas son equivalentes.

Para completar damos las expresiones de las componentes no nulas del tensor de Ricci y del escalar de curvatura para el caso general de métrica FLRW:

$$\begin{aligned} R_{00} &= -3\frac{\ddot{R}}{R} \\ R_{ij} &= -\left[\frac{\ddot{R}}{R} + 2\frac{\dot{R}^2}{R^2} + \frac{2k}{R^2}\right]g_{ij} \\ \mathcal{R} &= -6\left[\frac{\ddot{R}}{R} + \frac{\dot{R}^2}{R^2} + \frac{k}{R^2}\right] \end{aligned}$$

estos cálculos se pueden hacer con un sencillo programa en cualquier software matemático, en estos apuntes hemos usado el *Mathematica*, como se puede ver en el apéndice A.

Parte IV
LA RUPTURA

El intento de concebir la teoría cuántica como una descripción completa de los sistemas individuales da lugar a interpretaciones poco naturales que se pueden evitar si uno acepta que la descripción se refiere a conjuntos de sistemas y no a sistemas individuales.

A.Einstein [19]

Capítulo 12

ESTADOS, PREPARACIONES Y OBSERVABLES

12.1. Introducción

Comenzaremos con este pequeño interludio teórico para analizar tres de los conceptos fundamentales y que más ríos de tinta han hecho correr dentro del contexto de la Mecánica Cuántica, los de observable físico, preparación y estado de un sistema.

12.2. Observables

En Mecánica Cuántica llamamos **observable** de un sistema físico a toda magnitud susceptible de ser medida experimentalmente. Nótese que en este sentido no todas las magnitudes físicas clásicas son observables, por ejemplo la entropía no lo sería.

De la misma forma, debemos ser cuidadosos y distinguir entre los observables cuánticos y los operadores matemáticos que los representan, una confusión alimentada por muchos autores, incluido el propio Dirac. En efecto, veremos más adelante cómo, aunque la teoría diga que cuando dos observables conmutan se pueden medir simultáneamente con máxima precisión, en realidad se trata de un abuso del lenguaje, ya que lo que conmutan son los operadores que los representan, y para medir los observables habrá también que salvar el trámite de diseñar un experimento que los determine.

12.3. Preparaciones

Cuando medimos experimentalmente cierto observable sobre un sistema cuántico, en general obtendremos diferentes valores del mismo para los diferentes experimentos, aun cuando el sistema haya sido preparado de la misma forma, es decir, sometido a las mismas operaciones experimentales relevantes.

Sin embargo, si realizamos el experimento un gran número de veces, obtendremos una distribución de probabilidad consecuencia de las frecuencias de repetición que sí será estable

cuando el número N de experimentos tienda a infinito. Tendremos siempre la misma distribución de probabilidad para cada experimento aun cuando los resultados de los experimentos individuales no se puedan reproducir. Pues bien, una **preparación** (a veces también llamada **medida de primera especie**) debe determinar esas distribuciones de probabilidad para todas las medidas individuales.

12.4. Estados

Llamaremos **estado** de un sistema cuántico al conjunto de distribuciones de probabilidad que se pueden obtener para cada observable estudiado. Del mismo modo podemos asociar con estado al conjunto de sistemas igualmente preparados.

Hay que hacer notar que el concepto de estado es uno de los más controvertidos en Mecánica Cuántica, y a veces se le ha relacionado con las propiedades individuales de un sistema, hasta que se vio que eso podría llevar a contradicciones. La posición moderna a este respecto consiste en identificar estado con un conjunto de sistemas igualmente preparados, o bien con un conjunto de distribuciones de probabilidad para varios observables.

12.4.1. Estados puros

Si preparamos un sistema de modo que podamos medir la mayor cantidad posible de observables sobre él, tendremos la representación de un estado con información maximal. A este tipo de estados se los denomina **estados puros**.

Observemos que, en Física Clásica, un sistema así preparado devolverá siempre la misma medida sin dispersión para todos los observables, cosa que no ocurre en Cuántica, en donde existirán observables con dispersión incluso en estados puros.

La información sobre qué observables constituyen esa información maximal del estado la obtendremos de la experiencia, y por tanto no se puede conocer a priori.

12.4.2. Estados mezcla

Cuando esta preparación del sistema no es maximal, es decir, cuando se desconocen las distribuciones de algún observable, se hablará de **estados mezcla**.

Veremos más adelante que todo estado mezcla es una combinación lineal de estados puros. Por tanto, la expresión del estado mezcla no será única y dependerá de la base de estados puros que se determine. Esto no significa que cualquier combinación lineal de estados puros sea un estado mezcla. Los estados puros son casos particulares de los estados mezcla, y su consideración como tales nos la dará el conjunto de observables para los que esté definido. Es por esto que algunos autores prefieren evitar el término estado mezcla y llamarlos **estados no puros**, y otros utilizar el término **mezcla estricta**.

Capítulo 13

LOS POSTULADOS DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

13.1. Introducción

Aunque el nacimiento de la teoría cuántica se sitúa en 1900, con el descubrimiento del *quanto* de Max Planck, no fue hasta los años 30 cuando se establecen los principios de la Mecánica Cuántica moderna. Estos principios se relacionan fundamentalmente con los trabajos de Born, Dirac y, sobre todo, John von Neumann (1932).

La axiomatización dada por von Neumann perduró durante más de medio siglo en la mayoría de los libros clásicos de Mecánica Cuántica. Sin embargo, en los años 90 la mayoría de los físicos empezó a adoptar una actitud crítica hacia esa forma de postulación, especialmente en lo que concernía al desarrollo intuitivo de la misma y, sobre todo, al tratamiento que se hacía del problema del colapso de la función de onda.

En efecto, a pesar de que en los textos clásicos se parte del concepto de estado para pasar luego al de observable incluyendo como postulados el colapso, la evolución temporal y las relaciones de incertidumbre, una visión más moderna consiste en partir del concepto de observable suprimiendo los tres últimos postulados a los que se llegará por diferentes consideraciones, y manteniendo sólo el postulado de Born acerca de la interpretación probabilística. Una visión más cercana a ésta última será la que adoptemos en estos apuntes.

No obstante, hay que remarcar que las conclusiones experimentales a las que se llega con cualquier conjunto de axiomas que se puedan elegir son, y de hecho deben ser, exactamente las mismas, no tratándose esto, en mi opinión, más que de una mera cuestión formal. De hecho para la mayoría de los físicos, que no trabajan en los fundamentos de la Mecánica Cuántica, es esta una cuestión transparente.

13.2. Postulado I. Marco matemático.

I. Cada sistema cuántico se estudiará con un espacio de Hilbert \mathcal{H} complejo, separable y equipado.

Al margen de consideraciones topológicas, un espacio de Hilbert separable es un espacio en donde se puede definir un producto escalar y una base lineal finita o infinita numerable (base de Hamel).

El concepto de *equipación* del espacio se escapa de los objetivos de estos apuntes. Baste decir que se puede consultar en los trabajos del matemático ruso Israel Gelfand y que nos permitirá incluir una serie de funciones generalizadas debidas a Dirac.

13.2.1. Espacio dual. Notación de Dirac.

Según esta notación, los vectores de \mathcal{H} se llaman vectores *ket* y se denotan con $|\Psi\rangle$. También se define un espacio dual \mathcal{H}' , isomorfo al anterior, en el que cada vector de \mathcal{H} es tratado como un funcional lineal Φ de \mathcal{H}' que a cada elemento de \mathcal{H} le asocia un escalar. A estos vectores se los denomina vectores *bra*, y se denotan como $\langle\Phi|$:

$$\Phi(\Psi) \equiv \langle\Phi|\Psi\rangle \in \mathbb{C} \quad (13.1)$$

y, lógicamente, en esa definición se asume que se usará el producto escalar definido en cada espacio de Hilbert.

Habitualmente en espacios discretos los vectores ket son vectores columna y los vectores bra son vectores fila. En ese sentido, se puede ver que, así como un ket por un bra es un c-número o simple número complejo (por usar términos de Dirac), un vector ket por un bra será un q-número u operador, y si ambos coinciden en el primer caso obtendremos la unidad y en el segundo la identidad.

13.2.2. Cierre del espacio de Hilbert

En cada espacio de Hilbert podemos definir una base ortonormal $|i\rangle$ de forma que $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$, usando la delta de Kronecker o de Dirac dependiendo del caso discreto o continuo.

Con esta base podemos definir **la relación de completitud o de cierre** del Hilbert usando la descomposición de la identidad

$$I = \sum_i |i\rangle\langle i| \quad (13.2)$$

de modo que cualquier vector arbitrario $|v\rangle$ del espacio pueda desarrollarse en esa base:

$$|v\rangle = \left(\sum_i |i\rangle\langle i| \right) |v\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|v\rangle \equiv \sum_i v_i |i\rangle \quad (13.3)$$

13.2.3. Operadores lineales

Sobre los vectores del espacio de Hilbert definiremos operadores lineales A , que cumplen:

$$A \left(\sum_i a_i |v_i\rangle \right) = \sum_i a_i A|v_i\rangle$$

y que normalmente usaremos por medio de sus representaciones matriciales en cada base:

$$A_{ij} = \langle i|A|j\rangle \in \mathbb{C}$$

La traza de un operador lineal en una base dada será pues:

$$Tr(A) = \sum_i \langle i|A|i\rangle$$

Cuando al aplicar un operador sobre un vector obtenemos:

$$A|v\rangle = v|v\rangle$$

diremos que $|v\rangle$ es **autovector** de A con **autovalor** v . Es conocido por álgebra que los autovalores se hallan igualando a cero el llamado **polinomio característico** $P(v) = |A - vI| = 0$, que no depende de la representación elegida.

El operador tendrá una representación diagonal en sus autovectores ortonormales, si los hubiera:

$$A = \sum_i \lambda_i |i\rangle \langle i|$$

Se define el operador adjunto A^+ de A a aquel que cumple:

$$\langle v|(A|w\rangle) = (\langle v|A^+)|w\rangle$$

Un operador es **hermítico** o **autoadjunto** cuando coincide con su adjunto (ejemplos claros son los proyectores o la identidad). Es muy fácil demostrar que los autovalores de un operador autoadjunto son reales.

Un operador U es **unitario** si se cumple que $U^+U = I$, lo que implica también que $UU^+ = I$. Estos operadores son **isometrías**, es decir, conservan los productos escalares y son por tanto los indicados para describir las evoluciones reversibles:

$$\langle v|U^+U|w\rangle = \langle v|w\rangle$$

Los operadores unitarios y autoadjuntos forman parte de un conjunto mayor, los operadores **normales**, que cumplen $N^+N = NN^+$.

Los operadores normales tienen la particularidad de que siempre se puede encontrar una base de autovectores ortonormal, es decir, serán diagonales en esa base. Esto constituye un teorema de descomposición espectral que por su importancia vamos a demostrar a continuación.

Teorema 13.2.1. (*Teorema de descomposición espectral*) *Cualquier operador normal N sobre un espacio de Hilbert \mathcal{H} es diagonal respecto a alguna base ortonormal de \mathcal{H}*

Dem. El hecho de que un operador con representación diagonal es normal es muy fácil de demostrar, así que nos vamos a detener en la demostración de la implicación directa, es decir, vamos a probar que cualquier operador normal tiene una representación diagonal.

La demostración se suele hacer por inducción sobre la dimensión del Hilbert. Para dimensión 1 es trivial, ya que todos los operadores, lógicamente, son diagonales.

Hay que probar por tanto que si se cumple para $n-1$ se cumplirá para n . Para eso vamos a intentar descomponer el operador N . Si suponemos que P es el proyector sobre el subespacio de uno de los autovalores de N y Q el proyector complementario, es obvio que $P + Q = I$. Por tanto podemos poner:

$$N = (P + Q)N(P + Q) = PNP + \cancel{PNQ} + \cancel{QNP} + QNQ = PNP + QNQ$$

Debemos justificar esas dos cancelaciones. Que QNP es nulo es evidente, dado que P sobre un vector por la derecha proyecta sobre el subespacio de autovalores de N y Q es justamente el proyector ortogonal que anularía todo.

Para la anulación de PNQ hay que hacerlo actuar sobre un vector por la izquierda, y se llega a la misma conclusión que en el caso anterior, P y N dejarán al vector en el subespacio ortogonal a Q .

Por último, si probamos que QNQ es normal, como se aplica al subespacio restringido de dimensión $n-1$, habrá que admitir que es diagonal por el principio de inducción, y es obvio que PNP ya es diagonal sobre cualquier base que contenga al vector perteneciente a P . Para probar lo primero usamos el hecho de que N es normal, que $Q^2 = 0$ y la identidad $QN = QN(P + Q) = QNQ$ y tenemos que $QNNQ = QNQ$ y $QNN^+Q = QNN^+Q = QNN^+Q = QN^+NQ = QN^+Q = QN^+Q = QN^+Q$, luego QNQ es normal y ya estaría demostrado el teorema.

□

De aquí se deduce que todo operador normal, o autoadjunto, o unitario, se podrá siempre descomponer en términos de sus autovectores o de los proyectores ortogonales sobre los mismos en la forma:

$$\begin{aligned} O &= \sum_i \lambda_i |i\rangle \langle i| = \sum_i \lambda_i P_i \\ \sum_i P_i &= I \\ P_i P_j &= \delta_{ij} P_i \end{aligned} \tag{13.4}$$

siendo $|i\rangle$ la base de autovectores con los autovalores λ_i y P_i los proyectores sobre los subespacios de autovalor λ_i .

13.3. Postulado II. Estados y observables.

II. Un estado es representado por un operador ρ , también llamado *matriz densidad*, no negativo, autoadjunto y de traza unidad. Los observables también serán operadores autoadjuntos, y sus autovalores serán los posibles valores de las magnitudes físicas.

13.3.1. Expresión de los estados. Matrices densidad y vectores.

El hecho de que el operador estado sea autoadjunto nos garantiza que se puede descomponer en una representación espectral de la forma:

$$\rho = \sum_i p_i |\Psi_i\rangle \langle \Psi_i| \quad (13.5)$$

en términos de sus autovalores y autovectores ortonormales, en donde hemos supuesto un caso discreto por conveniencia.

Aparte por las condiciones del postulado se debe cumplir:

$$0 \leq p_i \leq 1 \quad \text{con} \quad \sum_i p_i = 1 \quad (13.6)$$

llamándose este tipo particular de combinación lineal *combinación convexa*.

Dentro de los estados mezcla se encuentra el caso particular de los estados puros:

$$\rho = |\Psi\rangle \langle \Psi| \quad (\text{operadores de proyeccion, } \rho^2 = \rho) \quad (13.7)$$

A menudo se asocia en este caso el estado del sistema no con su matriz densidad sino con el llamado vector estado $|\Psi\rangle$ que al ser un rayo unidad en el espacio de Hilbert tendrá una ambigüedad de fase y existirá la equivalencia:

$$|\Psi\rangle \sim e^{i\alpha} |\Psi\rangle \quad (13.8)$$

Sin embargo, el operador estado (13.7) es independiente de esta fase arbitraria. Además, se puede probar como teorema que estos estados puros no pueden ser representados por combinaciones convexas de otros estados, al contrario que los estados mezcla estricta.

Hay que destacar que la representación de un estado no puro como combinación convexa de estados puros no es única y depende de la base que utilicemos, que no tiene por qué ser siempre la base de autovectores ortonormales.

Como ejemplo, en un espacio de Hilbert de dimensión 2, sea un estado no puro preparado en los estados puros no ortogonales:

$$|\Phi_1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad |\Phi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (13.9)$$

de la siguiente forma:

$$\rho = \frac{1}{4}|\Phi_1\rangle\langle\Phi_1| + \frac{3}{4}|\Phi_2\rangle\langle\Phi_2| = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{3}{4}\cdot\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{8}\begin{pmatrix} 3 & 3 \\ 3 & 5 \end{pmatrix}$$

pero también podemos hacer otro desarrollo calculando sus autovectores y autovalores, obteniendo:

$$\rho = \frac{4+\sqrt{10}}{8}|\Psi_1\rangle\langle\Psi_1| + \frac{4-\sqrt{10}}{8}|\Psi_2\rangle\langle\Psi_2| \quad (13.10)$$

en donde se han usado en este caso los autovectores ortonormales:

$$|\Psi_1\rangle = \sqrt{\frac{9}{20+2\sqrt{20}}}\begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1+\sqrt{10}}{3} \end{pmatrix} \quad |\Psi_2\rangle = \sqrt{\frac{9}{20-2\sqrt{20}}}\begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1-\sqrt{10}}{3} \end{pmatrix} \quad (13.11)$$

13.3.2. Conjunto completo de operadores que conmutan.

Vamos a demostrar dos teoremas relativos a las propiedades de los operadores que nos serán de mucha utilidad.

Teorema 13.3.1. *Si A y B son dos operadores autoadjuntos que poseen un conjunto completo de autovectores y que conmutan (es decir $[A, B] = AB - BA = 0$), existe un conjunto completo de autovectores de ambos.*

Dem: Sean los dos conjuntos de autovectores:

$$\begin{aligned} A|a_n\rangle &= a_n|a_n\rangle \\ B|b_m\rangle &= b_m|b_m\rangle \end{aligned}$$

Se puede desarrollar $|a_n\rangle$ en la base de autovectores de B y haciendo uso de la definición de autovector obtendríamos:

$$\begin{aligned} |a_n\rangle &= \sum_m c_m |b_m\rangle \\ (A - a_n)|a_n\rangle &= 0 = \sum_m (A - a_n)c_m |b_m\rangle \end{aligned}$$

Si se anularan todos los términos por separado tendríamos demostrada una implicación, ya que $|b_m\rangle$ sería también autovalor de A . Para que se anulen todos los términos del

sumatorio por separado debemos demostrar su independencia lineal. Si operamos con B por la izquierda y usando la conmutatividad en cada término del sumatorio obtenemos:

$$B(A - a_n)|b_m\rangle = b_m(A - a_n)|b_m\rangle$$

es decir, $(A - a_n)|b_m\rangle$ es autovector de B con autovalor b_m , y por tanto todos los términos del sumatorio serán ortogonales y se tendrán que anular por separado, lo que quiere decir que $|b_m\rangle$ también será autovalor de A .

Con un sencillo cálculo algebraico obtendríamos la implicación inversa y concluiría la demostración. \square

Esto se puede ir haciendo para el resto de operadores conmutantes que encontremos. En general el grupo de estos operadores en el que no hay degeneración (para cada autovalor existe un único autovector) se denomina **conjunto completo de operadores que conmutan**.

Teorema 13.3.2. *Cualquier operador que commute con un conjunto completo de operadores que conmutan será función de los operadores de ese conjunto.*

Dem: Sea el conjunto (A, B, \dots) de operadores con autovectores $|a_n, b_m \dots\rangle$:

$$\begin{aligned} A|a_n, b_m \dots\rangle &= a_n|a_n, b_m \dots\rangle \\ B|a_n, b_m \dots\rangle &= b_m|a_n, b_m \dots\rangle \end{aligned}$$

y sea F el operador que conmuta con todos ellos. Por el teorema anterior ahora el conjunto completo sería el ampliado (A, B, \dots, F) . Pero los vectores $|a_n, b_m \dots\rangle$ son los únicos autovectores del conjunto completo en ese espacio de Hilbert, luego deben ser también autovectores del ampliado:

$$F|a_n, b_m \dots\rangle = f_{nm\dots}|a_n, b_m \dots\rangle$$

y por tanto debe haber una función tal que:

$$f_{nm\dots} = f(a_n, b_m, \dots)$$

\square

13.4. Postulado III. Valores medios y probabilidad.

I. El valor medio de una variable dinámica \mathbf{O} (que puede representar un observable) en el conjunto de estados igualmente preparados representados por el operador ρ es

$$\langle O \rangle_\rho \equiv Tr(\rho O)$$

y nos dará también la distribución de probabilidad de esa variable en la base del espacio de Hilbert considerada.

13.4.1. Valores medios.

Vamos a ver la expresión general que tiene el valor medio de un observable por medio de cierta base ortonormal:

$$\langle O \rangle_{\rho} \equiv Tr(\rho O) = \sum_i \langle \Psi_i | \rho O | \Psi_i \rangle = \sum_i \sum_j \langle \Psi_i | \Psi_j \rangle p_j \langle \Psi_j | O | \Psi_i \rangle = \sum_i p_i \langle \Psi_i | O | \Psi_i \rangle$$

y lógicamente si estuviéramos en el estado puro representado por el vector $|\Psi\rangle$ el valor medio se reduciría a:

$$\langle O \rangle_{|\Psi\rangle} = \langle \Psi | O | \Psi \rangle$$

es decir, se puede decir en general que el valor medio del observable en un estado cualquiera es el promedio estadístico de sus valores medios en cada estado puro y cuyos pesos son precisamente los coeficientes de la descomposición convexa del estado en esa base.

13.4.2. Probabilidad.

Sea A un observable, supongamos que de espectro discreto (el caso continuo es muy parecido), en su descomposición espectral de autovectores:

$$A = \sum_i r_i |r_i\rangle \langle r_i|$$

Si quisiéramos estudiar una función de ese observable, es asumible pensar que podríamos usar esta descomposición. Podemos utilizar la función de Heaviside (o *función escalón*):

$$\theta(r - A) = \begin{cases} 1 & \text{si } r > A \\ 0 & \text{si } r < A \end{cases}$$

Vamos a preguntarnos por una densidad de probabilidad $g(r)$, que nos daría la probabilidad de encontrar al sistema con un valor del observable en el intervalo $[r, r + dr]$ en un estado arbitrario ρ . Entonces la probabilidad de que el observable A tuviera un valor menor que r sería:

$$\text{Prob}(A < r | \rho) = \langle \theta(r - A) \rangle_{\rho} = \int_{-\infty}^r g(r') dr'$$

pero por otra parte, por el tercer postulado y las consideraciones hechas arriba:

$$\langle \theta(r - A) \rangle_{\rho} = Tr\{\rho \theta(r - A)\} = \sum_i \theta(r - r_i) \langle r_i | \rho | r_i \rangle$$

luego, igualando

$$\int_{-\infty}^r g(r') dr' = \sum_i \theta(r - r_i) \langle r_i | \rho | r_i \rangle$$

es decir

$$g(r) = \frac{\partial}{\partial r} \left[\sum_i \theta(r - r_i) \langle r_i | \rho | r_i \rangle \right] = \sum_i \delta(r - r_i) \langle r_i | \rho | r_i \rangle$$

lo que indica que **los únicos valores de probabilidad no nula son los autovalores del observable.**

Vamos a preguntarnos ahora por la probabilidad de que se obtenga un valor arbitrario r de ese observable en el estado ρ :

$$\begin{aligned} \text{Prob}(A = r|\rho) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \{ \text{Prob}(A < r + \epsilon|\rho) - \text{Prob}(A < r - \epsilon|\rho) \} = \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{r-\epsilon}^{r+\epsilon} g(r') dr' = \sum_i \langle r_i | \rho | r_i \rangle \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{r-\epsilon}^{r+\epsilon} \delta(r' - r_i) dr' = \sum_i \langle r_i | \rho | r_i \rangle \delta_{r, r_i} \end{aligned} \quad (13.12)$$

Usando el operador proyección sobre el subespacio de autoestados con autovalor $r_i = r$:

$$P(r) = \sum_i |r_i\rangle \langle r_i| \delta_{r, r_i}$$

con el que, usando la propiedad cíclica de la traza, obtenemos la expresión general para la probabilidad:

$$\boxed{\text{Prob}(A = r|\rho) = \text{Tr}\{\rho P(r)\}} \quad (13.13)$$

en donde se pueden ver los dos factores en juego, el estado del sistema y el filtro correspondiente al valor concreto del observable.

En el caso particular de un estado puro $\rho = |\psi\rangle \langle \psi|$ se obtiene la expresión:

$$\text{Prob}(A = r|\rho = |\psi\rangle \langle \psi|) = \sum_i |\langle r_i | \psi \rangle|^2 \delta_{r, r_i}$$

y si lo que queremos comprobar es un autovalor no degenerado $r = r_i$ tenemos la conocida expresión:

$$\text{Prob}(A = r|\rho = |\psi\rangle \langle \psi|) = |\langle r | \psi \rangle|^2 \quad (13.14)$$

Hay que hacer notar en este último caso que la probabilidad sería la certeza absoluta en el caso de que se esté en un estado autovector del observable y se quiera medir el correspondiente autovalor, y nula en el caso de que estemos en otro estado puro ortonormal.

Capítulo 14

LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER

14.1. Introducción

En 1926, el físico austriaco **Erwin Schrödinger** derivó una ecuación de ondas desde el principio variacional de Hamilton inspirándose en la analogía existente entre la Mecánica y la Óptica. Esta ecuación, cuya formulación se puede ver en el artículo *An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules* de la revista *Physical Review*, explicaba mucha de la fenomenología cuántica que se conocía en aquel momento.

Aunque estaba claro que esta ecuación describía la evolución temporal del estado cuántico de un sistema físico no relativista, fue pocos días después de su publicación cuando el físico alemán **Max Born** desarrolló la interpretación probabilista del objeto principal de la ecuación, la función de onda, que sigue vigente hoy en día ya que entró a formar parte de la llamada interpretación de Copenhague de la Mecánica Cuántica, con la que Schrodinger nunca estuvo del todo de acuerdo. Sus ambiciones al abordar la tarea eran encontrar, en analogía con la Óptica, el límite en el cual se pudieran describir de forma determinista las trayectorias de las partículas. Llegó a proponer una interpretación de la función de onda como densidad de carga que no fructificó. En este sentido Schrödinger fue, al igual que Einstein, profeta y hereje de la teoría cuántica.

El desarrollo que haremos aquí no es el histórico. Partiremos de principios de simetría apoyados en el teorema de **Wigner**, físico húngaro artífice entre otros de la llamada interpretación ortodoxa de la Mecánica Cuántica, para llegar a una formulación general que devenirá la original de Schrödinger cuando nos ocupemos de la representación en el llamado *espacio de posiciones*.

14.2. Transformaciones de simetría

Como se ha dicho en estos apuntes, las leyes físicas deben ser invariantes bajo ciertas simetrías, representadas por las transformaciones de los objetos matemáticos que definen estas leyes. En particular en Mecánica Cuántica cabe preguntarse por las transformaciones de los

estados y de los observables:

$$\begin{aligned} A &\rightarrow A' \\ |\Psi\rangle &\rightarrow |\Psi'\rangle \end{aligned}$$

En el caso cuántico estas transformaciones deben cumplir lo que constituye la esencia del llamado **teorema de Wigner**, es decir, que los observables transformados deben poseer los **mismos conjuntos posibles de valores** que los antiguos (autovalores) y que las transformaciones de los estados nos deben dar las **mismas probabilidades**, deben estar siempre dadas por operadores unitarios que conservan los productos escalares:

$$|\Psi\rangle \rightarrow |\Psi'\rangle = U|\Psi\rangle$$

en realidad el teorema permite también los operadores antiunitarios, pero estos sólo se usarán para determinados tipos de simetrías.

Por tanto la expresión de los observables transformados está dada por:

$$\left. \begin{aligned} A|\Phi_n\rangle &= a_n|\Phi_n\rangle \\ A'|\Phi'_n\rangle &= a_n|\Phi'_n\rangle \end{aligned} \right\} \Rightarrow \left. \begin{aligned} A'U|\Phi_n\rangle &= a_nU|\Phi_n\rangle \\ (U^{-1}A'U)|\Phi_n\rangle &= a_n|\Phi_n\rangle \end{aligned} \right\} \Rightarrow \boxed{A' = UAU^{-1}}$$

Si enfocamos nuestra atención a las transformaciones infinitesimales:

$$U(s) \simeq I + \left. \frac{dU}{ds} \right|_{s=0} \cdot s$$

la unitariedad demanda:

$$UU^+ \simeq I + s \left[\left. \frac{dU}{ds} + \frac{dU^+}{ds} \right] \Big|_{s=0} = I$$

que implica que la derivada será de tipo imaginario puro:

$$\left. \frac{dU}{ds} \right|_{s=0} = iG \quad \text{con} \quad G = G^+$$

luego suponiendo $U(0) = I$ esos operadores unitarios deben tener la forma

$$U(s) = e^{iGs}$$

siendo G los generadores de las transformaciones asociadas a los parámetros s . En el caso general multiparamétrico tendríamos las relaciones

$$\begin{aligned} U(s) &= \prod e^{is_\alpha G_\alpha} \\ U(s) &\simeq I + is_\alpha G_\alpha \end{aligned}$$

Estos generadores obedecerán, como vimos en el capítulo de teoría de grupos, una serie de relaciones de conmutación. Si consideramos dos transformaciones y sus inversas:

$$e^{isG_\mu} e^{isG_\nu} e^{-isG_\mu} e^{-isG_\nu} \simeq I + s^2 [G_\mu, G_\nu]$$

y teniendo en cuenta que cualquier composición de transformaciones debe equivaler, salvo fase, a otra transformación del grupo, se tiene, observando que:

$$e^{i\omega} U(s) = e^{i\omega} \prod_{\alpha} e^{is_{\alpha} G_{\alpha}} = \prod_{\alpha} e^{is_{\alpha} G_{\alpha} + \omega} \simeq I + is_{\alpha} G_{\alpha} + i\omega I$$

que el conmutador de dos generadores será una combinación lineal de generadores y el operador identidad:

$$[G_{\mu}, G_{\nu}] = ic_{\mu\nu}^{\lambda} G_{\lambda} + ib_{\mu\nu} I$$

en donde el último término se puede hacer cero haciendo $\omega = 0$ y las constantes c serán fruto de la idiosincrasia de las transformaciones a considerar.

14.3. Ecuaciones del movimiento. Partícula libre

En el caso que nos ocupa la dinámica de una partícula libre, suponiendo velocidades no relativistas, debería ser invariante bajo las transformaciones del grupo de Galileo, cuyos 10 parámetros definen, como se sabe, los siguientes operadores unitarios asociados a cada simetría:

$$\begin{aligned} \text{Rotaciones}(R_{\alpha}(\theta_{\alpha})\vec{x}) &\rightarrow e^{-i\theta_{\alpha} I_{\alpha}} \\ \text{Traslaciones}(x_{\alpha} + a_{\alpha}) &\rightarrow e^{-ia_{\alpha} P_{\alpha}} \\ \text{Velocidad}(x_{\alpha} + v_{\alpha} t) &\rightarrow e^{iv_{\alpha} G_{\alpha}} \\ \text{Evolución temporal}(t + s) &\rightarrow e^{isH} \end{aligned}$$

en donde se introducen signos menos por convención. Para hallar las ecuaciones del movimiento nos preguntaremos por la evolución temporal:

$$\begin{aligned} t &\rightarrow t' = t + s \\ |\Psi(t)\rangle &\rightarrow e^{isH} |\Psi(t)\rangle = |\Psi(t - s)\rangle \end{aligned}$$

es decir, haciendo $s = t$:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-itH} |\Psi(0)\rangle \Rightarrow \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = -iH |\Psi(t)\rangle$$

que constituirá la ecuación del movimiento de la función de onda. Por razones históricas es conveniente redefinir el operador H por H/\hbar (eventualmente se usará un sistema de unidades en el que $\hbar = 1$), quedando la ecuación del movimiento como:

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} |\Psi(t)\rangle = H(t) |\Psi(t)\rangle}$$

en donde el generador H es el *hamiltoniano* del sistema. Destacar que muchos textos introducen esta ecuación como uno de los postulados de la Mecánica Cuántica.

14.4. Imágenes de evolución temporal

Siguiendo con nuestra discusión, vamos a sacar la ecuación de evolución para el operador estado. Primero observemos que la evolución de la función de onda desde un instante inicial t_0 está dada por:

$$|\Psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle$$

Este operador evolución deberá satisfacer por tanto también la ecuación del movimiento:

$$i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} = H(t)U(t, t_0) \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial U}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} H U \\ \frac{\partial U^+}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} U^+ H \end{array} \right\} \Rightarrow U(t, t_0) = I - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') U(t', t_0) dt'$$

en donde lógicamente se supone que $U(t_0) = I$.

Si H es independiente del tiempo (sistemas conservativos) el operador evolución tendrá la forma:

$$U(t, t_0) = e^{-i(t-t_0)H/\hbar}$$

de lo contrario no tendrá una forma concreta y dependerá del caso a estudiar. Vamos a ver qué sucede con los operadores estado. Supongamos que no perdemos generalidad al considerar un operador representando un estado puro:

$$\rho(t) = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)| = U(t, t_0)|\Psi(t_0)\rangle\langle\Psi(t_0)|U^+(t, t_0) \Rightarrow \rho(t) = U(t, t_0)\rho(t_0)U^+(t, t_0)$$

Derivando respecto al tiempo y usando la ecuación del movimiento para U se tiene:

$$\boxed{i\hbar \frac{d\rho}{dt} = [H(t), \rho(t)]}$$

Si prestamos nuestra atención a la evolución temporal de los valores medios de los observables:

$$\langle A \rangle (t) = Tr\{\rho(t)A\}$$

vemos que hasta ahora hemos supuesto que la dependencia temporal explícita la lleva el estado, esta es la llamada **imagen de Schrödinger**, pero observando que:

$$\langle A \rangle (t) = Tr\{U(t, t_0)\rho(t_0)U^+(t, t_0)A\} = Tr\{\rho(t_0)U^+(t, t_0)AU(t, t_0)\}$$

podemos suponer que la dependencia temporal la llevan los operadores observables, definiendo:

$$A_H(t) \equiv U^+(t, t_0)AU(t, t_0) \Rightarrow \langle A \rangle (t) = Tr\{\rho(t_0)A_H(t)\}$$

lo que constituye la llamada **imagen de Heisenberg**, en donde son las variables dinámicas las que evolucionan.

En el caso de un estado puro, las medias tienen la forma, en la imagen de Schrödinger y en la de Heisenberg respectivamente:

$$\begin{aligned}\langle A \rangle (t) &= \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle \\ \langle A \rangle (t) &= \langle \Psi(t_0) | A_H(t) | \Psi(t_0) \rangle\end{aligned}$$

Podemos deducir las ecuaciones de evolución de los observables en la imagen de Heisenberg, suponiendo que el hamiltoniano también se desarrolla en esa imagen:

$$\begin{aligned}\frac{dA_H(t)}{dt} &= \frac{\partial U^+}{\partial t} A U + U^+ A \frac{\partial U}{\partial t} + U^+ \frac{\partial A}{\partial t} U = \frac{i}{\hbar} U^+ H A U - \frac{i}{\hbar} U^+ A H U + U^+ \frac{\partial A}{\partial t} U = \\ &= \frac{i}{\hbar} [H_H(t), A_H(t)] + \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)_H\end{aligned}$$

En esta imagen el operador estado sólo dará cuenta de los datos iniciales de la preparación del experimento. La evolución de la media será por tanto:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle (t) = Tr \left\{ \frac{i}{\hbar} \rho(t_0) [H_H(t), A_H(t)] + \rho(t_0) \left(\frac{\partial A}{\partial t} \right)_H \right\}$$

mientras que en la imagen de Schrödinger tendremos la fórmula similar:

$$\frac{d}{dt} \langle A \rangle (t) = Tr \left\{ \frac{i}{\hbar} \rho(t) [H, A] + \rho(t) \frac{\partial A}{\partial t} \right\}$$

En el caso de un estado puro la fórmula general de evolución de un valor esperado está dada por:

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | A(t) | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi(t) | [A(t), H(t)] | \Psi(t) \rangle + i\hbar \langle \Psi(t) | \frac{dA(t)}{dt} | \Psi(t) \rangle} \quad (14.1)$$

lo que indica que para un sistema arbitrario la evolución del valor esperado de un observable es debida en parte a la evolución del vector estado y en parte a la dependencia explícita en el tiempo del observable.

De aquí también se puede apreciar que una constante del movimiento es un observable que no depende explícitamente del tiempo y que conmuta con H :

$$A \text{ cte del movimiento} \Leftrightarrow \begin{cases} \frac{\partial A}{\partial t} = 0 \\ [A, H] = 0 \end{cases}$$

de lo que se deduce que para sistemas conservativos el hamiltoniano será una constante del movimiento.

14.5. Representación de posición

Asumiendo que el espacio es continuo y que las tres componentes del vector posición $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ de la partícula son cinemáticamente independientes, podemos suponer que los operadores que las representan son mutuamente conmutativos, lo que equivale a decir que poseen un conjunto común de autovectores, de forma que:

$$X_i|x\rangle = x_i|x\rangle$$

La representación de posición o representación en el espacio de posiciones o de coordenadas o de configuración del espacio de Hilbert que estudiamos será aquella en donde los vectores estén desarrollados en la base ortonormal de la posición, es decir:

$$|\Psi\rangle = \int_{\mathbb{R}^3} dx \langle x|\Psi\rangle |x\rangle$$

con las relaciones de ortonormalidad y cierre habituales para los espacios continuos:

$$\begin{aligned} \langle x'|x\rangle &= \delta(x' - x) \\ \int_{\mathbb{R}^3} dx |x\rangle \langle x| &= I \end{aligned}$$

Los coeficientes en la expansión definen funciones de variable continua que a menudo se suelen identificar con la función de onda propiamente dicha, por ser esta la definición original:

$$\Psi(x) \equiv \langle x|\Psi\rangle$$

Los operadores actuarán por simplicidad indistintamente en el espacio de Hilbert o en el espacio funcional. Para ver la forma que tiene el operador momento en esta representación debemos recordar su papel de generador de traslaciones:

$$e^{-iaP/\hbar}|x\rangle = |x + a\rangle$$

de forma que, para traslaciones infinitesimales

$$\langle x + a|\Psi\rangle = \langle x|e^{iaP/\hbar}|\Psi\rangle \simeq \langle x|I + \frac{iaP}{\hbar}|\Psi\rangle$$

que en el espacio funcional toma la forma

$$\Psi(x + a) \simeq \Psi(x) + \frac{iaP}{\hbar}\Psi(x)$$

comparándolo con el desarrollo de Taylor en análisis tenemos que

$$\boxed{P = -i\hbar\nabla}$$

cuyas componentes en coordenadas cartesianas tienen la forma simple

$$P_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \quad P_y = -i\hbar\frac{\partial}{\partial y} \quad P_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z}$$

apariencia que no es tan sencilla en cualquier otro tipo de coordenadas generalizadas.

La **ecuación de onda de Schrödinger** para una partícula sometida a un potencial escalar $V(x)$ vendrá dada por la expresión del hamiltoniano no relativista, que suponemos que es, en la representación de posición:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + V(x) \quad \text{con} \quad \Delta \equiv \nabla^2$$

y por tanto tenemos

$$\boxed{\left[\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + V(x) \right] \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t)}$$

14.6. Ecuación de continuidad

Una de las observaciones que hay que hacer acerca de la ecuación de Schrödinger es que, como no podía ser de otra manera, conserva la norma del vector de estado:

$$\frac{d}{dt} \langle \Psi | \Psi \rangle = \left[\frac{d}{dt} \langle \Psi | \right] | \Psi \rangle + \langle \Psi | \frac{d}{dt} | \Psi \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle \Psi | H^+ | \Psi \rangle + \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi | H | \Psi \rangle = 0$$

que es una forma equivalente de expresar la unitariedad de la evolución o la hermiticidad del hamiltoniano.

Ahora vamos a ir más allá y vamos a ver cómo evoluciona la probabilidad, para cerciorarnos de que no encontremos fuentes ni sumideros de la misma en nuestro dominio de definición. Para ello vamos a definir la llamada **densidad de probabilidad** como

$$|\langle x | \Psi \rangle|^2 = \langle \Psi | x \rangle \langle x | \Psi \rangle = \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) = |\Psi(x, t)|^2$$

que nos daría, como vimos en el postulado III, si la integramos sobre un volumen dado, la probabilidad de que la partícula se encuentre en ese volumen en el instante t . Veamos pues cómo evoluciona en dos instantes de tiempo:

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} dx |\Psi(x, t_0)|^2 &= \int_{\mathbb{R}^3} dx \langle \Psi(t_0) | x \rangle \langle x | \Psi(t_0) \rangle = \langle \Psi(t_0) | \Psi(t_0) \rangle = \\ &= \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} dx |\Psi(x, t)|^2 \end{aligned}$$

en donde se ha usado la conservación de la norma. Por otra parte podemos escribir, para un volumen arbitrario Ω , usando la ecuación de Schrödinger:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \Psi^* \Psi dx &= \int_{\Omega} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) dx = \frac{i\hbar}{2m} \int_{\Omega} (\Psi^* \Delta \Psi - \Psi \Delta \Psi^*) = \\ &= \frac{i\hbar}{2m} \int_{\Omega} \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) dx \equiv - \int_{\Omega} \nabla \cdot \vec{J} dx = - \oint_S \vec{n} \cdot \vec{J} ds \end{aligned}$$

en donde se ha usado el teorema de la divergencia de Gauss, siendo \vec{n} el vector unitario normal hacia el exterior de Ω , y la llamada **densidad de corriente de probabilidad**:

$$\vec{J}(x, t) \equiv \frac{-i\hbar}{2m} [\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*] = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\Psi^* \nabla \Psi)$$

y, como la región Ω es arbitraria, llegamos a la ecuación de continuidad:

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} |\Psi(x, t)|^2 + \nabla \cdot \vec{J}(x, t) = 0}$$

formalmente idéntica a la ecuación de un fluido sin fuentes ni sumideros, es decir, la probabilidad se propaga como un fluido.

Lógicamente, si elegimos el volumen de integración de forma que coincida con todo el espacio tridimensional, debido a las condiciones de acotación de la norma la función de onda se anulará en la superficie del infinito, el segundo término de la ecuación de continuidad se anulará y recuperaremos la conservación de la norma propiamente dicha. En la mayoría de los casos esto de hecho sucederá aún si restringimos nuestro volumen al dominio del problema.

14.7. Soluciones de la ecuación de Schrödinger

14.7.1. Método general

Para hallar soluciones de la ecuación se suele ensayar el método de separación de variables, que funciona siempre que la energía potencial no dependa del tiempo, y consiste en suponer para la función de onda la forma factorizada:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t)$$

llegando a la conclusión de que esta función debe ser de la forma:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar} = \psi(x)e^{-i\omega t}$$

en donde E es la energía total de la partícula, ω la frecuencia angular de la onda asociada y la parte espacial debe satisfacer la llamada **ecuación de Schrödinger independiente del tiempo**:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

14.7.2. Potencial cero. Partícula libre

En este caso la ecuación se reduce, teniendo en cuenta la expresión clásica de la energía cinética ($E = p^2/2m$), llegando a la ecuación:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\left(\frac{p}{\hbar}\right)^2 \psi(x) = -k^2\psi(x)$$

en donde k es el llamado **número de onda angular**, inverso de la longitud de onda, que se deduce de la relación de **de Broglie** $p = \hbar k$, y las soluciones serán de la forma:

$$\psi(x) = e^{ikx}$$

con lo que una solución particular de la ecuación de Schrödinger será la onda plana monocromática:

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

sin olvidar que la frecuencia depende de la longitud de onda por la relación de dispersión de la partícula libre:

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}$$

Esta solución describe una onda viajera ya que, por ejemplo, los nodos de su parte real se encuentran en los puntos $x = (n + 1/2)\pi/k + \omega t/k$, que se van desplazando con el tiempo.

La densidad de probabilidad en este caso no nos aporta información ya que las amplitudes de las ondas son las mismas en todas las regiones espaciales:

$$|\psi^* \psi| = |A|^2 \quad \forall x$$

lo que indica que la partícula se encontrará con la misma probabilidad en cualquier punto del espacio. Podemos calcular el valor medio del momento de la partícula, que estará dado por:

$$\begin{aligned} \langle P \rangle_{|\Psi\rangle} &= \langle \Psi | P | \Psi \rangle = \int \int dx' dx \Psi^*(x', t) \langle x' | \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) \right) | x \rangle = \\ &= \hbar k \int \int dx' dx \Psi^*(x', t) \Psi(x, t) \langle x' | x \rangle = \hbar k \int dx |\Psi(x, t)|^2 = p = \sqrt{2mE} \end{aligned}$$

en donde hemos hecho actuar la delta de Dirac y la condición de normalización.

No obstante, la solución de partícula libre a la ecuación de onda no es normalizable en todo el espacio, no pertenece a las funciones de cuadrado integrable y no se ajustaría a los postulados de la Mecánica Cuántica. Este es un viejo caballo de batalla en la Física de los sistemas ideales, no sólo cuánticos, que a veces dan lugar a inconsistencias matemáticas. Para empezar, tampoco tiene mucho sentido el considerar todo el espacio euclídeo como el laboratorio de nuestra partícula. Además, un sentido mucho más realista del problema es considerarlo como un proceso límite de un verdadero fenómeno físico descrito por un paquete de onda, es decir un grupo de ondas viajeras. En efecto, es muy aventurado asegurar que la partícula se encuentra en un estado con un momento lineal perfectamente definido, se acerca más a la realidad suponer una distribución de momentos. De este modo la densidad de probabilidad correspondiente será más aproximada a la descripción del movimiento de la partícula libre. No obstante, las matemáticas necesarias para describir el grupo de ondas analíticamente son muy complicadas y las dejaremos para un capítulo posterior.

En cualquier caso, para hacernos una idea más aproximada de lo que estamos hablando, podemos hacer una descripción aproximada del comportamiento de un paquete de ondas

suponiendo una distribución en números de onda (es decir, energías, momentos) debida tan solo a dos componentes ondulatorias:

$$\Psi(x, t) = \Psi_1(x, t) + \Psi_2(x, t) \begin{cases} \Psi_1(x, t) = \cos(kx - \omega t) \\ \Psi_2(x, t) = \cos[(k + dk)x - (\omega + d\omega)t] \end{cases}$$

usando la identidad trigonométrica:

$$\cos A + \cos B = 2\cos\left(\frac{A+B}{2}\right)\cos\left(\frac{A-B}{2}\right)$$

encontramos la expresión (para $dk \ll 2k$ y $d\omega \ll 2\omega$):

$$\Psi(x, t) \simeq 2\cos\left(\frac{dk}{2}x - \frac{d\omega}{2}t\right)\cos(kx - \omega t)$$

que podemos representar, para los instantes $t = 0$ y $t = 20$, en cualquier programa de representación online como el *Wolfram Alpha* o el propio *Google*, con los valores correspondientes a $\hbar = m = k = 1$, obteniendo algo como en la figura 14.1, en donde se ve claramente el viaje del grupo y cómo la densidad de probabilidad sería más aproximada a nuestra experiencia.

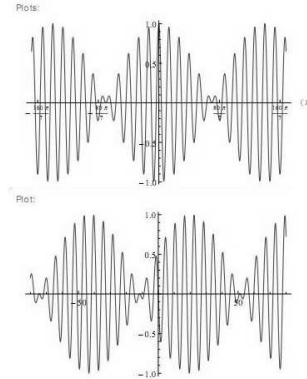


Figura 14.1: Paquete de ondas

Vemos que el segundo factor de la onda es como la inicial pero modulada por el primer factor, de forma que las oscilaciones de Ψ caen dentro de una envolvente cuya amplitud varía periódicamente. Las ondas se interfieren y se refuerzan alternativamente.

La velocidad de las ondas individuales se puede evaluar considerando el segundo factor en los nodos de la función:

$$x_n = \frac{\pi}{k}\left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\omega}{k}t \Rightarrow v_1 = \frac{\omega}{k} = \frac{E/\hbar}{p/\hbar} = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2}$$

vemos que esta velocidad de la onda no es igual a la velocidad de la partícula que representa. Esto es así porque la velocidad que debe tener correspondencia con la partícula es la llamada **velocidad de grupo**, que se evalúa considerando los nodos del primer factor de la onda:

$$x_n = \frac{\pi}{dk}(2n + 1) + \frac{d\omega}{dk}t \Rightarrow v_2 = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = v$$

Estas consideraciones sobre el movimiento de la partícula se pueden continuar calculando los valores promedios de los observables y recuperando, al menos formalmente, las leyes de la Mecánica Clásica, lo que constituye el contenido del llamado **teorema de Ehrenfest**.

14.7.3. Potencial cuadrado

Como hemos visto, el estudio de la partícula libre no arroja ninguna condición para la energía. Vamos a empezar a ver ahora los llamados **estados ligados**, que como veremos darán lugar naturalmente al hecho típico de la Mecánica Cuántica de que la energía suele estar discretizada o cuantizada en sólo unos estados permitidos determinados por el problema.

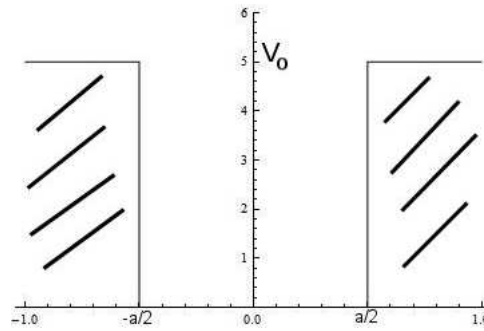


Figura 14.2: Pozo cuadrado de potencial

El más sencillo de estos problemas es el del pozo cuadrado, en donde tenemos una zona de ancho a en donde la partícula no se ve sometida a potencial alguno y a ambos lados de esta zona se tiene un potencial constante de altura V_0 . En la figura 14.2 vemos un esquema y el potencial concreto tiene la forma:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & |x| < a/2 \\ 0 & |x| > a/2 \end{cases}$$

Lógicamente se trata de una situación idealizada, pero puede servir para estudiar cualitativamente sistemas físicos sencillos como un electrón de conducción en un bloque de metal. Por supuesto supondremos los casos en que la energía de la partícula sea menor que la altura del pozo:

$$E < V_0$$

para los que, según la Mecánica Clásica, la partícula sólo podría estar en la región $|x| < a/2$ (dentro del pozo).

La solución general de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo dentro del pozo es la que hayamos para la partícula libre, esta vez con las constantes de integración añadidas:

$$\psi_1(x) = A'e^{ik_1x} + B'e^{-ik_1x} \quad \text{con} \quad |x| \leq \frac{a}{2} \quad \text{y} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

que representa ondas que viajan en sentido positivo y negativo de x respectivamente. No obstante, la simetría del problema sugiere la igualdad en valor absoluto de las constantes de integración, lo que lleva a considerar mejor las siguientes soluciones generales:

$$\psi_1(x) = A \operatorname{sen}(k_1x) + B \operatorname{cos}(k_1x) \quad \text{con} \quad |x| \leq \frac{a}{2} \quad \text{y} \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

suma de dos ondas estacionarias en donde se conocerá el momento de la partícula pero no su sentido de movimiento.

Para el caso hipotético en que la partícula se encuentre fuera del pozo, como su energía es menor que la potencial, la ecuación a resolver será:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi(x) \equiv k^2\psi(x)$$

que tendrá las soluciones, en la regiones que llamaremos **0** ($x < a/2$) y **1** ($x > a/2$), que a continuación se detallan:

$$\psi_0(x) = Ce^{k_2x} + De^{-k_2x} \quad \text{con } x < -\frac{a}{2} \quad \text{y } k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

$$\psi_2(x) = Fe^{k_2x} + Ge^{-k_2x} \quad \text{con } x > \frac{a}{2} \quad \text{y } k_2 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Estas ondas estacionarias no tienen nodos, pero deben superponerse con las ondas estacionarias del interior del pozo que sí tienen nodos. El hecho de que la función de onda debe ser normalizable anula las ramas divergentes de las soluciones, con lo que $D = F = 0$, con lo que las soluciones en esas zonas del pozo quedarían:

$$\psi_0(x) = Ce^{k_2x} \quad \text{y} \quad \psi_2(x) = Ge^{-k_2x}$$

Nos resta obtener por tanto las cuatro ecuaciones más para las constantes restantes, y eso se realiza demandando que ψ y $d\psi/dx$ sean continuas en las dos fronteras. Los cálculos nos llevan a dos ecuaciones trascendentes que se deben satisfacer independientemente, es decir, hay dos conjuntos de soluciones, las correspondientes a función de onda par:

$$\left\{ \begin{array}{l} k_1 \operatorname{tg}(k_1 a/2) = k_2 \\ A = 0 \\ G - C = 0 \end{array} \right\}$$

$$\psi_p(x) = \begin{cases} [B \cos(k_1 a/2) e^{k_2 a/2}] e^{k_2 x} & x < -a/2 \\ B \cos(k_1 x) & |x| < a/2 \\ [B \cos(k_1 a/2) e^{k_2 a/2}] e^{-k_2 x} & x > a/2 \end{cases}$$

y las correspondientes a la función de onda impar:

$$\left\{ \begin{array}{l} k_1 \operatorname{ctg}(k_1 a/2) = -k_2 \\ B = 0 \\ G + C = 0 \end{array} \right\}$$

$$\psi_i(x) = \begin{cases} [-A \operatorname{sen}(k_1 a/2) e^{k_2 a/2}] e^{k_1 x} & x < -a/2 \\ A \operatorname{sen}(k_1 x) & |x| < a/2 \\ [B \operatorname{sen}(k_1 a/2) e^{-k_2 a/2}] e^{-k_2 x} & x > a/2 \end{cases}$$

Las constantes se ajustan por las condiciones de normalización. Un ejemplo de la forma de estas funciones se puede ver en la figura 14.3.

El hecho de que la paridad de las soluciones esté definida es consecuencia de que la ecuación de Schrödinger de partida es invariante bajo el cambio $x \rightarrow -x$ y lo podíamos haber supuesto de inicio llegando a la misma forma de solución.

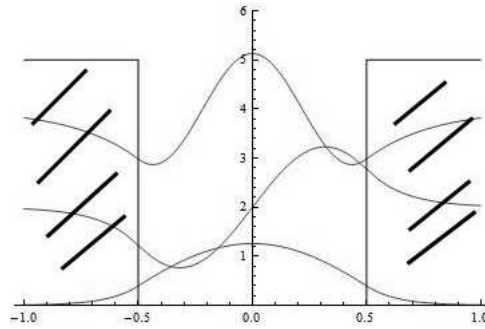


Figura 14.3: Primeros tres estados

Los niveles de energía y por tanto la escala concreta de las autofunciones hay que calcularla resolviendo numéricamente las dos ecuaciones trascendentes halladas:

$$k_1 \operatorname{tg}(k_1 a/2) = k_2 \quad (\text{pares})$$

$$k_1 \operatorname{ctg}(k_1 a/2) = -k_2 \quad (\text{impares})$$

lo cual se puede hacer en cada caso por varios métodos, y en donde se encuentran como dijimos al inicio las energías discretizadas correspondientes a los puntos de corte de las gráficas (figura 14.4).

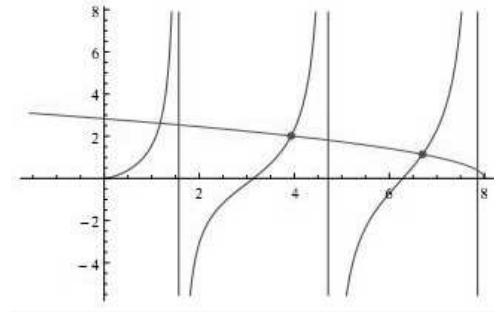


Figura 14.4: Soluciones de energía

De esta forma encontramos que sólo existen un número restringido de valores permitidos de la energía para $E < V_0$ que corresponderán a los estados ligados de la partícula, estando permitido cualquier valor para $E > V_0$, es decir, ahí formarán un continuo como en el caso de la partícula libre. Tendremos al menos un estado ligado dependiendo de la altura del pozo, correspondiente a una función par.

Una de las consecuencias más notables de estos primeros cálculos cuánticos es que **hay regiones no accesibles por la Mecánica Clásica en donde existe cierta probabilidad de encontrar a la partícula**. Esto es así porque en las paredes del pozo finito la función de onda no se hace nula, sino que existe cierto rango de penetración. Esta distancia de penetración, para el caso de un electrón en un metal, por ejemplo, es del orden de las dimensiones atómicas y en la mayoría de los casos muy pequeña respecto al ancho del pozo. Esto sugiere tratar con otro ejemplo límite en el cual el pozo de potencial tenga un valor inaccesible o infinito (en el caso del metal sería una superficie del metal cuya distribución de carga creara un potencial neto insalvable para el electrón).

Por tanto el siguiente paso natural es considerar el llamado **potencial cuadrado infinito** o pozo de paredes infinitas, que a menudo se conoce como el estudio de la partícula en una caja (figura 14.5). En este caso todos los estados están ligados y por tanto la energía está cuantizada en todo su dominio.

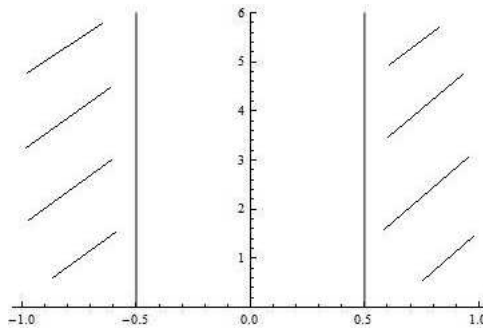


Figura 14.5: Pozo cuadrado infinito

La forma analítica vendría dada en este caso por:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & |x| > a/2 \\ 0 & |x| < a/2 \end{cases}$$

como se vio las soluciones dentro del pozo tienen la forma estacionaria:

$$\psi(x) = A \operatorname{sen}(kx) + B \operatorname{cos}(kx) \quad \text{con} \quad |x| < a/2 \quad \text{y} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

En este caso, a diferencia del caso del pozo finito, no puede haber regiones de penetración en la barrera en donde la función de onda sea no nula. Esto es así por las características del límite:

$$\lim_{V_0 \rightarrow \infty} e^{-\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}x} = 0$$

y la función de onda deberá ser

$$\psi(x) = 0 \quad |x| \geq a/2$$

y como consecuencia la onda estacionaria en este caso tendrá nodos en las paredes de la caja y además no podremos exigir continuidad a la derivada en esos puntos.

Aplicando estas condiciones en los dos puntos frontera obtenemos:

$$\left. \begin{aligned} A \operatorname{sen}(ka/2) + B \operatorname{cos}(ka/2) &= 0 \\ -A \operatorname{sen}(ka/2) + B \operatorname{cos}(ka/2) &= 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{cases} 2B \operatorname{cos}(ka/2) = 0 \\ 2A \operatorname{sen}(ka/2) = 0 \end{cases}$$

que son precisamente las condiciones de cuantificación que, al no poder satisfacerse simultáneamente, definen de nuevo dos clases de autofunciones, pares e impares:

$$\begin{aligned} \psi_p(x) &= B \operatorname{cos}(kx) \quad \text{con} \quad \operatorname{cos}(ka/2) = 0 \\ \psi_i(x) &= A \operatorname{sen}(kx) \quad \text{con} \quad \operatorname{sen}(ka/2) = 0 \end{aligned}$$

Las ecuaciones trascendentes para el número de onda (y por tanto la energía) en esta ocasión son triviales y conducen a las soluciones:

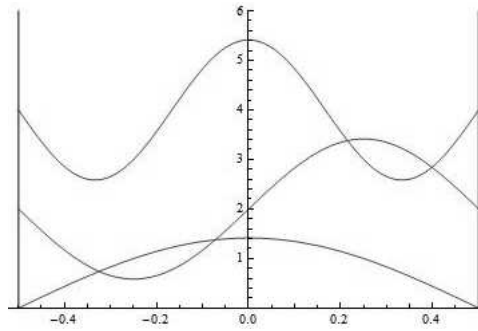


Figura 14.6: Funciones de onda en una caja

$$k_n = \frac{n\pi}{a} \Rightarrow E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2} \quad (n = 1, 2, 3, \dots)$$

en donde se ha ignorado la solución $n = 0$ porque correspondería a una función de onda idénticamente nula y, por tanto, a la inexistencia de la partícula. De aquí se deduce otra de las características de la Mecánica Cuántica, que la partícula no puede tener energía total cero, es decir, la energía de punto cero o energía más baja que puede tener la partícula será:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

este resultado es consecuencia del principio de incertidumbre que veremos más adelante.

Las condiciones de normalización para las funciones de onda arrojarán valores concretos para las constantes:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = \int_{-a/2}^{a/2} dx A^2 \text{sen}^2(kx) = \int_{-a/2}^{a/2} dx A^2 \left[\frac{1 - \cos(2kx)}{2} \right] = \frac{A^2 a}{2}$$

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2 = \int_{-a/2}^{a/2} dx B^2 \text{cos}^2(kx) = \int_{-a/2}^{a/2} dx B^2 \left[\frac{1 + \cos(2kx)}{2} \right] = \frac{B^2 a}{2}$$

con lo que la expresión final de estas funciones será

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \cos\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (\text{pares})$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{a}\right) \quad (\text{impares})$$

que se pueden ver en la figura 14.6 para $a = 1$.

14.8. El oscilador armónico unidimensional

El primer caso realista de potencial lo constituye el oscilador armónico. Este potencial es de enorme importancia ya que se puede obtener su solución analíticamente y es modelo para multitud de sistemas físicos, desde el estudio de las vibraciones de átomos en moléculas

diatómicas hasta las vibraciones de las ondas electromagnéticas en teoría cuántica de campos.

Para vibraciones pequeñas escogiendo adecuadamente los ejes el potencial a estudiar tiene la forma parabólica:

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

donde k es la llamada constante de recuperación, ya que una partícula que se mueva sobre su influencia experimentará una fuerza restauradora lineal $F = -kx$ (**ley de Hooke**).

14.8.1. Método analítico

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo tendrá la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{k}{2}x^2\psi = E\psi$$

teniendo en cuenta la expresión de la frecuencia clásica de oscilación:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

la ecuación resulta

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(\frac{\omega m}{\hbar} \right)^2 x^2 \right] \psi = 0$$

Por comodidad se introducen los parámetros:

$$\alpha \equiv \sqrt{\frac{\omega m}{\hbar}} \quad \beta \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}$$

con lo que la ecuación a resolver será

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + [\beta - \alpha^4 x^2] \psi = 0$$

Rescalando la variable x adecuadamente se puede poner:

$$u \equiv \alpha x \Rightarrow \frac{d^2\psi}{du^2} + \left[\frac{\beta}{\alpha^2} - u^2 \right] \psi = 0$$

que para valores muy grandes de u toma la forma:

$$\frac{d^2\psi}{du^2} = u^2\psi \Rightarrow \psi = Ae^{-u^2/2} + Be^{u^2/2}$$

pero como la función de onda debe converger en el infinito se tiene:

$$\psi(u) = Ae^{-u^2/2} \quad |u| \rightarrow \infty$$

lo cual sugiere que se busquen soluciones generales de la forma:

$$\psi(u) = AH(u)e^{-u^2/2}$$

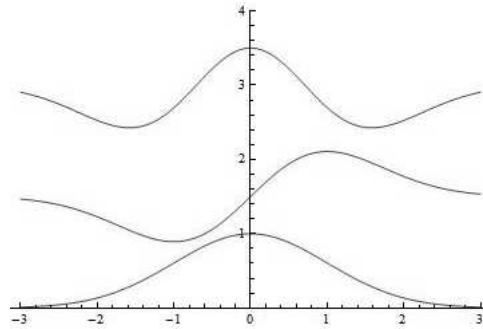


Figura 14.7: Primeros tres estados

de forma que $H(u)$ no explote en el infinito como una exponencial. Sustituyendo en la ecuación se tiene, para la función $H(u)$:

$$\frac{d^2 H}{du^2} - 2u \frac{dH}{du} + \left(\frac{\beta}{\alpha^2} - 1 \right) H = 0$$

ecuación diferencial que, al contrario que la original, se puede resolver por la **técnica de series de potencias**. Identificando coeficientes y obteniendo relaciones de recurrencia entre ellos, se obtiene la solución en términos de dos series (una par y otra impar):

$$H(u) = a_0 + a_1 u + \dots \Rightarrow a_{l+2} = \frac{-(\beta/\alpha^2 - 1 - 2l)}{(l+1)(l+2)} a_l \Rightarrow \begin{cases} H(u) = a_0 \left(1 + \frac{a_2}{a_0} u^2 + \frac{a_4}{a_2} \frac{a_2}{a_0} u^4 + \dots \right) + \\ + a_1 \left(u + \frac{a_3}{a_1} u^3 + \frac{a_5}{a_3} u^5 + \dots \right) \end{cases}$$

De nuevo imponemos convergencia. Es claro que para u grandes los términos de las potencias bajas en u no son considerables, pero las razones de los términos de potencias altas de las series son análogos a los de la exponencial cuadrática:

$$\frac{a_{l+2}}{a_l} \simeq \frac{2}{l}$$

$$e^{u^2} = 1 + u^2 + \frac{u^4}{2!} + \dots + \frac{u^l}{(l/2)!} + \frac{u^{l+1}}{(l/2+1)!} + \dots \Rightarrow \frac{1}{(l/2+1)!} \simeq \frac{2}{(l/2)!}$$

como esta función no converge, hay que cortar la serie de potencias en algún valor de $l = n$, definido por

$$\beta/\alpha^2 - 1 - 2n = 0 \Rightarrow \frac{\beta}{\alpha^2} = 2n + 1$$

$$n = 1, 3, 5, \dots \quad \text{si } a_0 = 0$$

$$n = 0, 2, 4, \dots \quad \text{si } a_1 = 0$$

Esta solución resultante ya no define una serie infinita sino unos polinomios llamados **polinomios de Hermite**:

$$\Psi_n(u) = A_n e^{-u^2/2} H_n(u)$$

$$\Psi_n(x) = A_n e^{-\alpha^2 x^2/2} H_n(\alpha x) \quad (14.2)$$

en donde la regla de cuantificación obtenida ahora se puede poner como

$$\left. \begin{aligned} \alpha &= \sqrt{\frac{\omega m}{\hbar}} \\ \beta &= \frac{2mE}{\hbar^2} \end{aligned} \right\} \Rightarrow E = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (14.3)$$

Las funciones $\psi_{2n}(x)$ son pares y las $\psi_{2n+1}(x)$ son impares. La constante de normalización toma la forma:

$$A_n = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi} 2^n n!}}$$

Teniendo en cuenta que los primeros polinomios de Hermite son de la forma:

$$\begin{aligned} H_0(x) &= 1 \\ H_1(x) &= 2x \\ H_2(x) &= 2 - 4x^2 \\ &\vdots \end{aligned}$$

podemos ver en la figura 14.7 la representación gráfica de los primeros autoestados.

Los niveles de energía son análogos a los deducidos por Planck y los físicos de la teoría cuántica antigua, salvo que aquí la energía de punto cero es $\hbar\omega/2$ (como veremos que exige el principio de incertidumbre).

14.8.2. Método algebraico

Este método comienza por definir los operadores:

$$\begin{aligned} a &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(u + \frac{d}{du} \right) \\ a^+ &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \left(u - \frac{d}{du} \right) \\ N &\equiv a^+ a \end{aligned}$$

en donde el último es formalmente hermítico, como se puede ver sacando su expresión en términos de las variables dinámicas y el hamiltoniano:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{k}{2}X^2 \Rightarrow H = \frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{d^2}{du^2} + u^2 \right)$$

y por tanto

$$\boxed{H = \hbar\omega \left(a^+ a + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(N + \frac{1}{2} \right)} \quad (14.4)$$

de donde también se deducen las expresiones:

$$\boxed{\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha X + iP/\hbar\alpha) & a^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\alpha X - iP/\hbar\alpha) \\ X &= \frac{1}{\sqrt{2}\alpha}(a^+ + a) & P &= \frac{i\alpha\hbar}{\sqrt{2}}(a^+ - a) \end{aligned}} \quad (14.5)$$

Vamos a ver que en efecto los autovalores del operador N son los enteros no negativos, y es por esto por lo que se le conoce como **operador número**. Para empezar tengamos en cuenta los conmutadores:

$$[a, a^+] = I \quad [N, a] = -a \quad [N, a^+] = a^+$$

y supongamos que $|n\rangle$ es el autovector normalizado del operador N con autovalor n : $N|n\rangle = n|n\rangle$, entonces:

$$\begin{aligned} Na|n\rangle &= ([N, a] + aN)|n\rangle = (n-1)a|n\rangle \\ Na^+|n\rangle &= ([N, a^+] + a^+N)|n\rangle = (n+1)a^+|n\rangle \end{aligned}$$

es decir, $a|n\rangle$ y $a^+|n\rangle$ son autovectores de N con autovalores $n-1$ y $n+1$ respectivamente, dicho de otra forma, son proporcionales a los autovectores $|n-1\rangle$ y $|n+1\rangle$. La constante de proporcionalidad se calcula mediante la norma:

$$\begin{aligned} |a|n\rangle|^2 &= \langle n|a^+a|n\rangle = \langle n|N|n\rangle = n \\ |a^+|n\rangle|^2 &= \langle n|aa^+|n\rangle = \langle n|(N+1)|n\rangle = n+1 \end{aligned}$$

con esto ya queda claro que $n \geq 0$, es decir, N es definido positivo, aparte de deducirse las fórmulas:

$$\begin{aligned} a|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle \\ a^+|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle \end{aligned}$$

en donde en el primer caso n no podrá ser cero. A los operadores a y a^+ se los denomina **operadores destrucción y creación** respectivamente por estar relacionados con la desaparición y aparición de cuantos. Nótese que además $a|0\rangle = 0$.

Todavía no hemos demostrado que los n son enteros. Es muy fácil, por reducción al absurdo, imaginemos que existe un autovalor semientero q :

$$N|q\rangle = q|q\rangle \quad n < q < n + 1$$

es fácil darse cuenta de que se puede construir una cadena de autovectores $a^p|q\rangle$ de N con autovalores $q - p$:

$$\begin{aligned} Na|q\rangle &= (q - 1)a|q\rangle \\ Na^2|q\rangle &= (q - 2)a^2|q\rangle \\ &\vdots \\ Na^p|q\rangle &= (q - p)a^p|q\rangle \end{aligned}$$

y por tanto $a^n|q\rangle$ es autovector de N con autovalor $(q - n) > 0$, y si aplicamos a podemos construir el autovalor no nulo:

$$aa^n|q\rangle = (q - n - 1)a^n|q\rangle \quad q - n - 1 < 0$$

lo cual es absurdo ya que según vimos no podían existir esos autovalores negativos. Luego n debe ser un entero no negativo.

En resumen, hemos probado que los autoestados del hamiltoniano son de la forma

$$H|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega|n\rangle$$

que pueden ser generados a partir del fundamental como

$$\boxed{|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}(a^+)^n|0\rangle} \quad (14.6)$$

Si queremos recuperar la solución analítica, podemos hacerlo mediante:

$$a|0\rangle = 0 \Rightarrow \left(u + \frac{d}{du}\right)|0\rangle = 0 \Rightarrow |0\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}}}e^{-u^2/2}$$

y aplicando ahora el operador de creación se encuentra

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{2^{n/2}} \left(u - \frac{d}{du}\right)^n |0\rangle = \sqrt{\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}} H_n(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2}$$

Capítulo 15

EL PRINCIPIO DE INCERTIDUMBRE

15.1. Introducción

En los orígenes de la Mecánica Cuántica, poco después de que **Schrödinger** publicara su interpretación ondulatoria de la misma, el debate seguía siendo si se podrían deducir de la teoría trayectorias u órbitas determinadas para las partículas subatómicas, tal como parecían ser "observadas" en las llamadas **cámaras de Wilson** desarrolladas una década antes. Eran días de debate entre el formalismo matricial y el ondulatorio, días en donde **Bohr** estaba dando forma a su famoso *principio de complementariedad* y mantenía interesantísimas discusiones al respecto con Schrödinger. Cabe destacar que aunque en aquel momento la mecánica matricial defendida por el alemán **Werner Karl Heisenberg** parecía imponerse sobre la ondulatoria de Schrödinger, hoy en día los dos formalismos aparecen como complementarios, en la llamada *teoría de las transformaciones*, desarrollada independientemente por **Pascual Jordan** y **Paul Dirac**, en donde se estudian las conocidas *imágenes de evolución temporal* de Heisenberg y Schrödinger, según el caso. Como nota anecdótica vamos a incluir una cita de Heisenberg en una carta a **Pauli** el 8 de junio de 1926, en los tiempos en los que era más crítico con la visión de Schrödinger:

"cuanto más pienso en los aspectos físicos de la teoría de Schrödinger, más repulsiva me parece... Lo que Schrödinger dice de la visualización de su teoría 'no es probablemente cierto del todo', (alusión a un comentario de Bohr) en otras palabras: es una mierda". [18]

En este escenario Heisenberg publicó en 1927 en la revista *Zeitschrift für Physik* ("Diario de Física") uno de los artículos principales para entender los fundamentos de la Mecánica Cuántica, *Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik* ("Sobre el contenido ideológico de la cinemática y la mecánica cuántica teórica"), que parecía dar un espaldarazo a las teorías de Bohr y sentar las bases de la conocida interpretación de Copenhague.

No obstante, aunque se puede decir que las visiones de Bohr y Heisenberg salieron claramente victoriosas de aquel debate (Schrödinger nunca aceptó los "saltos cuánticos" y las

discontinuidades que al final se impusieron), hoy en día también es aceptado el hecho de que la ecuación de Schrödinger y su función de onda tienen mayor calado teórico que las relaciones de indeterminación que se pueden deducir de ciertas derivaciones del formalismo (a pesar de que ambos conceptos siguen apareciendo como postulados en muchos libros de Cuántica).

15.2. Deducción de Heisenberg

Aunque no es la derivación que hoy en día se puede encontrar en los libros de texto, vamos a recordar cuál fue el razonamiento original de Heisenberg en 1927. Para empezar él supuso el siguiente paquete de ondas gaussiano para la función de onda:

$$\psi(q) \propto e^{-\frac{q^2}{2(\delta q)^2}} \quad (15.1)$$

introduciendo la indeterminación δq de la posición de la partícula y obviando los factores de normalización. De esta forma se puede deducir utilizando la transformada de Fourier cuál es el aspecto que tendrá la correspondiente incertidumbre en el momento, calculando:

$$\phi(p) \propto \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{ipq}{\hbar}} \psi(q) dq = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{ipq}{\hbar}} e^{-\frac{q^2}{2(\delta q)^2}} dq$$

Para poder integrar con facilidad es conveniente completar el cuadrado que sugieren los exponentes exponenciales, es decir, utilizar la igualdad:

$$\frac{q^2}{(\delta q)^2} + \frac{2ipq}{\hbar} = \left(\frac{q}{\delta q} + \frac{ip\delta q}{\hbar} \right)^2 + \frac{p^2(\delta q)^2}{\hbar^2}$$

con lo que:

$$\phi(p) \propto e^{-\frac{p^2(\delta q)^2}{2\hbar^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{q}{\delta q} + \frac{ip\delta q}{\hbar} \right)^2} dq$$

que es de inmediata integración haciendo el cambio:

$$x = \frac{q}{\delta q} + \frac{ip\delta q}{\hbar}$$

con lo que se puede decir simplemente, obviando de nuevo las constantes, que

$$\phi(p) \propto e^{-\frac{p^2(\delta q)^2}{2\hbar^2}} \equiv e^{-\frac{p^2}{2(\delta p)^2}}$$

y el producto de las indeterminaciones será por tanto:

$$\delta q \delta p = \hbar$$

Aquí hay un problema. Esta expresión no nos suena del todo familiar. El hecho es que normalmente el principio de incertidumbre es enunciado a partir de las desviaciones estándar de las distribuciones de probabilidad, no a partir de las desviaciones de las funciones de onda, como se define en la ecuación (15.1). Como según la interpretación probabilística de Born la distribución de probabilidad nos la da el cuadrado de la función de onda, es obvio que las dos desviaciones están relacionadas con la fórmula:

$$\delta q = \sqrt{2}\Delta q$$

llegando, ahora sí, a la conocida expresión del producto de las desviaciones de la probabilidad:

$$\Delta q \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

15.3. Relaciones de conmutación

En el capítulo de la ecuación de Schrödinger vimos que en representación de posición los operadores posición y momento sobre el espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R})$ (funciones reales de cuadrado integrable) podían asociarse al llamado par de Schrödinger:

$$\left. \begin{array}{l} X = \text{multiplicación por } x \\ P = -i\hbar \frac{d}{dx} \end{array} \right\} \text{ en } L^2(\mathbb{R})$$

De aquí es fácil deducir las relaciones de conmutación que deben cumplir estos observables, llamada **cuantificación canónica**:

$$\boxed{\begin{array}{l} [X_i, X_j] = 0 \quad [P_i, P_j] = 0 \\ [X_i, P_j] = i\hbar\delta_{ij}I \end{array}} \quad (15.2)$$

Hay que hacer notar que la tercera relación no podría realizarse con matrices finitas, dado que entonces $Tr[A, B] = 0$ (y la traza de la identidad, obviamente, es no nula), pero sí se cumple en un par de Schrödinger como el apuntado arriba, y en general para cualquier par en donde alguno de los operadores sea no-acotado.

15.4. Deducción moderna

La exposición moderna del principio de incertidumbre se basa en el trabajo de **Howard Percy Robertson**, en el que se establece que el producto de las desviaciones estándar de dos operadores hermíticos A y B nunca será menor que la mitad del valor absoluto de la media de su conmutador, esto es,

$$\boxed{\Delta_\Psi A \Delta_\Psi B \geq \frac{1}{2} |\langle \Psi | [A, B] | \Psi \rangle|} \quad (15.3)$$

y el mismo Schrödinger hizo importantes contribuciones en esta línea de argumentación.

Recordemos que la desviación estándar se define como

$$(\Delta_\Psi A)^2 = \langle \Psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \Psi \rangle = \langle \Psi | A^2 | \Psi \rangle - \langle \Psi | A | \Psi \rangle^2 \equiv \langle A^2 \rangle_\Psi - \langle A \rangle_\Psi^2$$

Se comienza suponiendo la siguiente forma para el valor medio del producto de dos operadores hermíticos C y D (y por tanto los valores medios de sus conmutadores y anticonmutadores):

$$\langle \Psi | CD | \Psi \rangle = x + iy \Rightarrow \begin{cases} \langle \Psi | [C, D] | \Psi \rangle = 2iy \\ \langle \Psi | \{C, D\} | \Psi \rangle = 2x \end{cases}$$

y por tanto

$$|\langle \Psi | [C, D] | \Psi \rangle|^2 + |\langle \Psi | \{C, D\} | \Psi \rangle|^2 = 4y^2 + 4x^2 = 4|\langle \Psi | CD | \Psi \rangle|^2$$

con lo que se puede decir que

$$|\langle \Psi | [C, D] | \Psi \rangle|^2 \leq 4|\langle \Psi | CD | \Psi \rangle|^2$$

Sólo queda echar mano de la conocida **desigualdad de Cauchy-Schwarz**, cierta en espacios vectoriales normados, que afirma:

$$|\langle \Psi | CD | \Psi \rangle|^2 \leq \langle \Psi | C^2 | \Psi \rangle \langle \Psi | D^2 | \Psi \rangle \quad (15.4)$$

con lo que se tiene

$$|\langle \Psi | [C, D] | \Psi \rangle|^2 \leq 4\langle \Psi | C^2 | \Psi \rangle \langle \Psi | D^2 | \Psi \rangle$$

Redefiniendo los operadores como:

$$\left. \begin{aligned} C &\equiv A - \langle A \rangle_{\Psi} \\ D &\equiv B - \langle B \rangle_{\Psi} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{cases} \langle C \rangle_{\Psi}^2 = \Delta_{\Psi}^2 A, \quad \langle D \rangle_{\Psi}^2 = \Delta_{\Psi}^2 B \\ [C, D] = [A, B] \end{cases}$$

se llega a la desigualdad que se pretendía demostrar:

$$|\langle \Psi | [A, B] | \Psi \rangle| \leq 2\Delta_{\Psi} A \Delta_{\Psi} B$$

En el caso del momento y la posición en una dirección, utilizando las relaciones de conmutación vistas, se llega a la expresión ya conocida:

$$[X, P_x] = i\hbar \Rightarrow \boxed{\Delta_{\Psi} X \Delta_{\Psi} P_x \geq \frac{\hbar}{2}}$$

15.5. Interpretación

Si nos atenemos a las fórmulas obtenidas, las relaciones de indeterminación nos indican que es imposible diseñar experimentos de forma que se puedan medir, en sistemas preparados de igual forma, dos observables A y B con resultados de dispersión cuadrática media tan pequeña como se quiera para ambos, a no ser que $[A, B] = 0$.

Si vamos más allá, y el propio Heisenberg lo hizo, se puede analizar que este hecho es consecuencia del propio proceso de medición, es decir, de la naturaleza de la interacción entre el sistema y el dispositivo de medida, pero hay que tener claro que el principio **es una propiedad de la Naturaleza**, es decir, no depende de las precisiones que se puedan obtener con distintos dispositivos. **El principio de incertidumbre no restringe las precisiones que se pueden obtener sobre los observables.** Lo único que afirma, siguiendo la interpretación

que dio **K.R.Popper** en 1934 (más precisa que la del propio Heisenberg) es que existe una correlación estadística entre las desviaciones estándar que se pueden obtener en un conjunto de experimentos. Nada prohíbe, por ejemplo, que podamos conocer exactamente la cantidad de movimiento de una partícula en una dirección con total exactitud, siempre que pagemos el precio de haber perdido toda información acerca de la coordenada correspondiente de la posición de esa partícula, que quedará en este caso totalmente indeterminada. Como demostró el propio Heisenberg, la forma que debe tener la función de onda para que esta incertidumbre sea mínima es precisamente la dada por la gaussiana que supuso, ya que en este caso el principio satura la desigualdad, por eso debido a esto a veces se le llama **paquete mínimo**.

Hay también que hacer notar que este principio es válido para sistemas macroscópicos igualmente, aunque en este caso el fenómeno no sea observado. El movimiento de la luna también es perturbado por la medición, pero su masa es tan grande que la perturbación se puede ignorar. Una vez más, la pequeñez de la constante de Planck h es lo que pone el fenómeno fuera de las experiencias ordinarias. Esto tiene implicaciones filosóficas fundamentales, ya que si admitimos una ley de la naturaleza que restringe el conocimiento exacto de la posición y el momento iniciales de un sistema, no se podrá determinar con precisión su comportamiento en el futuro. Se pone en duda el determinismo en Física y, lógicamente, el propio concepto de trayectoria.

Para dar datos numéricos, supongamos que queremos conocer la trayectoria de un electrón en un átomo de hidrógeno. Lógicamente tendremos que determinar para ello significativamente su posición, en un átomo que recordemos que tiene un diámetro del orden del ångström ($10^{-10}m$), con lo que intentaremos una precisión de digamos dos órdenes de magnitud menor, es decir:

$$\Delta x \simeq 10^{-12}m \Rightarrow \Delta p \simeq \frac{\hbar}{\Delta x} \simeq 10^5 eV/c \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \Delta E \simeq \frac{p\Delta p}{m} \\ p \simeq m\alpha c \end{array} \right\} \Rightarrow \Delta E \simeq 10^3 eV$$

en donde α es la constante de estructura fina y m la masa del electrón. Esa dispersión en la energía obtenida es del orden de cien veces la energía de ionización del átomo y, por tanto, al intentar hallar la posición casi con toda seguridad lo ionizaremos y seremos incapaces de seguir la trayectoria del electrón.

15.6. Relación de incertidumbre energía-tiempo

Se puede establecer otra relación de incertidumbre derivada de nuestro principio sin más que considerar el caso de una partícula libre, un electrón por ejemplo, moviéndose a lo largo del eje x:

$$E = \frac{p_x^2}{2m} \Rightarrow \Delta E = \frac{p_x \Delta p_x}{m} = v_x \Delta p_x$$

en donde esa velocidad que aparece se puede interpretar como la velocidad de retroceso del electrón cuando es iluminado para medir su posición. Por tanto podemos pensar que si la medida se realiza en un tiempo Δt su posición también tendrá una incertidumbre dada por

$$\Delta x = v_x \Delta t$$

que combinada con la anterior nos da el llamado principio de incertidumbre energía-tiempo:

$$\boxed{\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}} \quad (15.5)$$

En general se puede decir, según vimos en un apartado anterior:

$$\Delta_{\Psi} A \Delta_{\Psi} H \geq \frac{1}{2} |\langle \Psi(t) | [A, H] | \Psi(t) \rangle|$$

y teniendo en cuenta la evolución de los valores esperados (ecuación (14.1)) se tiene

$$\Delta_{\Psi} A \Delta_{\Psi} H \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle \right|$$

Por tanto, podemos interpretar el tiempo

$$\Delta t \equiv \frac{\Delta_{\Psi} A}{\left| \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle \right|}$$

como aquel en el cual el valor esperado de A se desplaza una desviación estándar. Lógicamente, si A es una constante del movimiento este tiempo es infinito, al igual que si nos encontramos en un estado estacionario (en ambos casos las distribuciones de probabilidad no varían).

Capítulo 16

EL LÍMITE CLÁSICO

16.1. Introducción

Desde los inicios de la mecánica cuántica, uno de los temas de más controversia fue la falta de capacidad de esta teoría para predecir las trayectorias que pudieran seguir los sistemas individuales más simples.

Los fundadores de la cuántica rápidamente vieron que su paso al límite clásico no era tan fácil como suponer $\hbar \rightarrow 0$, como lo era en el caso de la mecánica relativista respecto a la newtoniana, en donde con el simple límite $c \rightarrow \infty$ se recuperaba el formalismo clásico.

La razón de esta complejidad en el caso cuántico se basa en que la teoría es **en esencia de naturaleza diferente de la teoría clásica**. En efecto, tanto la mecánica relativista como la newtoniana se basan en la admisión de trayectorias continuas individuales de las partículas en el espacio-tiempo, mientras que la mecánica cuántica está formulada en términos de probabilidades. Esta diferencia cualitativa es mucho más difícil de salvar con un simple límite.

De aquí se deduce que el límite $\hbar \rightarrow 0$ es necesario, pero no suficiente. No esperemos recuperar una trayectoria clásica cuando se dé ese límite, más bien fijémonos en las distribuciones de probabilidad que nos da el formalismo y estudiemos su equivalencia con el conjunto de distribuciones de probabilidad de las trayectorias clásicas correspondientes. Esta sería la forma más correcta de proceder en el límite.

Vamos a estudiar aquí algunos de los intentos por dar interpretaciones clásicas al mágico mundo de las trayectorias cuánticas, empezando por la del malogrado **Paul Ehrenfest**.

16.2. Teorema de Ehrenfest

El primer camino para la recuperación de la imagen clásica lo siguió Ehrenfest en 1927, y se basa en atribuir a cada partícula unas coordenadas y momentos que fueran precisamente los valores medios calculados en su estado. Para que este camino se pudiera seguir era necesario, lógicamente, que los valores medios cumplieran las ecuaciones clásicas del movimiento.

Recordemos que para una hamiltoniana clásica como

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$$

las ecuaciones del movimiento eran

$$\begin{aligned} \frac{dx}{dt} &= \frac{p}{m} \\ \frac{dp}{dt} &= F(x)/F(x) \equiv -\frac{\partial V(x)}{\partial x} \end{aligned}$$

Pasando al caso cuántico, y suponiendo que se trata de un sistema aislado en donde los observables no dependen explícitamente del tiempo, en imagen de Heisenberg teníamos la evolución operacional:

$$\begin{aligned} \frac{dX}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[X, H] \\ \frac{dP}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[P, H] \end{aligned}$$

Los corchetes los calculamos con el hamiltoniano correspondiente quedando:

$$\begin{aligned} [X, H] &= X \left(\frac{P^2}{2m} + V \right) - \left(\frac{P^2}{2m} + V \right) X = \frac{1}{2m}[X, P^2] = \\ &= \frac{[X, P]P + P[X, P]}{2m} = \frac{2i\hbar P}{2m} \\ [P, H] &= P \left(\frac{P^2}{2m} + V \right) - \left(\frac{P^2}{2m} + V \right) P = \\ &= [P, V(X)] = -i\hbar \frac{\partial V}{\partial X} \equiv i\hbar F(X) \end{aligned}$$

en donde se ha usado la igualdad

$$[A, F(B)] = [A, B] \frac{dF(B)}{dB}$$

Por tanto, tomando medias en algún estado llegamos al **teorema de Ehrenfest**:

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle X \rangle_{\Psi} &= \frac{1}{m} \langle P \rangle_{\Psi} \\ \frac{d}{dt} \langle P \rangle_{\Psi} &= \langle F(X) \rangle_{\Psi} \end{aligned}} \quad (16.1)$$

lo que demuestra que los valores medios satisfacen las leyes clásicas siempre que admitamos definir una fuerza media cuyo conocimiento depende de la función de onda. Lógicamente esta fuerza media no tendrá una expresión equivalente a la clásica con respecto a la posición media a menos que funcione la aproximación:

$$\langle F(X) \rangle \simeq F(\langle X \rangle)$$

Si hacemos un desarrollo en torno a $\langle X \rangle$ observamos:

$$\begin{aligned} \langle F(X) \rangle &= \langle F(\langle X \rangle) + (X - \langle X \rangle) \left. \frac{\partial F}{\partial X} \right|_{X=\langle X \rangle} + \dots \rangle = \\ &= F(\langle X \rangle) + \langle (X - \langle X \rangle) \left. \frac{\partial F}{\partial X} \right|_{X=\langle X \rangle} \rangle + \frac{1}{2} \langle (X - \langle X \rangle)^2 \left. \frac{\partial^2 F}{\partial X^2} \right|_{X=\langle X \rangle} \rangle + \dots = \\ &= F(\langle X \rangle) - \frac{1}{2} \langle (X - \langle X \rangle)^2 \left. \frac{\partial^3 V}{\partial X^3} \right|_{X=\langle X \rangle} \rangle + \dots \end{aligned}$$

con lo que el teorema de Ehrenfest predice que los valores medios se mueven con las ecuaciones clásicas del movimiento siempre que $V(X)$ dependa a lo sumo cuadráticamente de X , lo que en efecto ocurre para casos como la partícula libre o el oscilador armónico.

Desgraciadamente con esto se ve que el teorema de Ehrenfest no es **suficiente** para definir un régimen clásico, ya que como hemos visto el oscilador armónico lo cumple y sin embargo es un sistema claramente cuantificado. Lo peor sin embargo es que tampoco es **necesario**, ya que un sistema puede comportarse clásicamente y no cumplir el teorema, debido al comportamiento similar que tienen las distribuciones de probabilidad clásicas.

16.3. Evolución de incertidumbres

16.3.1. Partícula libre

Si imaginamos una partícula libre en una dimensión que en un instante determinado se encuentra localizada en un lugar con una distribución gaussiana de probabilidad del tipo

$$\Psi(x, 0) = \left(\frac{2}{a^2\pi} \right)^{1/4} e^{-x^2/a^2} \Rightarrow \rho(x, 0) = |\Psi(x, 0)|^2 = \left(\frac{2}{a^2\pi} \right)^{1/2} e^{-2x^2/a^2}$$

El valor de la varianza en posición para la distribución de probabilidad correspondiente deberá ser lógicamente $a/2$, pero vamos a comprobar esta y la correspondiente al momento.

Debemos antes admitir los dos resultados siguientes para las integraciones de gaussianas (no son difíciles de demostrar haciendo una extensión al plano y utilizando polares):

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-x^2} = \sqrt{\pi} \\ I_2 &= \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-x^2} = \left[-\frac{d}{d\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\lambda x^2} \right]_{\lambda=1} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \end{aligned}$$

Vamos a obviar por comodidad los límites de integración a partir de ahora, si hacemos los cálculos:

$$\begin{aligned}\langle x^2 \rangle_{\Psi} &= \int \Psi^* x^2 \Psi dx = \int \left(\frac{2}{a^2 \pi} \right)^{1/2} x^2 e^{-2x^2/a^2} dx = \\ & \left(y \equiv \frac{\sqrt{2}x}{a} \Rightarrow \right) = \frac{\sqrt{2}}{a\sqrt{\pi}} \frac{a^3}{2\sqrt{2}} \int y^2 e^{-y^2} dy = \frac{a^2 \sqrt{\pi}}{2\sqrt{\pi}2} = \frac{a^2}{4} \\ \langle x \rangle_{\Psi} &= \frac{\sqrt{2}}{a\sqrt{\pi}} \int x e^{-2x^2/a^2} dx = 0\end{aligned}$$

en donde la última integral se anula por ser una función impar en intervalo simétrico, llegamos a

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle_{\Psi} - \langle x \rangle_{\Psi}^2} = \frac{a}{2}$$

Y en el caso del momento:

$$\begin{aligned}\langle p^2 \rangle &= \frac{\sqrt{2}}{a\sqrt{\pi}} \int e^{-x^2/a^2} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) e^{-x^2/a^2} dx = \frac{\hbar^2}{a^2} \\ \langle p \rangle &= \frac{\sqrt{2}}{a\sqrt{\pi}} \int e^{-x^2/a^2} \left(-\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) e^{-x^2/a^2} dx = 0\end{aligned}$$

con lo que

$$\Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle_{\Psi} - \langle p \rangle_{\Psi}^2} = \frac{\hbar}{a}$$

Y por tanto en el caso de la gaussiana, como ya vimos en la deducción de Heisenberg del principio de incertidumbre, la desigualdad entre sus productos se satura, es decir, se convierte en estricta igualdad:

$$\Delta x \Delta p = \frac{\hbar}{2}$$

de ahí que como vimos sea conocida esta función con el nombre de **paquete mínimo**. Ahora vamos a comprobar que, aunque este paquete mínimo se conserva a lo largo del tiempo, las incertidumbres sin embargo evolucionan. Para ello debemos calcular la evolución de la función de onda vía ecuación de Schrödinger, que puede tener un desarrollo en el espacio de momentos del tipo:

$$\Psi(x, t) = \int \frac{dp}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-i(px - E(p)t)/\hbar} \tilde{\Psi}(p, 0) / E = \frac{p^2}{2m}$$

en donde debemos calcular la transformada de Fourier

$$\tilde{\Psi}(p, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-ipx/\hbar} \Psi(x, 0) dx$$

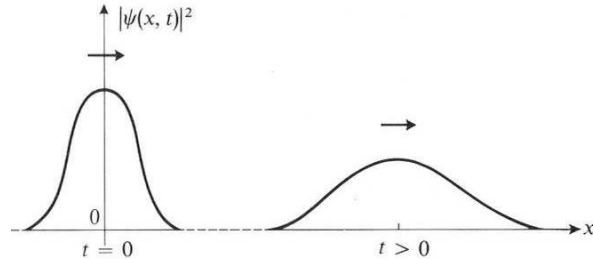
que podemos hallar sustituyendo la expresión de la función de partida y calculando por integración gaussiana gracias al artificio de completar el cuadrado:

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{ipx}{\hbar} = \left(\frac{x}{a} + \frac{iap}{2\hbar} \right)^2 + \frac{a^2 p^2}{4\hbar^2}$$

obteniendo

$$\tilde{\Psi}(p, 0) = \left(\frac{a}{\hbar\sqrt{2\pi}} \right)^{1/2} e^{-\frac{a^2 p^2}{4\hbar^2}}$$

De esta forma podemos sustituir en la expresión de la función de onda dependiente del tiempo y, tras un prolijo cálculo en donde de nuevo habrá que completar el cuadrado, se obtiene:



$$\Psi(x, t) = \left(\frac{2a}{\sqrt{2\pi}} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{a^2 + 2i\hbar t/m}} e^{-\frac{x^2}{a^2 + 2i\hbar t/m}}$$

Figura 16.1: Evolución paquete gaussiano

y para la evolución buscada de las incertidumbres el resultado:

$$\begin{aligned} (\Delta x)(t) &= \frac{1}{2} \sqrt{a^2 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^2}} \\ (\Delta p)(t) &= \frac{\hbar}{\sqrt{a^2 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2 a^2}}} \end{aligned} \quad (16.2)$$

en donde se puede apreciar que si dejamos la evolución libre la partícula acabará totalmente deslocalizada con un momento definido al igual que ocurría en el caso de una onda plana (figura 16.1).

16.3.2. Caso de potenciales a lo sumo cuadráticos

Vamos a estudiar la evolución de las incertidumbres en el caso más general de la partícula sometida a un potencial a lo sumo cuadrático respecto a sus coordenadas, suponiendo sin pérdida de generalidad de nuevo el caso unidimensional. Veremos de nuevo que en alguno de los casos se dará la dispersión total del paquete de ondas aunque en efecto sea válido el teorema de Ehrenfest y de aquí deduciremos lógicamente que para que un sistema se pueda comparar con uno clásico no es suficiente aceptar el teorema de Ehrenfest sino que se debe cumplir mejor que las dimensiones del paquete sean despreciables en comparación con las dimensiones que caractericen el problema.

Vamos antes de nada a admitir el hamiltoniano:

$$H = \frac{P^2}{2M} + V(X)$$

y asumir que en principio este no nos dará en su valor medio la energía esperable clásicamente, es decir:

$$\langle H \rangle \neq E_{cl} = \frac{\langle P \rangle^2}{2M} + V(\langle X \rangle) \equiv \frac{\langle P \rangle^2}{2M} + V_{cl}$$

como ambas son constantes del movimiento es claro que su diferencia también será constante:

$$\epsilon = \langle H \rangle - E_{cl} = cte$$

Y también suponemos que el potencial tiene un desarrollo convergente que en el caso de un potencial a lo sumo cuadrático se expresa en la forma:

$$V(X) = V_{cl} + (X - \langle X \rangle)V'_{cl} + \frac{1}{2}(X - \langle X \rangle)^2 V''_{cl}$$

Vamos a partir de estas premisas para calcular la evolución temporal de las incertidumbres, o más fácilmente de sus varianzas, denotadas aquí como:

$$\begin{aligned} \Delta &\equiv \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2 \\ \tilde{\Delta} &\equiv \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2 \end{aligned}$$

con lo que se tiene

$$\langle V \rangle - V_{cl} = \frac{1}{2} V''_{cl} \Delta$$

y por tanto la constante queda

$$\epsilon = \frac{\langle P^2 \rangle}{2M} + \langle V(X) \rangle - \frac{\langle P \rangle^2}{2M} - V(\langle X \rangle) = \frac{1}{2M} (\tilde{\Delta} + M V''_{cl} \Delta) \quad (16.3)$$

Vamos a buscar una forma simple para la evolución temporal:

$$\frac{d\Delta}{dt} = \frac{d\langle X^2 \rangle}{dt} - \frac{d\langle X \rangle^2}{dt} = \frac{1}{i\hbar} (\langle [X^2, H] \rangle - 2\langle X \rangle \langle [X, H] \rangle)$$

Y en consecuencia debemos calcular los conmutadores:

$$\begin{aligned} [X, H] &= \frac{1}{2M} [X, P^2] = \frac{[X, P]2P}{2M} = \frac{i\hbar P}{M} \\ [X^2, H] &= \frac{1}{2M} [X^2, P^2] = \frac{1}{2M} ([X^2, P]P + P[X^2, P]) = \\ &= \frac{1}{2M} (X[X, P]P + [X, P]XP + PX[X, P] + P[X, P]X) = \frac{i\hbar}{M} (XP + PX) \end{aligned}$$

con lo que

$$\frac{d\Delta}{dt} = \frac{1}{M} \langle XP + PX \rangle - \frac{2}{M} \langle X \rangle \langle P \rangle$$

La segunda derivada será

$$\begin{aligned}
 \frac{d^2\Delta}{dt^2} &= \frac{1}{M} \frac{1}{i\hbar} \langle [XP + PX, H] \rangle - \frac{2}{M} \frac{d\langle X \rangle}{dt} \langle P \rangle - \frac{2}{M} \langle X \rangle \frac{d\langle P \rangle}{dt} = \\
 &= \frac{1}{M} \frac{1}{i\hbar} \left(\frac{1}{2M} \langle [XP, P^2] \rangle + \langle [XP, V(X)] \rangle + \frac{1}{2M} \langle [XP, P^2] \rangle + \langle [PX, V(X)] \rangle \right) \\
 &\quad - \frac{2\langle P \rangle^2}{M^2} - \frac{2}{M} \frac{1}{i\hbar} \langle X \rangle \langle [P, V(X)] \rangle = \\
 &= \frac{1}{M} \frac{1}{i\hbar} \left(\frac{1}{2M} \langle 2i\hbar P^2 \rangle + \langle [XP, V(X)] \rangle + \frac{1}{2M} \langle 2i\hbar P^2 \rangle + \langle [PX, V(X)] \rangle \right) \\
 &\quad - \frac{2\langle P \rangle^2}{M^2} - \frac{2}{M} \frac{1}{i\hbar} \langle X \rangle \langle [P, V(X)] \rangle
 \end{aligned}$$

que podemos abreviar usando igualdades como

$$[XP, V(X)] = X[P, V(X)] + \underbrace{[X, V(X)]}_0 P = X[P, X]V' = -i\hbar XV'$$

quedando

$$\frac{d^2\Delta}{dt^2} = \frac{2\tilde{\Delta}}{M^2} - \frac{1}{M} (\langle XV' + V'X \rangle - 2\langle X \rangle \langle V' \rangle)$$

y recordando que en aproximación cuadrática tenemos

$$V'(X) = V'_{cl} + (X - \langle X \rangle)V''_{cl}$$

obtenemos la expresión

$$\frac{d^2\Delta}{dt^2} = \frac{2}{M^2} (\tilde{\Delta} - MV''_{cl}\Delta)$$

Para quitar la varianza en el momento de esta expresión recurrimos a la fórmula de la constante que representaba la diferencia en energías ((16.3)). Consiguiendo por fin:

$$\boxed{\frac{d^2\Delta}{dt^2} = \frac{4}{M} (\epsilon - V''_{cl}\Delta)}$$

Lo que indica que, como era de esperar, la diferencia de energías clásica y cuántica está asociada a las fluctuaciones de la posición de la partícula respecto de su posición clásica.

A partir de esta ecuación se pueden estudiar casos sencillos de potencial y ver la expresión de su varianza (Messiah, Galindo/Pascual) a partir de las condiciones iniciales, que normalmente están asociadas a una gaussiana (paquete mínimo). Así se ve que en el caso de una partícula sometida a una fuerza constante (potencial lineal) los paquetes se ensanchan con el transcurso del tiempo como en el caso libre o que en el caso de un potencial armónico (potencial cuadrático) curiosamente el paquete no llega nunca a desbocarse ya que la dependencia que sale es sinusoidal.

16.4. Evolución de paquetes

Ya hemos estudiado la evolución de un paquete mínimo o gaussiano de forma libre y las soluciones de la ecuación de Schrödinger en los casos más simples, pero ahora vamos a adoptar el punto de vista más general que se relaciona con la evolución de los paquetes de onda mediante el concepto de **propagador** o **función de Green**. Nos enmarcamos pues en una pequeña introducción a la teoría de la difusión o de colisiones, que básicamente es la dispersión de la onda por potenciales perturbativos y sus posibles aproximaciones. Ahora la ecuación diferencial de Schrödinger y su condición inicial serán sustituidas por ecuaciones integrales. En esto consisten los métodos variacionales propuestos por **Bernard A. Lippmann** y **Julian Schwinger** en 1950, herederos en cierta medida de la semilla puesta por **John Archibald Wheeler** en 1937 en donde se introdujo el paradigma de la matriz S .

Según esta teoría la función de onda dispersada por un potencial $V(x)$ desde un punto (x_1, t_1) a un punto (x_2, t_2) debe cumplir una ecuación integral en donde el estado inicial es perturbado para dar lugar a un estado final modificado en donde la dinámica se hace recaer en el propagador retardado K :

$$\Psi(x_2; t_2) = \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int d^3x_1 K(x_2, t_2; x_1, t_1) V(x_1) \Psi(x_1; t_1)$$

que deberá cumplir la ecuación de Schrödinger junto con la condición causal:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \right) K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \delta^{(3)}(x_2 - x_1) \delta(t_2 - t_1) \\ K(x_2, t_2; x_1, t_1) = 0 \quad \text{si } t_2 < t_1 \end{array} \right.$$

Esta metodología es susceptible así de iterarse indefinidamente encontrando algo parecido al principio de Huygens, es decir, cada frente de onda es fuente de frentes de onda y el total en un punto se obtiene sumando todas las contribuciones:

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) = & \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int d^3x_1 K(x, t; x_1, t_1) V(x_1) \Psi(x_1, t_1) + \\ & + \int_{-\infty}^{\infty} dt_2 \int d^3x_2 \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int d^3x_1 K(x, t; x_2, t_2) V(x_2) K(x_2, t_2; x_1, t_1) V(x_1) \Psi(x_1, t_1) + \dots \end{aligned}$$

a este tipo de series se las denomina **series de Born** y tienen una interpretación clara. La onda inicial en (x_1, t_1) sufre la acción del potencial en x_1 y llega a (x, t) y a (x_2, t_2) , en donde sufre la acción del potencial en x_2 y llega a (x, t) y llegará a (x_3, t_3) , etc.

Para resolver la ecuación para K hay que recordar que

$$\delta^{(3)}(x_2 - x_1) \delta(t_2 - t_1) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i[k(x_2 - x_1) - \omega(t_2 - t_1)]}$$

por tanto, si uno supone la expansión en ondas planas:

$$K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i[k(x_2-x_1)-\omega(t_2-t_1)]} \tilde{K}(k, \omega)$$

se obtiene la expresión

$$\tilde{K}(k, \omega) = \frac{1}{\hbar\omega - \hbar^2k^2/2m}$$

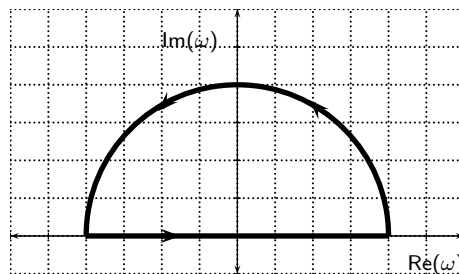
Para salvar la divergencia provocada en el denominador al integrar se utiliza el artificio de poner una cantidad imaginaria de modo que tienda a cero después de realizar la integración compleja:

$$\tilde{K}(k, \omega) = \frac{1}{\hbar\omega - \hbar^2k^2/2m + i\epsilon}$$

y realizar la integral por residuos

$$I = \int d\omega e^{-\omega(t_2-t_1)} \frac{1}{\hbar\omega - \hbar^2k^2/2m + i\epsilon}$$

en el circuito propuesto en el plano ω de la figura



Dentro del circuito no hay polos, al estar este en

$$\omega = \frac{\hbar k^2}{2m} - \frac{i\epsilon}{\hbar}$$

y esto nos asegura la condición de causalidad propuesta, ya que

$$e^{-i(\text{Re}(\omega)+i\text{Im}(\omega))(t_2-t_1)} \longrightarrow 0 \quad \text{si} \quad t_2 - t_1 < 0$$

cuando hacemos tender el circuito a infinito y aplicamos el teorema del residuo. Esto implica que K se anula si el tiempo inicial es mayor que el final y la elección hecha de la forma del propagador es la correcta.

Como la onda inicial suele ser plana, se suele admitir la factorización en parte espacial y temporal, y usar el propagador también factorizado en la forma:

$$\left. \begin{aligned} K(x_2, t_2; x_1, t_1) &= \int \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega(t_2-t_1)} G(x_2, x_1; \omega) \\ G(x_2, x_1; E) &= \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{e^{ik(t_2-t_1)}}{\hbar\omega - \hbar^2k^2/2m + i\epsilon} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \psi(x_2) = \int d^3x_1 G(x_2, x_1; E) V(x_1) \psi(x_1)$$

en donde se han intercambiado las dependencias en la frecuencia o de la energía por ser estas equivalentes. Esta es la conocida como ecuación integral de **Lippmann-Schwinger**. Se puede ahora evaluar la parte del propagador espacial (función de Green) si integramos en el espacio de k con la dirección del eje z coincidiendo con $x_2 - x_1$. El elemento de volumen será

$$d^3k = k^2 dk \sin\theta d\theta d\phi$$

con lo que la integración de la parte angular es inmediata y dará:

$$G(x_2, x_1; E) = \frac{1}{(2\pi)^2 i |x_2 - x_1|} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk k e^{i|x_2 - x_1|k}}{E + i\epsilon - \hbar^2 k^2 / 2m}$$

en donde los polos en este caso son:

$$k = \begin{cases} \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{1/2} + i\epsilon \\ - \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{1/2} - i\epsilon \end{cases}$$

y por tanto, integrando por residuos en un circuito análogo al anterior, teniendo en cuenta el límite:

$$\lim_{k \rightarrow \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{1/2}} \left(k - \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{1/2} \right) \frac{k e^{i|x_2 - x_1|k}}{E - \hbar^2 k^2 / 2m} = - \frac{m e^{i|x_2 - x_1|k}}{\hbar^2}$$

se obtiene

$$G(x_2, x_1; E) = - \frac{m}{2\pi \hbar^2 |x_2 - x_1|} e^{ik|x_2 - x_1|} \quad \text{con} \quad k = \left(\frac{2mE}{\hbar^2} \right)^{1/2}$$

Por tanto, a grandes distancias la onda dispersada se ve como una onda saliente con simetría esférica. La amplitud de la onda es el objeto de estudio de la teoría de la dispersión y según las aproximaciones y los potenciales que estudiemos nos dará distintas expresiones para las secciones eficaces (que al fin y al cabo será el dato físico por excelencia).

Parte V
LA SÍNTESIS

La mayoría de los físicos teóricos de hoy hemos llegado al punto de vista de que el modelo estándar que tanto nos enorgullece, la teoría cuántica de campos de las interacciones débil, electromagnética y fuerte, no es más que una aproximación de baja energía a una teoría de campos mucho más profunda y muy diferente.

S.Weinberg [6]

Capítulo 17

INTRODUCCIÓN A LAS TEORÍAS CUÁNTICAS DE CAMPOS

17.1. Introducción

Toda teoría respetable sobre las partículas elementales se desarrolla dentro del marco de *la teoría cuántica de campos* (**TCC** o, en inglés, **QFT**), que amplió la Mecánica Cuántica (**QM**). Aquí se pueden encontrar la electrodinámica cuántica, el modelo estándar, la teoría de supercuerdas, etc.

Estas teorías deben respetar tres principios fundamentales:

- I) La validez de la Mecánica Cuántica.
- II) La validez de la Relatividad.
- III) La localidad. Esto implica que todas las fuerzas surgen de procesos locales, no de acción a distancia.

De aquí se derivan dos consecuencias que van a caracterizar siempre este tipo de teorías:

- 1) El número de partículas en las interacciones no es conservado, ni tampoco la clase o tipo de las partículas implicadas. Pueden desaparecer unas y aparecer otras, del mismo o distinto tipo, ya que los procesos locales incluyen la emisión y absorción de partículas.
- 2) Existe una simetría fundamental entre las partículas elementales y sus *antipartículas*. Para cada partícula hay una antipartícula correspondiente, que se comporta moviéndose hacia atrás en el espacio y en el tiempo, y posee carga eléctrica opuesta. Algunas partículas neutras son antipartículas de sí mismas.

Existen al menos dos formas de aproximarse a la **QFT**, por medio de las **cuantizaciones canónicas**, o por medio de la llamada **integral de camino** (también llamada suma sobre historias). Empezaremos en estos apuntes por la primera opción, ya que es la que deviene naturalmente del curso histórico de la **QM**.

17.2. Limitaciones de la Mecánica Cuántica

En el marco de la **QM** no hay manera de tratar procesos de transformación de una partícula en otras o de interacciones entre partículas dando lugar a otras partículas, ya que se trata de una teoría que asume que las partículas conservan su identidad e integridad.

En **QFT** podemos sin embargo estudiar procesos de aniquilación y creación de partículas, que pueden suceder con intercambio de las llamadas **partículas virtuales**, hallando lo que se conoce como **amplitudes de transición**, que nos darán la probabilidad que posee cada suceso de ocurrir en la práctica.

Otro punto, relacionado con el anterior, que ocurre cuando estudiamos procesos en el rango en donde empieza a ser apreciable la relación energía-masa relativista, es que hay que estudiarlos con una teoría cuántica relativista que tenga en cuenta estas transformaciones, y la **QM** no cumple este requisito.

Veremos que los intentos de hacer una Mecánica Cuántica Relativista (**RQM**) llevaron a los físicos a muchos problemas de interpretación, debido a que aparecían energías negativas que no se podían desechar por las limitaciones impuestas por el principio de incertidumbre, que toma una dimensión más dramática cuando se combina con la relatividad.

Cuando introducimos el principio de relatividad en las ecuaciones de la Mecánica Cuántica, añadimos limitaciones a las posiciones con las que se pueden conocer los observables físicos. Recordemos el principio de indeterminación de Heisenberg en su forma más grosera:

$$\Delta x \Delta p \sim \hbar$$

En principio, como ya dijimos en su momento, no nos ponía ninguna restricción a la precisión con la que se puede medir cada uno de los observables por separado. Sin embargo, si lo leemos en función de una diferencia de velocidades antes y después de la medición:

$$(v' - v) \Delta p \Delta t \sim \hbar$$

es claro que, dada la existencia de una velocidad límite c en Relatividad Restringida, la diferencia entre las dos velocidades jamás podrá ser mayor que $2c$, con lo que:

$$\Delta p \Delta t \sim \frac{\hbar}{c}$$

dándonos una máxima precisión alcanzable para la medida del momento en un intervalo temporal de medición Δt . esta imprecisión se puede trasladar también a la medida de la posición de la partícula, y está íntimamente relacionada con la aparición de nuevas partículas en el proceso de medición, como en el caso de la formación de pares.

El intento de solventar estas dificultades fue lo que llevó a físicos como **Paul Dirac**, **Vladimir Fock** o **Wolfgang Pauli** a crear la Teoría Cuántica de Campos. En ella las funciones de onda adquieren el rango de operadores capaces de destruir y crear nuevas partículas, y se añaden por tanto a las relaciones de conmutación de los observables nuevas relaciones de

conmutación de los estados, por ello en muchas ocasiones se le ha llamado **formalismo de segunda cuantificación**, un término realmente desacertado y desorientador, dado que de hecho no se produce ninguna segunda cuantificación a nivel físico.

En este escenario, realmente las únicas magnitudes observables serán las de las partículas libres: las de las iniciales que entran en la interacción y las finales que aparecen como resultado del proceso de medición. El conjunto de las amplitudes de todos los estados posibles formará la llamada **matriz de dispersión o matriz S**, portadora de la verdadera información con sentido físico.

17.3. Unidades naturales

Las dimensiones de las magnitudes no tienen características fundamentales. Son útiles para asegurar la coherencia de una ecuación física comprobando que no se están igualando magnitudes diferentes por medio del análisis dimensional y para relacionar unidades de la misma magnitud.

Podemos admitir, por ejemplo, que las magnitudes mecánicas longitud (**L**), masa (**M**) y tiempo (**T**) son las dimensiones fundamentales. Pero en el Sistema Internacional (**SI**), por ejemplo, se añade una unidad independiente de carga (**Q**) suponiendo para la ley de Coulomb la forma:

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_1 Q_2}{r^2}$$

suponiendo que la constante de Coulomb tiene dimensiones. Sin embargo uno puede forzar que las cargas se puedan expresar en unidades mecánicas admitiendo los siguientes sistemas de unidades:

$$\begin{aligned} \text{Gauss} &\rightarrow F = \frac{Q_1 Q_2}{r^2} \\ \text{Lorentz-Heaviside} &\rightarrow F = \frac{1}{4\pi} \frac{Q_1 Q_2}{r^2} \end{aligned}$$

en donde el último, llamado **racionalizado** porque en las ecuaciones no aparece el término 4π , es el más usado en teorías cuánticas de campos.

Aparte, en teorías cuánticas de campos, debido a los principios de relatividad y de incertidumbre, se suelen utilizar las **unidades naturales**, en donde las constantes de Planck y de la velocidad de la luz, con los valores en el SI:

$$\begin{aligned} c &= 2,99792458 \cdot 10^8 \text{ m/s} \\ \hbar &= 1,054571628 \cdot 10^{-34} \text{ Kg m}^2/\text{s} \end{aligned}$$

se escogen como unidades de acción y de velocidad respectivamente:

$$\boxed{\hbar = c = 1}$$

Hay que decir también que dentro de las unidades naturales se pueden usar otras más restrictivas llamadas **unidades geometrizadas** o de Planck, en donde todas las magnitudes se pueden expresar con números adimensionales, haciendo:

$$\boxed{G_N = K_B = 1}$$

es decir, igualando a la unidad la constante gravitacional de Newton y la constante de Boltzmann. En QFT sin embargo no se suelen incluir debido a que la gravitación no afecta a las ecuaciones.

Las unidades naturales tienen la ventaja de que todas las magnitudes las podemos expresar en términos de energía, y para ésta se suele escoger como unidad el electronvoltio (**eV**) ya que es una unidad más adecuada para el mundo microscópico:

$$1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

Por ejemplo, la energía de un protón en julios es

$$E_p = m_p c^2 = (1,7 \cdot 10^{-27} \text{ kg}) \cdot (3 \cdot 10^8 \text{ m/s})^2 = 15,3 \cdot 10^{-11} \text{ J}$$

sin embargo vemos que es aproximadamente un gigaelectronvoltio:

$$E_p \simeq 10^9 \text{ eV} = 1 \text{ GeV}$$

siendo la del electrón unas 2000 veces menor, es decir, medio megaelectronvoltio:

$$E_e \simeq 0,5 \text{ MeV}$$

Teniendo en cuenta las dimensiones de las constantes naturales podemos deducir que, por ejemplo, el tiempo y la longitud tienen las mismas unidades, y son equivalentes a las de la inversa de una masa o energía:

$$\begin{aligned} [c] &= LT^{-1} \Rightarrow L = T \\ [\hbar] &= [ET] = M[c]^2 T \Rightarrow M^{-1} = T = L \end{aligned}$$

En estas unidades identificamos por tanto la energía con la masa o la frecuencia según el caso, así como el momento con el número de onda, ya que:

$$\begin{aligned} E &= mc^2 \Rightarrow E = m \\ E &= \hbar\omega \Rightarrow E = \omega \\ p &= \hbar k \Rightarrow p = k \end{aligned}$$

y esta última magnitud se podrá medir también en electronvoltios:

$$\text{GeV} : \{m, mc, mc^2\} \sim \{m, p, E\}$$

Asimismo la longitud y el tiempo tendrán dimensiones de inversa de energía, como podemos ver si suponemos un fotón atrapado en una caja de tamaño L, que por el principio de incertidumbre cumplirá:

$$\Delta E \gtrsim \frac{\hbar c}{L} \gtrsim mc^2 \Rightarrow L \lesssim \frac{\hbar}{mc}$$

en donde se ha impuesto la energía umbral capaz de dar lugar a nuevas partículas vía principio de incertidumbre. Es por eso que la llamada **longitud de onda Compton**:

$$\lambda = \frac{\hbar}{mc}$$

es la típica en donde se dan los procesos de QFT y se mide en unidades de inversa de energía:

$$(GeV)^{-1} : \left\{ \frac{\hbar}{mc}, \frac{\hbar}{mc^2} \right\} \sim \{L, T\}$$

Para un protón (neutrón) por ejemplo tenemos la equivalencia:

$$\lambda_p = (1 GeV)^{-1} = \frac{\hbar}{m_p c} \simeq \frac{10^{-34}}{10^{-27} \cdot 10^9} = 10^{-16} m = 0,1 fm$$

es decir, del orden de la décima parte de un **femtómetro** (fm), que es precisamente la unidad que marca los diámetros de los nucleones.

Otras equivalencias con el SI que se pueden deducir fácilmente son:

$$\begin{aligned} 1 cm &\sim 10^{14} GeV^{-1} \\ 1 s &\sim 10^{10} cm \sim 10^{24} GeV^{-1} \\ 1 kg &\sim 10^{27} GeV \end{aligned}$$

17.4. Escalas

Las dimensiones de la constante de Newton de la Gravitación son, recordando la definición de su energía potencial:

$$V_G = -\frac{G_N M_1 m_2}{r} \Rightarrow [G_N] = [L][E][M]^{-2} = [L][M][L]^2[T]^{-2}[M]^{-2} = [\hbar][c][M]^{-2}$$

y en unidades naturales tendrá las dimensiones de una masa/energía a la -2 o equivalentemente de una longitud al cuadrado. Esto sugiere definir una escala natural de masas, longitudes y tiempos:

$$G = \frac{\hbar c}{m_{pl}^2} = \frac{1}{m_{pl}^2} \Rightarrow \begin{cases} m_{pl} &= 10^{19} GeV \\ l_{pl} &= 10^{-33} cm \\ t_{pl} &= 10^{-43} s \end{cases}$$

conocida como **escala de Planck**. Para longitudes menores que la de Planck no hay una teoría satisfactoria, dado que empieza a tener influencia la gravedad cuántica. En el otro extremo de distancias tenemos el horizonte cosmológico:

$$l_{Hubble} \simeq 10^{28} \text{ cm} \simeq 10^{60} l_{pl}$$

Eso en cuanto a las escalas extremas de longitudes, vamos a ver ahora la escala de intensidades de las diferentes fuerzas. Como la constante cosmológica tiene dimensiones es difícil calcular la intensidad para compararla con las demás fuerzas. Sin embargo podemos hacernos idea de la debilidad de la gravitación con la combinación adimensional con la masa del protón:

$$G_N m_p^2 \sim 10^{-38}$$

Si se hace un cálculo análogo con la constante de acoplo de Fermi, que nos da idea de la intensidad de la fuerza débil, se obtiene:

$$G_F m_p^2 \sim 10^{-5}$$

y por tanto la interacción débil es aproximadamente 32 órdenes de magnitud más fuerte que la gravedad, lo que define el llamado **problema de jerarquía** en Física Teórica.

Asimismo podemos hacernos una idea de la intensidad de la fuerza electromagnética por medio de otra cantidad adimensional: **la constante de estructura fina**. Si en las unidades de Heaviside calculamos la razón entre la energía electrostática a una distancia Compton y la total de una partícula de carga elemental tenemos la mencionada constante:

$$\alpha = \frac{\frac{1}{4\pi} \frac{e^2}{\hbar/mc}}{mc^2} = \frac{e^2}{4\pi\hbar c} \simeq \frac{1}{137} \sim 10^{-2}$$

Como detalle de este cálculo veamos la equivalencia de las unidades de carga con el SI:

$$\frac{e_{HL}^2}{4\pi R^2} = \frac{e_{SI}^2}{4\pi\epsilon_0 R^2} \Rightarrow e_{HL} = \frac{e_{SI}}{\sqrt{\epsilon_0}} = 3,36 \cdot 10^5 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} = 5,38 \cdot 10^{-14}$$

con lo que

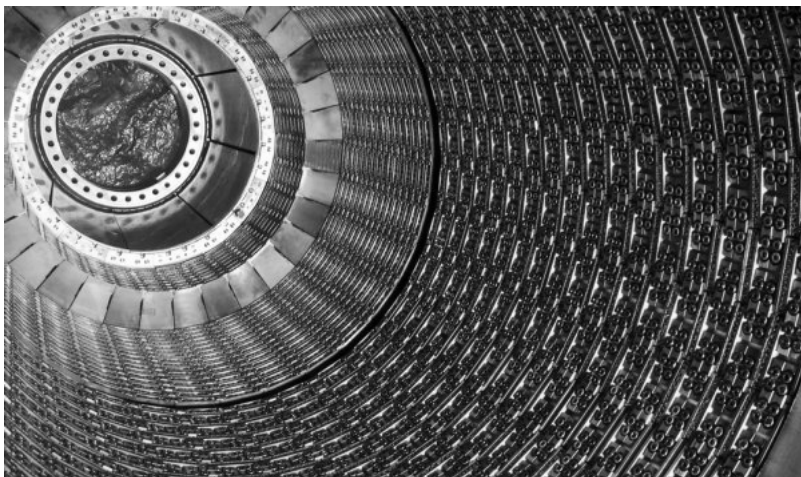
$$\alpha = \frac{(5,38 \cdot 10^{-14})^2}{4\pi \cdot 1,06 \cdot 10^{-34} \cdot 3 \cdot 10^8} \simeq \frac{1}{137}$$

Para la fuerza nuclear fuerte también se puede calcular un orden de magnitud a través de su constante de acoplo adimensional, obteniendo:

$$\frac{g_s^2}{4\pi\hbar c} = \alpha_s \sim 10$$

Vamos a hacernos por último una idea de las escalas energéticas que están en juego por medio de la siguiente tabla:

Escala	Energía	Longitud
Planck	10^{16} TeV	10^{-33} cm
Nueva Física (LHC?)	1 TeV	10^{-17} cm
Modelo Estándar	$0,1 \text{ TeV}$	10^{-16} cm
Hubble	10^{-45} TeV	10^{28} cm



El alcance energético que se espera conseguir en los últimos experimentos, como el LHC del CERN (figura 17.4), es el del TeV , en donde se esperan descubrir los últimos ingredientes del modelo estándar, en particular el bosón de Higgs. Cuando se escriben estas líneas se están produciendo colisiones de varios TeV , pero éstas deben ser convenientemente analizadas todavía. Para hacernos una idea veamos algunas de las masas de las partículas en juego:

Partícula	Masa
Neutrinos	$\sim 10^{-2} eV$
Electrón	$0,5 MeV$
Muon	$100 MeV$
Piones	$140 MeV$
Protón y neutrón	$1 GeV$
Tau	$2 GeV$
Bosones W,Z	$80 - 90 GeV$
Bosones Higgs	$115 - 135 GeV?$

17.5. Campo cuántico

Recordemos un hecho fundamental, la introducción del concepto de campo, tanto clásica como cuánticamente, viene dictada por razones de invariancia relativista. En este sentido el concepto de campo surge de manera natural al negar la idea de acción instantánea y a distancia de una partícula sobre la otra. Suponiendo que el espacio está ocupado por el campo hacemos responsable a este de la transmisión de las excitaciones.

El concepto de campo cuántico es una síntesis de los de campo clásico de tipo electromagnético y función de onda de probabilidad de la QM. Las ondas en este contexto se van a estudiar como colecciones de osciladores armónicos relacionados con sus distintas frecuencias. Normalmente se estudia de inicio un sistema discreto en representación de momentos, pasando después al continuo.

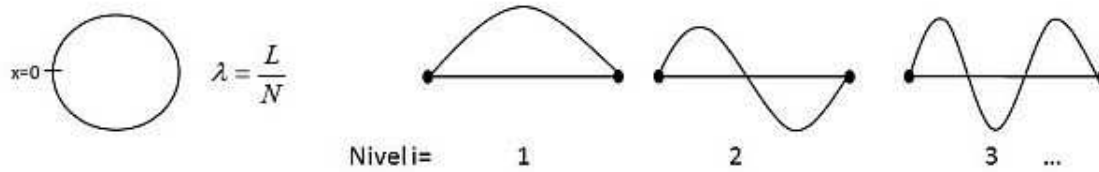


Figura 17.1: Modos del campo cuántico

Si suponemos para simplificar una sola dimensión periódica de longitud L dividida en N partes, como una cuerda vibrante, de la teoría cuántica clásica del oscilador vimos que sólo estaban permitidas ciertas frecuencias (energías), que se harán corresponder con las contribuciones de cada grupo de osciladores en sus distintos modos de oscilación.

Como cada oscilador armónico tiene su energía cuantificada, podemos describir el campo cuántico con un vector que nos dé idea del número de cuántos que hay en cada estado del sistema (nivel energético) etiquetado aquí con i :

$$\text{CAMPO CUÁNTICO} \rightarrow |n_1 n_2 \dots\rangle$$

$n_i \rightarrow$ número de ocupación (número de cuantos en el estado i)

a este espacio se le denomina tradicionalmente **espacio de Fock**.

Yendo a una descripción más precisa podemos evaluar los momentos correspondientes a cada estado. En efecto, si suponemos una onda plana cada uno, la condición de periodicidad impuesta nos arroja los valores del momento:

$$e^{ikx} \Rightarrow e^{ikL} = e^{ik0} = 1 \Rightarrow k = \frac{2\pi N}{L} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (p = \hbar k)$$

Para construir el estado total necesitamos de nuevo recurrir a la teoría clásica, los operadores de creación y destrucción, que serán las versiones mecanocuánticas de los coeficientes de Fourier y actuarán sobre cada estado (nivel, subespacio) y por tanto deberán ser etiquetados por la frecuencia (número de onda).

$$\begin{aligned} a^+(k_i)|n_i\rangle &= \sqrt{n_i + 1}|n_i + 1\rangle \\ a^-(k_i)|n_i\rangle &= \sqrt{n_i}|n_i - 1\rangle \end{aligned}$$

y serán los encargados de añadir o sustraer cuantos de energía.

De esta forma un proceso de dispersión en donde una partícula pasa de tener un momento k_7 a uno k_9 se puede describir como:

$$a^+(k_9)a^-(k_7)|0000001\dots\rangle = |000000001\dots\rangle$$

En representación de posiciones podemos suponer los siguientes desarrollos del campo:

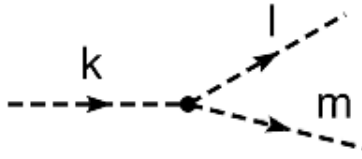


Figura 17.2: Scattering de uno a dos bosones

$$\Psi(x) = \sum_k a^-(k) e^{ikx} e^{-i\omega t}$$

$$\Psi^+(x) = \sum_k a^+(k) e^{-ikx} e^{i\omega t}$$

Se trata en este caso de operadores que definirán la forma de los estados correspondientes. El primero destruye una partícula en la posición x y el segundo la crea:

$$\Psi^+(x)|0\rangle = \sum_k e^{-ikx} e^{i\omega t} a^+(k)|0\rangle = \sum_k e^{-ikx} e^{i\omega t} |k\rangle$$

en donde k en el último caso no denota el número de ocupación sino el estado de una partícula con momento k , sumado a todos los posibles valores del momento que se puedan dar en esa posición.

Siguiendo con esta notación abreviada:

$$|i\rangle \equiv |00 \cdots \overset{(i)}{1} 00 \cdots\rangle$$

podemos analizar el proceso de dispersión de una a dos partículas producido por un átomo que se describe en la figura 17.2

En este hipotético caso no hay conservación del momento, ya que no tenemos en cuenta el retroceso del átomo, pero se puede aventurar la siguiente forma para el estado final:

$$|k\rangle \mapsto \Psi^+(x)\Psi^+(x)\Psi(x)|k\rangle$$

Aplicando nuestras expresiones:

$$\begin{aligned} & \Psi^+(x)\Psi^+(x) \sum_{k'} a^-(k') e^{ik'x} e^{-i\omega_{k'}t} |i\rangle = \\ & = \Psi^+(x)\Psi^+(x) e^{ikx} e^{-i\omega_k t} |0\rangle = \\ & = \Psi^+(x) \sum_{l'} a^+(l') e^{-il'x} e^{i\omega_{l'}t} e^{ikx} e^{-i\omega_k t} |0\rangle = \\ & = \Psi^+(x) e^{i(k-l)x} e^{-i(\omega_k - \omega_l)t} |l\rangle \end{aligned}$$

Ahora crearíamos la partícula en el estado de momento m , y aquí cabe hacer una distinción, si $m = l$ (cosa que sólo se podría dar en el caso de bosones, como explicaremos más adelante) el resultado sería:

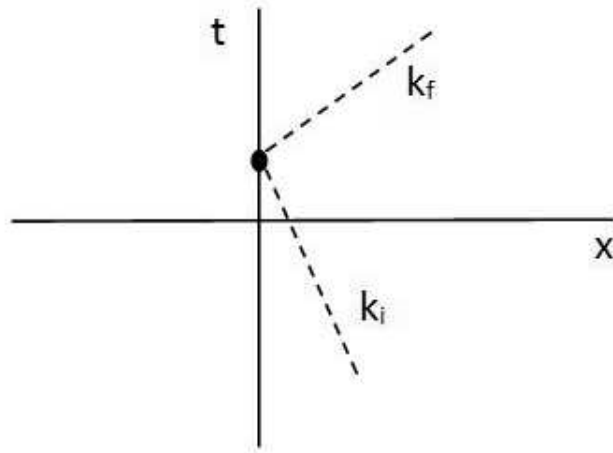


Figura 17.3: Dispersión elástica

$$\begin{aligned} & \sum_{m'} a^+(m') e^{-im'x} e^{i\omega_{m'}t} e^{i(k-l)x} e^{-i(\omega_k - \omega_l)t} |l\rangle = \\ & = \sqrt{2} e^{i(k-2l)x} e^{-i(\omega_k - 2\omega_l)t} |ll\rangle \end{aligned}$$

y en el caso de que los momentos salientes no coincidieran tendríamos, lógicamente

$$e^{i(k-l-m)x} e^{-i(\omega_k - \omega_l - \omega_m)t} |lm\rangle$$

Vemos por tanto que el formalismo en principio siempre favorece la creación de partículas en el mismo estado, dado que la amplitud de ese resultado es mayor.

17.6. Leyes de conservación

Supongamos un proceso de dispersión de una partícula en donde no fijamos el tiempo y vamos a calcular la amplitud del mismo (figura 17.3).

La dispersión se produce en un sitio del espacio bien definido $x = 0$. La amplitud de probabilidad puede ser de la forma:

$$Amp = g |\langle k_f | \int dt \Psi^+(0, t) \Psi(0, t) | k_i \rangle|^2$$

La fuerza de la interacción dependerá de la carga de la partícula y la asociamos con una **constante de acoplo** g . Este ejemplo vale para constantes pequeñas en donde no hay contribuciones de otros posibles procesos.

Desarrollando el cálculo obtenemos

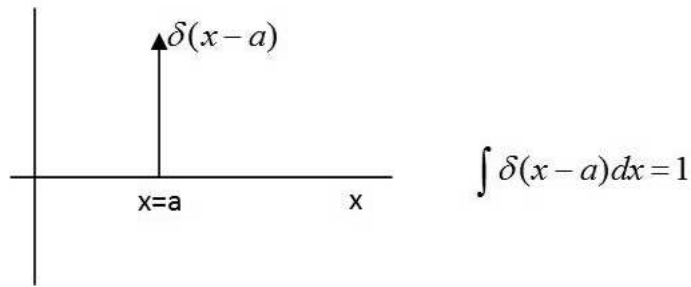


Figura 17.4: Delta de Dirac

$$\begin{aligned}
 & \int \langle k_f | g \sum_l a^+(l) e^{i\omega_l t} \sum_k a^-(k) e^{-i\omega_k t} | k_i \rangle dt = \\
 & = g \int \langle k_f | a^+(k_f) e^{i\omega_f t} a^-(k_i) e^{-i\omega_{k_i} t} | k_i \rangle dt = \\
 & = g \int e^{i(\omega_f - \omega_i)t} dt \overbrace{\langle 0 | 0 \rangle}^1
 \end{aligned} \tag{17.1}$$

Aquí tenemos que recordar una propiedad de la delta de Dirac, que se puede "deducir" de su definición, que se muestra en la figura 17.4 (recordemos que la delta de Dirac en el fondo no es una función sino una distribución matemática, así que los argumentos que daremos serán más bien heurísticos).

Como sabemos por otra parte por las propiedades de periodicidad se tiene:

$$\int_{-L/2}^{L/2} e^{ikx} dx = \begin{cases} L & k = 0 \\ 0 & k \neq 0 \end{cases}$$

pero este resultado lo podemos interpretar como una función de k que vale L para $k = 0$. Recordando en la figura 17.5 la discretización de k podemos ver que como función de k definiría un área de 2π . De este modo como función de k vemos que se trata de una función que integrada nos da ese valor de 2π , con lo que en el paso al límite cuando L tiende a infinito y el intervalo a cero recuperaremos nuestra función delta multiplicada por esa constante, es decir:

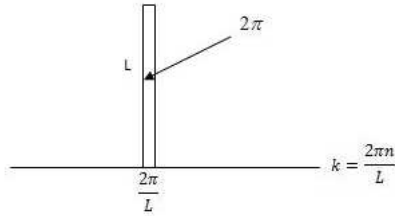
$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dx = 2\pi \delta(k) \tag{17.2}$$

Aplicando esto a nuestro caso en el desarrollo que teníamos (ecuación (17.1)) obtenemos:

$$Amp = 2\pi g \delta(\omega_f - \omega_i)$$

lo que quiere decir que solo hay una cierta probabilidad cuando la energía se conserva, es decir:

$$\boxed{\omega_f = \omega_i}$$

Figura 17.5: Como función de k

y la probabilidad tiene la forma:

$$Prob \sim 4\pi^2 g^2$$

Hemos deducido por tanto la ley de conservación de la energía suponiendo una simetría de traslación temporal.

Por supuesto no hemos supuesto nada del momento saliente, que puede ser cualquiera compatible con la conservación de la energía. Si suponemos que el proceso puede ocurrir en cualquier punto del espacio, fijado un tiempo $t = 0$ por comodidad, la integral la haremos sobre x y obtendremos la ley de conservación del momento:

$$k_f = k_i$$

De la misma forma veremos que la conservación de la carga está ligada a la simetría de **invariancia gauge** definida por los cambios de fase:

$$\begin{aligned}\Psi &\mapsto e^{i\alpha}\Psi \\ \Psi^+ &\mapsto e^{-i\alpha}\Psi^+\end{aligned}$$

que básicamente se cumplirá si hay en los esquemas el mismo número de Ψ 's que de Ψ^+ 's para cada tipo de partícula.

17.7. El electromagnetismo como teoría gauge

Las teorías cuánticas de campos hoy en día basan su fundamento en gran medida en las llamadas teorías de los campos de gauge¹, que han sido desarrolladas en su forma general por muchos físicos a partir de mediados del siglo XX, gracias en parte a la semilla puesta por **Chen Ning Yang** y **Robert Mills**, que ampliaron trabajos anteriores de **Kaluza**, **Klein**, **Fock** y otros sobre el electromagnetismo y la gravitación (ambas teorías están mediadas por partículas no masivas).

Veremos que en el electromagnetismo la llamada simetría gauge tiene como consecuencia la conservación de la carga y que está asociada a una arbitrariedad en la expresión del potencial

¹Son muchos los intentos que se han hecho para traducir este término al castellano, y así podemos encontrar en la bibliografía las palabras contraste, patrón, calibre o aforo, esta última sugerida por Blas Cabrera. No obstante, la tendencia que se ha impuesto finalmente es la de dejar la palabra original.

electromagnético. Pero recordemos antes la forma de las ecuaciones de Maxwell en unidades naturales de Heaviside-Lorentz:

ECUACIONES INHOMOGÉNEAS (O DINÁMICAS)

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E} = \rho \text{ (ley de Gauss)}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{B} = \vec{j} + \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \text{ (ley de Ampere-Maxwell)}$$

ECUACIONES HOMOGÉNEAS (O GEOMÉTRICAS)

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0 \text{ (ausencia de magnetocargas)}$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \text{ (ley de Faraday-Lenz)}$$

(17.3)

De esa forma es conocido que las ecuaciones de Maxwell aparecen invariantes bajo el grupo SO(3) de rotaciones ya que si usamos la notación tensorial de 3 dimensiones:

$$\begin{aligned} \partial_i E^i &\equiv \vec{\nabla} \cdot \vec{E} \\ \epsilon_{ijk} \partial_j B^k &\equiv (\vec{\nabla} \times \vec{B})^i \end{aligned}$$

en donde ϵ_{ijk} es el símbolo de Levi-Civita, completamente antisimétrico en sus tres índices, y cuyo valor es +1 si viene de una permutación par de (1,2,3) y -1 si no. Como es invariante bajo SO(3) queda por tanto manifiesta la invariancia de las ecuaciones de Maxwell así descritas bajo rotaciones:

ECUACIONES INHOMOGÉNEAS (O DINÁMICAS)

$$\partial_i E^i = \rho \text{ (ley de Gauss)}$$

$$\epsilon_{ijk} \partial_j B^k = j^i + \frac{\partial E^i}{\partial t} \text{ (ley de Ampere-Maxwell)}$$

ECUACIONES HOMOGÉNEAS (O GEOMÉTRICAS)

$$\partial_i B^i = 0 \text{ (ausencia de magnetocargas)}$$

$$\epsilon_{ijk} \partial_j E^k = -\frac{\partial B^i}{\partial t} \text{ (ley de Faraday-Lenz)}$$

(17.4)

No obstante, para conseguir covarianza bajo transformaciones de Lorentz SO(1,3) hay que recurrir al llamado **tensor de Faraday**, matriz antisimétrica 4x4, definida como:

$$\left. \begin{aligned} F^{i0} = -F^{0i} = E^i (= E_i) \\ F^{ij} = -\epsilon_{ijk} B^k \Leftrightarrow B^i = -\frac{1}{2} \epsilon_{ijk} F^{jk} \end{aligned} \right\} \Rightarrow F^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 0 & -E^1 & -E^2 & -E^3 \\ +E^1 & 0 & -B^3 & +B^2 \\ +E^2 & +B^3 & 0 & -B^1 \\ +E^3 & -B^2 & +B^1 & 0 \end{pmatrix}$$

en donde la expresión del campo magnético en función del tensor de Faraday la hemos hallado usando la propiedad:

$$\epsilon_{ijk}\epsilon_{ljk} = 2\delta_{il}$$

ya que

$$\epsilon_{nij}F^{ij} = -\epsilon_{nij}\epsilon_{ijk}B^k = -\epsilon_{nij}\epsilon_{kij}B^k = -2\delta_{nk}B^k = -2B^n$$

Además, usaremos la notación habitual para subir y bajar índices con la métrica (1,-1,-1,-1). Como ya entramos en un espacio tetradimensional las fuentes se agrupan en el cuadvector:

$$J^\mu \equiv (\rho, \vec{j}) \quad (J^0 = \rho, J^k = j^k)$$

que cumple la ecuación de continuidad

$$\partial_\mu J^\mu = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{j} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{B} - \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}) = \frac{\partial \rho}{\partial t} - \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$$

usando las ecuaciones con fuentes, dado que la divergencia de un rotacional se anula.

En función de este nuevo tensor, veamos cómo quedan las ecuaciones de Maxwell. En cuanto a las dos primeras, las que poseen fuentes del campo, se tiene la correspondencia:

$$\begin{aligned} \partial_i E^i &= \rho \Rightarrow \partial_i F^{i0} = \rho \\ \partial_0 E^i - \epsilon_{ijk} \partial_j B^k &= -j^i \Rightarrow \partial_0 F^{0i} + \partial_j F^{ji} = j^i \end{aligned}$$

en donde se ha usado, aparte de la antisimetría del tensor de Faraday, la propiedad:

$$\epsilon_{ijk}\epsilon_{mlk} = \delta_{im}\delta_{jl} - \delta_{il}\delta_{jm}$$

Y por tanto las ecuaciones de Maxwell con fuentes (inhomogéneas) se pueden abreviar como:

$$\boxed{\partial_\mu F^{\mu\nu} = J^\nu} \quad (17.5)$$

ya manifiestamente covariantes.

Con esta notación covariante la ecuación de continuidad es inmediata, ya que dos derivadas son simétricas (conmutan) y el tensor es antisimétrico, con lo que su contracción se anula, esto es:

$$\partial_\nu \partial_\mu F^{\mu\nu} = \partial_\nu J^\nu = 0$$

En cuanto a las ecuaciones homogéneas o geométricas, se puede deducir de la primera:

$$\partial_i B^i = 0 \Rightarrow \epsilon_{ijk} \partial_i F^{jk} = 0 \Rightarrow \partial_i F_{jk} + \partial_j F_{ki} + \partial_k F_{ij} = 0$$

y de la última, con un cálculo más engorroso, obtenemos:

$$\begin{aligned}\epsilon_{ijk}\partial_j E^k + \partial_0 B^i &= 0 \Rightarrow \epsilon_{ijk} \left[\partial_j F^{0k} - \frac{1}{2}\partial_0 F^{jk} \right] = 0 \\ \Rightarrow \epsilon_{lmi}\epsilon_{jki} \left[\partial_j F^{0k} - \frac{1}{2}\partial_0 F^{mk} \right] &= 0 \Rightarrow \partial_0 F^{ml} + \partial_m F^{l0} + \partial_l F^{0m} = 0\end{aligned}$$

Los dos últimos resultados se pueden poner como

$$\partial_\mu F_{\nu\rho} + \partial_\nu F_{\rho\mu} + \partial_\rho F_{\mu\nu} = 0$$

y usando el símbolo $[\mu\nu\rho]$ de completa antisimetrización de índices, definido por:

$$U_{[\mu\nu\rho]} = \frac{1}{3!}[U_{\mu\nu\rho} - U_{\mu\rho\nu} + U_{\nu\rho\mu} - U_{\nu\mu\rho} + U_{\rho\mu\nu} - U_{\rho\nu\mu}]$$

y teniendo en cuenta que el tensor de Faraday es antisimétrico, las ecuaciones homogéneas de Maxwell se pueden poner como

$$\boxed{\partial_{[\mu} F_{\nu\rho]} = 0} \quad (17.6)$$

Estas ecuaciones se pueden resolver si introducimos el potencial cuadrivector:

$$A^\mu = (A^0, \vec{A}) \equiv (V, \vec{A}) / F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$$

ya que las derivadas conmutan y la antisimetrización anula todos los términos. Los campos eléctrico y magnético en función de este vector se pueden poner como:

$$\begin{aligned}E^i &= F^{i0} = \partial^i A^0 - \partial^0 A^i = -\partial_i A^0 - \partial_0 A^i \\ B^i &= -\frac{1}{2}\epsilon_{ijk} F^{jk} = -\epsilon_{ijk} \partial^j A^k = \epsilon_{ijk} \partial_j A^k\end{aligned}$$

que identificando con los conceptos clásicos de potencial eléctrico y potencial vector conducen a las ecuaciones conocidas:

$$\boxed{\begin{aligned}\vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \vec{\nabla} V \\ \vec{B} &= \vec{\nabla} \times \vec{A}\end{aligned}} \quad (17.7)$$

Sin embargo, se puede comprobar que el cuadripotencial A^μ no está unívocamente definido, ya que el tensor de Faraday (o los campos magnético y eléctrico) no cambian si se escoge otro cuadrivector que difiera del original en el gradiente de un campo escalar:

$$A^\mu \longrightarrow A'^\mu = A^\mu + \partial^\mu \phi / \phi \equiv \phi(x^\mu) \quad (17.8)$$

esta libertad se denomina **transformación de gauge**, y la invariancia de las ecuaciones de Maxwell respecto a ella se denomina invariancia gauge del electromagnetismo.

Esta arbitrariedad del cuadrivector se puede fijar de formas alternativas en lo que constituye la llamada **elección del gauge**, fijando tal o cual condición al mismo. Los más conocidos son:

Gauge	Condición
Lorentz (covariante o de Landau)	$\partial_\mu A^\mu = 0$
Coulomb (transversal o de radiación)	$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$
Temporal (o de Hamilton)	$A^0 = 0$
Axial	$A^3 = 0$

aparte de que en un sistema general que contenga campos escalares se pueden incluir estos en la condición de gauge, como en el llamado gauge unitario.

Por ejemplo, en el gauge covariante de Lorentz, si hacemos:

$$\partial_\mu A'^\mu = \partial_\mu A^\mu + \partial_\mu \partial^\mu \phi = 0$$

es evidente que se puede fijar la función gauge ϕ sin más que imponer que su **d'alambertiano** se anule:

$$\partial_\mu A^\mu = 0 \Rightarrow \square \phi = 0 \quad (\square \equiv \partial_\mu \partial^\mu)$$

que siempre admitirá una solución para ϕ .

Con este gauge las ecuaciones dinámicas se simplifican considerablemente, ya que

$$\partial_\mu F^{\mu\nu} = J^\nu \Rightarrow \partial_\mu \partial^\mu A^\nu - \cancel{\partial_\mu \partial^\nu A^\mu} = \square A^\nu = J^\nu$$

que constituye la conocida ecuación de ondas con fuentes.

Conviene hacer notar una cuestión acerca de esta simetría gauge. Puede parecer una simetría ficticia, derivada del empeño en expresar la dinámica en términos de este potencial, pero esto no es así. En la teoría cuántica efectos como el de Aharonov-Bohm muestran que los campos **E** y **B** no son suficientes para describir la interacción electromagnética con la materia, y es necesario añadir el potencial, que aquí adquiere un verdadero sentido físico. Los potenciales son necesarios para la cuantización de las partículas materiales y la propia cuantización de la interacción electromagnética.

17.8. El electromagnetismo como conjunto de osciladores

Como ejemplo de paso a la segunda cuantificación vamos a seguir con el campo electromagnético. Veremos el procedimiento en el gauge de Coulomb ya que el de Lorentz exige más arsenal teórico. Esto es debido a que el gauge de Lorentz en principio es incompatible con las reglas de cuantificación y hay que suponer condiciones más débiles, normalmente usando el llamado **método de Gupta-Bleuer**. El precio que pagamos al elegir el gauge de Coulomb es la pérdida de la covariancia, pero en cambio ganaremos en claridad física en cuanto a la polarización de la luz, ya que permite quedarse sólo con los dos grados de libertad necesarios para describir ésta. Más adelante emplearemos el método general con el gauge covariante y

las cuantificaciones canónicas.

Para empezar recordemos que en ausencia de fuentes las ecuaciones de Maxwell toman la forma:

$$\partial_\mu \partial^\mu A^\nu - \partial_\mu \partial^\nu A^\mu = 0$$

y si, como hemos dicho, admitimos el gauge de Coulomb:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = \partial_i A^i = 0$$

se pueden desglosar como:

$$\begin{aligned} (\partial_0 \partial_0 - \partial_i \partial_i) A^0 - \partial_0 (\partial_0 A^0 + \partial_i A^i) &= 0 \Rightarrow \nabla^2 A^0 = 0 \\ (\partial_0 \partial_0 - \partial_i \partial_i) A^j - \partial_j (\partial_0 A^0 + \partial_i A^i) &= 0 \Rightarrow \square A^j + \partial_j \partial_0 A^0 = 0 \end{aligned}$$

De la primera de las ecuaciones averiguaríamos el potencial electrostático V , pero en ausencia de cargas se puede elegir nulo, lo que implica que la segunda de las anteriores ecuaciones quedará como la ecuación de ondas para cada componente del vector potencial electromagnético:

$$A^0 = 0 \Rightarrow \square A^j = 0$$

Podemos por tanto expandir las soluciones del potencial en series de Fourier dentro de una caja de dimensiones L_1, L_2 y L_3 suponiendo condiciones periódicas para cada coordenada y obteniendo la conocida cuantificación en el espacio de momentos:

$$k_1 = \frac{2\pi n_1}{L_1} \quad k_2 = \frac{2\pi n_2}{L_2} \quad k_3 = \frac{2\pi n_3}{L_3}$$

tendremos

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \sum_{k_1 k_2 k_3} (\vec{A}_{\vec{k}}(t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} + \vec{A}_{\vec{k}}^*(t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}})$$

en donde dejamos manifiesto el carácter real del campo.

Es manifiesto que en este espacio de momentos la condición de Coulomb se lee como una condición de transversalidad para cada componente:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0 \Rightarrow \vec{k} \cdot \vec{A}_{\vec{k}} = 0$$

que también deberá satisfacer, sustituyendo en las ecuaciones del campo y usando su linealidad:

$$\frac{d^2 \vec{A}_{\vec{k}}}{dt^2} + c^2 |\vec{k}|^2 \vec{A}_{\vec{k}} = 0$$

o, lo que es equivalente, cada componente del campo es solución de la ecuación de un oscilador armónico vibrando en la frecuencia:

$$\omega_k \equiv c |\vec{k}|$$

y podemos separar la dependencia temporal en la forma:

$$\vec{A}_{\vec{k}}(t) \equiv \vec{\epsilon}_{\vec{k}} e^{-i\omega_{\vec{k}} t} \quad \vec{A}_{\vec{k}}^*(t) \equiv \vec{\epsilon}_{\vec{k}}^* e^{i\omega_{\vec{k}} t}$$

pudiendo reescribir el campo como

$$\vec{A}(\vec{x}, t) = \sum_{k_1 k_2 k_3} (\vec{\epsilon}_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} + \vec{\epsilon}_{\vec{k}}^* e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}})$$

Admitiendo para los campos eléctrico y magnético la misma expansión como solución de la ecuación de d'Alembert:

$$\begin{aligned} \vec{E} &= \sum_{\vec{k}} (\vec{E}_{\vec{k}}(t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} + \vec{E}_{\vec{k}}^*(t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}}) \\ \vec{B} &= \sum_{\vec{k}} (\vec{B}_{\vec{k}}(t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} + \vec{B}_{\vec{k}}^*(t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}}) \end{aligned}$$

obtenemos

$$\begin{aligned} \vec{E} &= -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \Rightarrow \vec{E}_{\vec{k}}(t) = i\omega_{\vec{k}} \vec{A}_{\vec{k}}(t) = i|\vec{k}| \vec{A}_{\vec{k}}(t) \\ \vec{B} &= \vec{\nabla} \times \vec{A} \Rightarrow \vec{B}_{\vec{k}}(t) = i\vec{k} \times \vec{A}_{\vec{k}}(t) = \vec{n}_{\vec{k}} \times \vec{E}_{\vec{k}}(t) \end{aligned}$$

es por esto por lo que a las componentes A_k o, equivalentemente, ϵ , se las llama **polari-
zaciones**, ya que tienen la dirección del campo eléctrico.

Vamos a hallar la expresión de la energía para acercarnos a la cuantificación del campo. Partiendo del lagrangiano libre:

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \quad (17.9)$$

y poniéndolo en función de los campos eléctrico y magnético

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= -\frac{1}{4} (E_{00} F^{00} + F_{i0} F^{i0} + F_{0i} F^{0i} + F_{ik} F^{ik}) = \\ &= -\frac{1}{4} (-E^2 - E^2 + \epsilon_{ikj} B^j \epsilon_{ikl} B^l) = \frac{1}{2} (E^2 - B^2) \end{aligned}$$

Recordando la expresión del momento conjugado:

$$\pi^k = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_0 A_k)} = -\partial_0 A^k - \partial_k A^0 = E^k$$

se tiene, para la densidad hamiltoniana

$$\mathcal{H} = \pi^k \dot{A}_k - \mathcal{L} \quad (17.10)$$

la expresión

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= \pi^k(\partial_0 A_k) - \mathcal{L} = E^k(E^k + \partial_k A^0) - \frac{1}{2}(E^2 - B^2) = \\ &= E^2 - \frac{1}{2}(E^2 - B^2) + \vec{E} \cdot \vec{\nabla} V\end{aligned}$$

y por tanto el hamiltoniano se simplificará con las condiciones de contorno a:

$$H = \int d^3x \mathcal{H} = \frac{1}{2} \int d^3x (E^2 + B^2)$$

Si usamos la expresión del campo eléctrico, al calcular e integrar su cuadrado llegaremos a integrales del tipo:

$$\int_0^{L_1} dx e^{i(k_1 - k'_1)x} = L_1 \delta_{k_1 k'_1}$$

con lo que

$$H = \frac{V}{2} \sum_k [(\vec{E}_k \cdot \vec{E}_{-k} + \vec{E}_k \cdot \vec{E}_k^* + cc) + (\vec{B}_k \cdot \vec{B}_{-k} + \vec{B}_k \cdot \vec{B}_k^* + cc)]$$

en donde a cada expresión hay que sumar el complejo conjugado (cc) y entendemos que queda claro por el contexto cuando la V se refiere al volumen, como en el caso anterior. Usando también que:

$$\begin{aligned}\vec{n}_k &= -\vec{n}_{-k} \\ \vec{n}_k \cdot \vec{E}_{\pm k} &= 0 \\ |\vec{B}_k|^2 &= |\vec{E}_k|^2 = \frac{\omega_k^2}{c^2} (\vec{A}_k \cdot \vec{A}_k^*)\end{aligned}$$

vemos que los términos transversales se cancelan:

$$\begin{aligned}\vec{B}_k \cdot \vec{B}_{-k} &= (\vec{n}_k \times \vec{E}_k) \cdot (\vec{n}_{-k} \times \vec{E}_{-k}) = -\epsilon_{ijl} \epsilon_{ipq} n_k^j E_k^l n_k^p E_{-k}^q = \\ &= -|\vec{n}_k|^2 \vec{E}_k \times \vec{E}_{-k} + (\vec{n}_k \cdot \vec{E}_k)(\vec{n}_k \cdot \vec{E}_{-k}) = -\vec{E}_k \cdot \vec{E}_{-k}\end{aligned}$$

con lo que

$$H = 2V \sum_k |\vec{E}_k|^2 = 2 \frac{V}{c^2} \sum_k \omega_k^2 (\vec{A}_k \cdot \vec{A}_k^*)$$

Introduciendo las coordenadas

$$\vec{Q}_k = \frac{\sqrt{V}}{c} (\vec{A}_k + \vec{A}_k^*) \quad \vec{P}_k = \dot{\vec{Q}}_k = -i\omega_k \frac{\sqrt{V}}{c} (\vec{A}_k - \vec{A}_k^*)$$

y desarrollándolas en una base ortonormal en el plano perpendicular a \vec{n} :

$$\vec{k} \cdot \vec{P}_k = \vec{k} \cdot \vec{Q}_k = 0 \Rightarrow \begin{cases} \vec{Q}_k = \sum_{\alpha=1}^2 Q_{k\alpha} \vec{u}_{k\alpha} \\ \vec{P}_k = \sum_{\alpha=1}^2 P_{k\alpha} \vec{u}_{k\alpha} \end{cases}$$

se tiene por fin para el hamiltoniano la expresión

$$H = \frac{1}{2} \sum_k (|\vec{P}_k|^2 + \omega_k^2 |\vec{Q}_k|^2) = \frac{1}{2} \sum_k \sum_{\alpha=1,2} (P_{\alpha k}^2 + \omega_k^2 Q_{\alpha k}^2)$$

con lo que se ha demostrado que **el campo electromagnético sin fuentes se puede representar como un sistema de osciladores armónicos desacoplados vibrando cada uno con frecuencia ω_k y descrito por variables canónicas.**

17.9. Cuantificación del campo electromagnético

El proceso de cuantificación que iniciamos ahora, consiste en ascender el rango de las variables canónicas a operadores en el espacio de estados del sistema. Para ello definimos su actividad fundamental en analogía con los **corchetes de Poisson** de la mecánica clásica, por medio de la correspondencia:

$$[Q, P]_{\text{clásico}} \mapsto \frac{1}{i\hbar} [\hat{Q}, \hat{P}]_{\text{cuántico}} \quad (17.11)$$

con lo que, al igual que ocurría con los corchetes fundamentales, se debe cumplir

$$[\hat{Q}_{k\alpha}, \hat{P}_{k'\alpha'}] = i\hbar \delta_{kk'} \delta_{\alpha\alpha'}$$

otro de los cambios al cuantificar el campo consistirá en transformar los complejos conjugados en los conjugados hermíticos (adjuntos).

Volviendo al potencial vector, su expresión en función de las variables canónicas se puede poner, ahora como operador

$$\hat{A}_k = \frac{c}{2\omega_k \sqrt{V}} (i\hat{P}_k + \omega_k \hat{Q}_k) \equiv c \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_k V}} \sum_{\alpha=1}^2 a_{k\alpha} \vec{u}_{k\alpha}$$

en donde se introducen los operadores

$$a_{k\alpha} \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_k}} (i\hat{P}_k + \omega_k \hat{Q}_k)$$

$$a_{k\alpha}^+ \equiv \frac{1}{\sqrt{2\hbar\omega_k}} (-i\hat{P}_k + \omega_k \hat{Q}_k)$$

que satisfarán las relaciones de conmutación

$$\begin{aligned} [a_{k\alpha}, a_{k'\alpha'}] &= [a_{k\alpha}^+, a_{k'\alpha'}^+] = 0 \\ [a_{k\alpha}, a_{k'\alpha'}^+] &= \delta_{kk'}\delta_{\alpha\alpha'} \end{aligned}$$

Si queremos poner el hamiltoniano en función de operadores debemos tener en cuenta que son eso, operadores, y por tanto los productos no conmutan y debemos realizar correspondencias del tipo:

$$\vec{A}_k \vec{A}_k^* \mapsto \frac{1}{2}(\hat{A}_k \hat{A}_k^+ + \hat{A}_k^+ \hat{A}_k)$$

obteniendo

$$\hat{H} = \sum_k \sum_\alpha \frac{\hbar\omega_k}{2} (a_{k\alpha} a_{k\alpha}^+ + a_{k\alpha}^+ a_{k\alpha}) = \sum_k \sum_\alpha \left(\hat{N}_{k\alpha} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_k \quad (17.12)$$

en donde el operador número es el definido en la mecánica cuántica:

$$\hat{N}_{k\alpha} \equiv a_{k\alpha}^+ a_{k\alpha}$$

Así, el estado de cada oscilador está definido por su número de ocupación y en esta base los autovalores nos darán a su vez el valor de la energía del estado del oscilador:

$$\begin{aligned} \hat{N}_{k\alpha} |N_{k\alpha}, t\rangle &= N_{k\alpha} |N_{k\alpha}, t\rangle \\ E_{k\alpha} &= \hbar\omega_k \left(N_{k\alpha} + \frac{1}{2} \right) \end{aligned}$$

en donde se usa la representación de Schrödinger en la que son los estados los que llevan la dependencia temporal y se pueden obtener a partir del operador de creación como:

$$|N_{k\alpha}, t\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_{k\alpha}!}} (a_{k\alpha}^+)^{N_{k\alpha}} |0, t\rangle$$

de esta forma el estado total viene definido en el espacio de Fock por cada uno de los números de ocupación de los estados de cada oscilador.

A partir del formalismo introducido vemos que hay un problema de consistencia importante. En efecto, si intentamos calcular la energía del estado fundamental nos encontramos con un término infinito:

$$E_0 = \sum_k \sum_\alpha \frac{1}{2} \hbar\omega_k = \infty!$$

Para resolver esta dificultad del infinito en el estado de vacío utilizamos el llamado producto u **orden normal**, debido al físico italiano **Gian Carlo Wick** (denotado por una acotación de dos puntos) para los campos bosónicos, que consiste en poner siempre a la derecha los operadores de destrucción, es decir, como si conmutarán:

$$: a_1 a_1^+ a_2 a_3 a_2^+ := a_1^+ a_2^+ a_1 a_2 a_3$$

El uso de productos normales de Wick es equivalente a una renormalización del origen de energías, tomando este como el valor esperado de la energía en el vacío. En este caso el hamiltoniano y la energía de un estado genérico quedan como:

$$\hat{H} = \sum_k \sum_\alpha \frac{\hbar\omega_k}{2} : (a_{k\alpha} a_{k\alpha}^+ + a_{k\alpha}^+ a_{k\alpha}) := \sum_k \sum_\alpha \hbar\omega_k \hat{N}_{k\alpha}$$

$$E = \sum_k \sum_\alpha N_{k\alpha} \hbar\omega_k$$

Un cálculo análogo al efectuado para el hamiltoniano podríamos hacerlo para el momento total obteniendo la expresión

$$\hat{\vec{P}} = \frac{1}{c} \int d^3x : \hat{\vec{E}} \times \hat{\vec{B}} := \sum_k \sum_\alpha \hbar \vec{k} \hat{N}_{k\alpha}$$

Cada estado individual se asocia con una partícula llamada fotón, γ , y definida por su energía $\hbar\omega_k$, momento $\hbar\vec{k}$ y polarización α . La partícula además es no masiva:

$$m_\alpha^2 = \frac{1}{c^4} E^2 - \frac{1}{c^2} |\vec{p}|^2 = \frac{1}{c^4} \hbar^2 (\omega_k^2 - c^2 |\vec{k}|^2) = 0$$

en donde se ha usado la definición de ω_k y de nuevo se introducen las constantes naturales por claridad como se ha hecho a lo largo de este punto.

17.10. Bosones y fermiones. Conexión espín-estadística

En el formalismo genérico esbozado al principio de este capítulo vimos cómo se favorecía naturalmente el hecho de que varias partículas ocuparan el mismo estado cuántico. En la cuantificación de la teoría de campos de estas partículas aparecían relaciones de conmutación. Sin embargo, esto no es siempre así. De hecho, esto sólo se cumple en el caso de las partículas de espín entero o bosones. El fotón estudiado es el ejemplo paradigmático.

Sin embargo, para las partículas de espín semientero prevalece el llamado **principio de exclusión**, enunciado por Pauli en 1925 y según el cual nunca puede haber dos de tales partículas en el mismo estado cuántico. El principal ejemplo en este caso fue el electrón. A estas partículas se las conoce con el nombre de **fermiones** y el principio de Pauli, en su inicio fundamentalmente fenomenológico, perdió su condición de principio al ser integrado en el formalismo más especial de la teoría de campos y hacerlo corresponder con las distribuciones estadísticas de las partículas en la llamada **conexión espín-estadística**, según la cual los bosones siguen la llamada estadística de Bose-Einstein y los fermiones la de Fermi-Dirac. Este trabajo también fue elaborado por Pauli, basándose en las aportaciones del físico suizo **Markus Fierz**, para el congreso Solvay de 1939 que al final no se celebró debido al violento momento político imperante en Europa. Aunque más adelante intentaremos profundizar en él, vamos a apuntar alguna implicación de una teoría cuántica de campos en un espacio de Fock de fermiones.

En un trabajo fechado en 1928, el alemán **Pascual Jordan** y el húngaro **Eugene Paul Wigner** se dieron cuenta de que para que se cumpliera la antisimetría requerida en los campos fermiónicos había que imponer relaciones de anticonmutación para los operadores creación y destrucción:

$$\begin{aligned} \{a_{ks}, a_{k's'}\} &= \{a_{ks}^+, a_{k's'}^+\} = 0 \\ \{a_{ks}, a_{k's'}^+\} &= \delta_{kk'}\delta_{ss'} \end{aligned}$$

en donde ahora la s representará otro número cuántico, normalmente la tercera componente del espín.

De aquí se deduce que el cuadrado de un operador de creación o destrucción debe ser nulo:

$$\{a_{ks}^+, a_{ks}^+\} = \{a_{ks}, a_{ks}\} = 0 \Rightarrow a_{ks}^2 = (a_{ks}^+)^2 = 0$$

y por tanto el operador número de un estado sólo puede tener autovalores 0 o 1 ya que

$$\begin{aligned} \hat{N}_{ks}^2 &= a_{ks}^+ (a_{ks} a_{ks}^+) a_{ks} = a_{ks}^+ (I - a_{ks}^+ a_{ks}) a_{ks} = \\ &= a_{ks}^+ a_{ks} - \cancel{a_{ks}^+ a_{ks}^+ a_{ks} a_{ks}} \xrightarrow{0} \hat{N}_{ks} \end{aligned}$$

resultado que refleja a la perfección el principio de exclusión de Pauli.

Capítulo 18

PARTÍCULAS RELATIVISTAS DE SPIN 0

18.1. Introducción

La evolución lógica que se podía tomar para hacer una teoría cuántica relativista con el mismo modelo que se siguió para hacer la teoría de ondas de Schrodinger estaba condenada al fracaso. De hecho, **no existe una ecuación de ondas análoga a la de Mecánica Cuántica que sea compatible con ésta y con la relatividad.**

El mismo Schrodinger diseñó una ecuación de ondas relativista, que fue más tarde descubierta independientemente por el físico sueco **Oskar Klein** y el alemán **Walter Gordon**. Hasta su interpretación adecuada en términos de teoría cuántica de campos, fue desechada por tres razones muy justificadas:

- I) No reproducía el espectro de estructura fina del átomo de hidrógeno.
- II) Se podían deducir probabilidades negativas.
- III) Permitía estados de energía negativa.

No fue hasta el año 1934, 6 años después de que Dirac propusiera su ecuación para partículas de espín 1/2, cuando **W.Pauli** y **V. Weisskopf** interpretaron correctamente la ecuación de Klein-Gordon como la que describía un campo cuántico escalar. Veremos por tanto cómo se pudieron salvar estos problemas con una nueva interpretación de la teoría en el formalismo de segunda cuantización, y de hecho esta ecuación es buena para el estudio de muchas partículas sin espín como los mesones π o *piones*.

18.2. La ecuación de Klein-Gordon

Para deducir esta ecuación hay que respetar, aparte del principio cuántico de que los observables aquí son operadores, la vieja fórmula para la energía relativista:

$$E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$$

Recordemos las prescripciones cuánticas para transformar observables, según las cuales:

$$\begin{aligned} E &\mapsto i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \\ \vec{p} &\mapsto -i\hbar \vec{\nabla} \end{aligned}$$

en donde el último símbolo corresponde al operador **nabla** habitual de la geometría diferencial. De aquí naturalmente se infiere:

$$\begin{aligned} E^2 &\mapsto -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \\ \vec{p}^2 &\mapsto -\hbar^2 \nabla^2 \end{aligned}$$

Por tanto la ecuación deseada queda como

$$\hbar^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \hbar^2 c^2 \nabla^2 \phi + m^2 c^4 \phi = 0$$

que usando unidades naturales ($\hbar = c = 1$) queda:

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \nabla^2 \phi + m^2 \phi = 0$$

Veamos ahora su forma covariante. Si usamos la métrica habitual en teoría de partículas (1,-1,-1,-1) podemos reescribir la ecuación anterior introduciendo el operador **D'Alambertiano**, que constituye la generalización del operador laplaciano en un espacio de Minkowsky:

$$\square \equiv g^{\mu\nu} \partial_\nu \partial_\mu = \partial^\mu \partial_\mu = \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2$$

nos queda la **ecuación de Klein-Gordon** en su forma covariante más conocida:

$$\boxed{(\square + m^2)\phi = 0} \quad (18.1)$$

que como vemos es manifiestamente invariante relativista, siempre que ϕ sea una función escalar (que más adelante interpretaremos como un campo), es decir, invariante bajo una transformación Lorentz:

$$x' = \Lambda x \Rightarrow \phi'(x') = \phi(x) = \phi(\Lambda^{-1}x')$$

18.3. Soluciones. Energías negativas

La solución en este caso es la onda plana:

$$\phi(x, t) = N e^{-i(\omega t - kx)} = N e^{-i(Et - \vec{p}\vec{x})} = N e^{-ipx}$$

en donde se asume el producto usual entre los cuadvectores momento y posición:

$$\left. \begin{aligned} p^\mu &= (E, \vec{p}) \\ x^\mu &= (t, \vec{x}) \end{aligned} \right\} \Rightarrow px = p_\mu x^\mu = Et - \vec{p}\vec{x}$$

Nótese también que el cuadrado de este cuadrivector momento nos da el cuadrado de la masa, precisamente el origen de la ecuación de Klein Gordon:

$$p^2 = E^2 - \vec{p}\vec{p} = \frac{m^2}{1-v^2} - \frac{m^2 v^2}{1-v^2} = m^2$$

La solución apuntada es análoga a la solución de Schrödinger y no habría ningún problema de no ser porque no es la única. Esto es debido a que ahora la relación de dispersión es la relativista:

$$\omega(k) = \pm \sqrt{k^2 + m^2} \quad (E = \pm \sqrt{p^2 + m^2})$$

y por tanto en este caso existirán dos soluciones generales, correspondientes a valores de energía positiva y negativa:

$$e^{-i(Et - \vec{p}\vec{x})} \quad ; \quad e^{i(Et + \vec{p}\vec{x})}$$

Este hecho no tendría mucha gravedad si no hubiera transiciones entre estados. En el caso ideal de la partícula libre estos estados no deben interactuar y por tanto podríamos quedarnos sólo con las soluciones con más sentido físico, correspondientes a energías positivas, y trabajar sin preocupación. Sin embargo, este sistema ideal no es realista y en teoría cuántica de campos hay que contemplar el hecho de que una partícula de energía E podría decaer en otra con energía $-E$ (sin más que emitiendo un fotón de energía $2E$).

Interpretar estas soluciones fue uno de los principales escollos del desarrollo de la teoría. Teniendo además en cuenta que el hamiltoniano es definido positivo, como puede verse si uno parte del lagrangiano de Klein-Gordon:

$$\mathcal{L}_{KG} = \partial^\mu \phi^* \partial_\mu \phi - m^2 \phi^* \phi$$

dado aquí en su forma compleja (el factor $1/2$ desaparece debido a que la parte conjugada se toma como un campo distinto en las ecuaciones de Euler), del cual podemos obtener la densidad hamiltoniana a partir del momento conjugado:

$$\Pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_t \phi)} = \partial_t \phi^*$$

$$\mathcal{H} = \Pi \partial_t \phi - \mathcal{L} \Rightarrow \mathcal{H} = \partial_t \phi^* \partial_t \phi + \nabla \phi^* \nabla \phi + m^2 \phi^* \phi$$

cuyo carácter positivo es manifiesto. Hay que decir que estas cantidades complejas dan lugar a dos conjuntos de ecuaciones independientes que se suelen usar para las partículas con carga. Pero como veremos el de las energías negativas no era el único problema que tenía este formalismo.

18.4. El problema de la interpretación probabilística

En el contexto no relativista, la ecuación de Schrödinger definía claramente una corriente conservada a partir de la conservación de la probabilidad. Allí llegamos a una ecuación de continuidad para la densidad de probabilidad y la corriente de probabilidad. Veremos que si

intentamos hacer lo mismo en el formalismo relativista nos encontraremos de nuevo con problemas de interpretación. Encontrar esta corriente es fácil teniendo en cuenta que combinando la ecuación de Klein-Gordon con su compleja conjugada se cumple:

$$\phi^*(\square + m^2)\phi - \phi(\square + m^2)\phi^* = 0$$

lo que implica que

$$\begin{aligned}\partial_\mu j^\mu(x) &= 0 \\ j^\mu &= i(\phi^* \partial^\mu \phi - \phi \partial^\mu \phi^*)\end{aligned}$$

Sin embargo en este caso vemos que la componente que debería corresponderse con una densidad de probabilidad no parece definida positiva:

$$j^0 = i(\phi^* \partial_t \phi - \phi \partial_t \phi^*)$$

siendo la parte espacial básicamente equivalente a la que salía en el formalismo no relativista. Esto es así por el carácter de la ecuación de Klein-Gordon, que compromete una segunda derivada temporal que hace que en la ecuación de continuidad sobrevivan derivadas temporales del campo. Podemos ver más claramente el carácter no positivo de la componente temporal si aplicamos lo deducido a la solución general de la ecuación:

$$\phi(x, t) = e^{-i(Et - \vec{p}\vec{x})} \Rightarrow j^0 = 2E = \pm 2\sqrt{\vec{p}^2 + m^2}$$

llegando a la conclusión de que en efecto podríamos obtener probabilidades negativas sin sentido físico si siguiéramos defendiendo la interpretación probabilística no relativista.

Esto sugiere que esta densidad debe ser reinterpretada como la conservación de alguna cantidad no definida positiva, como la carga eléctrica, pero no como la conservación de una probabilidad. De hecho veremos que la cantidad adecuada para una corriente de carga conservada Noether será (recuperando las constantes físicas para mayor claridad):

$$\begin{aligned}J^\mu &= \frac{ce}{\hbar} j^\mu = \frac{ice}{\hbar} (\phi^* \partial^\mu \phi - \phi \partial^\mu \phi^*) \\ Q &= \int d^3x J^0 = i \frac{e}{\hbar} \int d^3x (\phi^* \partial_t \phi - \phi \partial_t \phi^*)\end{aligned}$$

Aunque la visión clara de todo esto la tendremos en el formalismo de segunda cuantización, veamos qué forma puede tener la solución de Klein-Gordon y la carga del campo complejo bajo un punto de vista más general.

Vamos para ello a pasar a la representación en momentos, usada muy frecuentemente en teoría de partículas. Cuando hablamos de representación de momentos nos referimos a \mathbf{k} o a \mathbf{p} , que son iguales en unidades naturales. Muchos de los problemas de hecho se caracterizan por describir energías y momentos más que coordenadas espaciotemporales, aparte de que veremos que las expresiones ganan en claridad interpretativa.

Antes de nada, recordemos que se puede desarrollar una función en la forma de Fourier:

$$f(\vec{x}) = \sum_k f_k e^{-i\vec{k}\vec{x}}$$

en donde se puede imaginar una caja de dimensiones L_i con condiciones de contorno tales que den una cuantización para el vector de onda de la forma:

$$k_i = \frac{2\pi n_i}{L_i} \quad n_i = 1, 2, \dots \Rightarrow \Delta^3 \vec{k} = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

y por tanto

$$f(\vec{x}) = \sum_k \frac{\Delta^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} V f_k e^{-i\vec{k}\vec{x}}$$

de lo que se puede suponer la forma que tendrá la suma en el continuo:

$$f(\vec{x}) = \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} V f(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{x}} \equiv \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \tilde{f}(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\vec{x}}$$

Siguiendo este mismo procedimiento se puede suponer que la integral de Fourier en el espacio de momentos correspondiente a la onda de posición tendrá la forma:

$$\phi(x) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^4 p \tilde{\phi}(p) \delta(p^2 - m^2) e^{-ipx}$$

en donde el volumen V ha sido de nuevo absorbido en la función transformada y la delta de Dirac nos asegura que el integrando sólo sea distinto de cero cuando se cumpla que $E^2 - \vec{p}^2 = m^2$ o, dicho de otra forma, cuando el desarrollo satisfaga de nuevo la ecuación de Klein-Gordon:

$$(\square + m^2)\phi(x) \propto \int d^4 p \tilde{\phi}(p) (-p^2 + m^2) \delta(p^2 - m^2) e^{-ipx} = 0$$

en donde se ha hecho uso de la propiedad $x\delta(x) = 0$. A este tipo de integraciones se las denomina integraciones sobre la *capa de masas*. No hay que obsesionarse con las constantes que se añaden ya que cada autor sigue sus propios criterios y se pueden encontrar de varias maneras en los textos. Muchos de hecho optan por usar raíces cuadradas en los denominadores para lograr simetrías con las transformadas inversas y otros siguen arrastrando las constantes físicas que no aparecen si se usan unidades naturales. Aquí intentaremos avisar de las distintas notaciones.

Aunque la expresión dada del desarrollo de Fourier en espacio de momentos es manifiestamente invariante Lorentz, es conveniente hacer actuar a la delta de Dirac para integrar sobre la componente temporal y quedarnos sólo con una integral tridimensional. Para ello hay que recordar la propiedad de la delta sobre los ceros de su argumento:

$$\delta(f(x)) = \sum_{i=1}^n \frac{1}{|f'(x_i)|} \delta(x - x_i) \Rightarrow \delta(p^2 - m^2) = \frac{1}{2E} [\delta(p^0 - E) + \delta(p^0 + E)]$$

siempre que $f(x_i) = 0$

con lo que podemos separar las soluciones de energía positiva y negativa en la forma

$$\phi(x) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3p}{2p^0} \left[\tilde{\phi}_+(p) e^{-ipx} + \tilde{\phi}_-(p) e^{ipx} \right]$$

$$\text{con } p^0 = E \quad y \quad \begin{cases} \tilde{\phi}_+(p) \equiv \tilde{\phi}(E, \vec{p}) \\ \tilde{\phi}_-(p) \equiv \tilde{\phi}(-E, -\vec{p}) \end{cases}$$

Es importante recordar que estamos tratando el caso de soluciones complejas. Para las funciones reales se debe cumplir, lógicamente:

$$\tilde{\phi}_+^* = \tilde{\phi}_-$$

Aunque en este caso el hecho esté más oculto, la forma integral tridimensional también es invariante Lorentz ya que el elemento de volumen ha sido deducido de un invariante Lorentz con la propiedad de la delta de Dirac ya mencionada.

Veamos la forma de la carga conservada en espacio de momentos. Para ello debemos usar la derivada temporal del campo:

$$\partial_t \phi(x) = \frac{-i}{2(2\pi)^3} \int d^3p \left[\tilde{\phi}_+(p) e^{-ipx} - \tilde{\phi}_-(p) e^{ipx} \right]$$

teniendo en cuenta la definición de la delta de Dirac:

$$\delta(\vec{p} - \vec{p}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3x e^{\pm i(\vec{p} - \vec{p}')x}$$

encontramos sin demasiada dificultad la expresión de la carga en el espacio de momentos (de nuevo incluyendo las constantes físicas):

$$Q = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{ec}{\hbar^2} \int \frac{d^3p}{2p^0} \left[\tilde{\phi}_+^*(p) \tilde{\phi}_+(p) - \tilde{\phi}_-^*(p) \tilde{\phi}_-(p) \right]$$

en donde, aparte de confirmar el hecho de que la carga no es definida positiva, se observa que las soluciones de energía positiva y negativa contribuyen con cargas de signo opuesto, lo cual es consistente con una interpretación partícula-antipartícula.

Como ya se ha dicho, esto se entenderá mejor en la reinterpretación de los campos como operadores de creación y destrucción de partículas, de forma que las energías negativas correspondan a antipartículas asociadas con operadores de destrucción de soluciones de energía positiva.

Asimismo se ve claramente que las partículas neutras deberán estar asociadas a campos reales en donde se cumple que $Q = 0$. Esto es así por ejemplo en el caso del campo electromagnético.

18.5. Cuantificación canónica

El método que debemos seguir para cuantificar el campo de KG es análogo al ya estudiado para el campo electromagnético. Se procederá por tanto a sustituir las variables dinámicas por operadores a partir de la prescripción de Heisenberg (17.11).

El uso de conmutadores, como vimos, está restringido a las partículas de espín entero (bosones). Veremos que en el caso de los fermiones habrá que usar relaciones con anticonmutadores para obtener una descripción consistente.

A partir de esta prescripción el procedimiento de cuantificación es el de conmutador a tiempos iguales, con lo que en principio no es un formalismo invariante Lorentz:

$$\begin{aligned} [\hat{\phi}(\vec{x}, t), \hat{\pi}(\vec{y}, t)] &= i\hbar\delta^{(3)}(\vec{x} - \vec{y}) \\ [\hat{\phi}(\vec{x}, t), \hat{\phi}(\vec{y}, t)] &= [\hat{\pi}(\vec{x}, t), \hat{\pi}(\vec{y}, t)] = 0 \end{aligned}$$

en donde podemos ver que las funciones de campo han sido ascendidas al rango de operadores denotándolos con un arco circunflejo encima. Nos olvidaremos no obstante por comodidad de esta notación y tendremos siempre en cuenta que los campos serán operadores.

La lagrangiana del sistema es en este caso:

$$\mathcal{L} = \dot{\phi}^+ \dot{\phi} - c^2 \nabla \phi^+ \nabla \phi - \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \phi^+ \phi$$

y por tanto los momentos conjugados:

$$\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = \dot{\phi}^+ \quad \pi^+ = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}^+} = \dot{\phi}$$

La densidad hamiltoniana por su parte es:

$$\mathcal{H} = \pi \dot{\phi} + \pi^+ \dot{\phi}^+ - \mathcal{L} = \pi \pi^+ + c^2 \nabla \phi^+ \nabla \phi + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \phi^+ \phi$$

Por tanto el operador hamiltoniano será:

$$H = \int d^3x [\pi(x) \pi(x)^+ + c^2 \nabla \phi^+(x) \nabla \phi(x) + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \phi^+(x) \phi(x)]$$

y las ecuaciones de Hamilton quedan

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{x}, t) = [\phi(\vec{x}, t), H] \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \pi(\vec{x}, t) = [\pi(\vec{x}, t), H] \end{cases}$$

con análogas expresiones para sus hermíticos. Desarrollándolas con ayuda de las relaciones de conmutación propuestas obtenemos:

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi(\vec{x}, t) = i\hbar \pi^+(\vec{x}, t) \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \pi^+(\vec{x}, t) = i\hbar \left(c^2 \nabla^2 \phi(\vec{x}, t) - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \phi(\vec{x}, t) \right) \end{cases}$$

que combinadas nos llevan de nuevo a la ecuación de Klein-Gordon, esta vez para los operadores:

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - \nabla^2 \phi - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \phi = 0$$

lo que nos muestra que con las relaciones de conmutación propuestas todo cuadra, es decir, los operadores de campo también cumplen la ecuación de K-G.

Tendremos por tanto que construir un espacio de Hilbert en donde actúen estos operadores y se cumplan las ecuaciones del movimiento sobre ellos. Para ello usamos de nuevo el espacio de Fock como hicimos en el caso del campo electromagnético, es decir, la representación de números de ocupación de estados de vibración ya estudiada. Esto es lícito hacerlo en el caso libre debido al hecho de que los campos libres relativistas que representan partículas escalares satisfacen la ecuación de Klein-Gordon y por tanto se pueden expandir en desarrollos de ondas planas. (Esto no ocurre en el caso de campos con interacción, en donde se aplica la teoría perturbativa).

Recordemos que clásicamente llegamos a

$$\phi(x) = \frac{c}{(2\pi\hbar)^3} \int \frac{d^3p}{2E_p} \left[\underbrace{\tilde{\phi}_+(p)}_{\text{energía positiva}} e^{-ipx/\hbar} + \underbrace{\tilde{\phi}_-(p)}_{\text{energía negativa}} e^{ipx/\hbar} \right]$$

Si identificamos las transformadas de Fourier de energía positiva y negativa con los operadores siguientes:

$$\begin{aligned} \hat{\phi}_+(\vec{p}) &= \frac{\hbar}{c} \sqrt{2E_p V} \hat{a}(\vec{p}) \\ \hat{\phi}_-(\vec{p}) &= \frac{\hbar}{c} \sqrt{2E_p V} \hat{b}^+(\vec{p}) \end{aligned}$$

estos coeficientes están elegidos de forma que los nuevos operadores serán adimensionales. Para los operadores de campo por tanto se tendrán las expresiones (olvidándonos de nuevo del gorrito de operador):

$$\begin{aligned} \phi(x) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\hbar\sqrt{V}}{\sqrt{2E_p}} [a(\vec{p})e^{-ipx/\hbar} + b^+(\vec{p})e^{ipx/\hbar}] \\ \pi(x) &= \frac{\partial \phi}{\partial t} = i \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \sqrt{\frac{VE_p}{2}} [a^+(\vec{p})e^{ipx/\hbar} - b(\vec{p})e^{-ipx/\hbar}] \end{aligned}$$

con expresiones análogas para $\phi^+(x)$ y $\pi^+(x)$, que en principio son campos independientes a no ser que consideremos partículas neutras (operadores hermiticos) en donde $b^+ = a^+$.

De estas expresiones se pueden obtener por inversión expresiones también para los operadores a y b , que deberán cumplir las relaciones de conmutación siguientes:

$$[a(\vec{p}), a(\vec{q})^+] = (2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{q}) \frac{1}{V}$$

$$[b(\vec{p}), b(\vec{q})^+] = (2\pi\hbar)^3 \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{q}) \frac{1}{V}$$

siendo las demás conmutaciones nulas. Para el caso de volúmenes finitos los valores del momento están discretizados, y las integrales se convierten en sumas y, de acuerdo con las correspondencias ya estudiadas

$$\sum_p \rightarrow \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} V$$

$$\delta_{pp'} \rightarrow \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}')$$

se obtienen

$$\boxed{\begin{aligned} [a_{\vec{p}}, a_{\vec{q}}^+] &= \delta_{\vec{p}\vec{q}} \\ [b_{\vec{p}}, b_{\vec{q}}^+] &= \delta_{\vec{p}\vec{q}} \end{aligned}}$$

El hamiltoniano en términos de estos nuevos operadores tiene por tanto la forma

$$\hat{H} = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} V E_{\vec{p}} [a^+(\vec{p})a(\vec{p}) + b(\vec{p})b^+(\vec{p})] =$$

$$= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} V E_{\vec{p}} \left[a^+(\vec{p})a(\vec{p}) + b^+(\vec{p})b(\vec{p}) + \frac{(2\pi\hbar)^3}{V} \delta^{(3)}(\vec{p} - \vec{p}') \right]$$

El último término de nuevo carece de sentido físico ya que asociaría una energía infinita al vacío, como se puede ver en la expresión discreta:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{p}} E_{\vec{p}} [a_{\vec{p}}^+ a_{\vec{p}} + b_{\vec{p}}^+ b_{\vec{p}} + 1]$$

Estos términos de nuevo desaparecen si prescribimos el orden normal ya definido para nuestros operadores:

$$\hat{H} = \int d^3x : \left[\pi\pi^+ + c^2 \nabla\phi^+ \nabla\phi + \frac{m^2 c^4}{\hbar^2} \phi^+ \phi \right] :$$

quedando por ejemplo para el caso discreto

$$\hat{H} = \sum_{\vec{p}} E_{\vec{p}} [a_{\vec{p}}^+ a_{\vec{p}} + b_{\vec{p}}^+ b_{\vec{p}}]$$

que se puede comparar con el del campo electromagnético

$$\hat{H} = \sum_k \sum_{\alpha} \hbar \omega_k a_{\vec{k}\alpha}^+ a_{\vec{k}\alpha}$$

viendo las dos claras diferencias que tiene el campo de KG estudiado, por un lado la ausencia de un índice de polarización (la helicidad del fotón es consecuencia de ser una partícula de espín 1) y la presencia de los operadores b consecuencia de considerar un campo con carga (el operador A era hermítico).

De la misma forma podríamos calcular el operador momento

$$\hat{\vec{P}}(t) = - \int d^3x [\pi \hat{\nabla} \phi + \hat{\nabla} \phi \pi^+]$$

que nos daría las expresiones

$$\begin{aligned} \hat{\vec{P}} &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} V \vec{p} (a^+(\vec{p})a(\vec{p}) + b(\vec{p})b^+(\vec{p})) \\ \hat{\vec{P}} &= \sum_{\vec{p}} \vec{p} (a_{\vec{p}}^+ a_{\vec{p}} + b_{\vec{p}} b_{\vec{p}}^+) \end{aligned}$$

no siendo necesario en este caso el orden normal debido a la cancelación de \vec{p} y $-\vec{p}$ en la suma. Se puede por tanto definir el cuadrivector de la teoría como

$$\hat{P}^{\mu} = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} V p^{\mu} (a^+(\vec{p})a(\vec{p}) + b^+(\vec{p})b(\vec{p}))$$

18.6. Espacio de estados

De forma análoga a como hicimos en el caso del campo electromagnético, vamos a construir el espacio de Hilbert sobre el que actúan los operadores campo, cuya representación más inmediata es la de números de ocupación (espacio de Fok).

Para las dos clases de osciladores existentes se definen dos operadores número hermíticos de la forma:

$$\hat{N}_{\vec{p}}^{(a)} \equiv a^+(\vec{p})a(\vec{p}) \quad \hat{N}_{\vec{p}}^{(b)} \equiv b^+(\vec{p})b(\vec{p})$$

De esta forma la energía de cada grupo de osciladores con momento \vec{p} se podrá desglosar como

$$\hat{H}_{\vec{p}}^{(a)} \equiv E_{\vec{p}} \hat{N}_{\vec{p}}^{(a)} \quad \hat{H}_{\vec{p}}^{(b)} \equiv E_{\vec{p}} \hat{N}_{\vec{p}}^{(b)}$$

correspondiendo a las contribuciones de los dos tipos de partículas.

El hecho de que estos operadores conmuten nos permite afirmar que se pueden definir autoestados comunes, siendo sus autovalores los números de ocupación:

$$\begin{aligned}\hat{N}_{\vec{p}}^{(a)} |N_{\vec{p}}\rangle^{(a)} &= N_{\vec{p}} |N_{\vec{p}}\rangle^{(a)} \\ \hat{N}_{\vec{p}}^{(b)} |N_{\vec{p}}\rangle^{(b)} &= N_{\vec{p}} |N_{\vec{p}}\rangle^{(b)}\end{aligned}$$

Asimismo se pueden interpretar los operadores a^+ y a y b^+ y b como los de creación y destrucción de partículas y antipartículas respectivamente, siendo las antipartículas las correspondientes a las soluciones de energía negativa (que no obstante contribuyen en este formalismo con una cantidad positiva de energía).

$$\left. \begin{aligned}[\hat{N}_{\vec{p}}, a_{\vec{p}}^{\pm}] &= a_{\vec{p}}^{\pm} \\ [\hat{N}_{\vec{p}}, a_{\vec{p}}] &= -a_{\vec{p}}\end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{cases} \hat{N}_{\vec{p}} a_{\vec{p}}^+ |N_{\vec{p}}\rangle = (N_{\vec{p}} + 1) |N_{\vec{p}}\rangle \\ \hat{N}_{\vec{p}} a_{\vec{p}} |N_{\vec{p}}\rangle = (N_{\vec{p}} - 1) |N_{\vec{p}}\rangle \end{cases}$$

siendo el estado fundamental aquel en el que

$$\hat{N}_{\vec{p}} |0\rangle = 0$$

Los autoestados por tanto se pueden definir como

$$|N_{\vec{p}}\rangle^{(a)} = \frac{1}{\sqrt{(N_{\vec{p}})!}} a_{\vec{p}}^+ a_{\vec{p}}^+ \cdots a_{\vec{p}}^+ |0\rangle^{(a)}$$

Concluimos por tanto que los operadores $a^+(\vec{p})$ y $b^+(\vec{p})$ crean partículas y antipartículas respectivamente, y los $a(\vec{p})$ y $b(\vec{p})$ las destruyen. Dividiendo también el campo de KG se puede poner

$$\hat{\phi}(x) = \hat{\phi}_+(x) + \hat{\phi}_-(x)$$

con lo que

$$\left. \begin{aligned} \hat{\phi}_+(x) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\hbar\sqrt{V}}{\sqrt{2E_{\vec{p}}}} a(\vec{p}) e^{-i/hpx} \\ \hat{\phi}_-(x) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\hbar\sqrt{V}}{\sqrt{2E_{\vec{p}}}} b^+(\vec{p}) e^{i/hpx} \end{aligned} \right\} \Rightarrow \begin{cases} \hat{\phi}_-^+(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\hbar\sqrt{V}}{\sqrt{2E_{\vec{p}}}} a^+(\vec{p}) e^{i/hpx} \\ \hat{\phi}_+^-(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \frac{\hbar\sqrt{V}}{\sqrt{2E_{\vec{p}}}} b(\vec{p}) e^{-i/hpx} \end{cases}$$

campos definidos en la representación de Heisenberg (los estados son constantes en el tiempo) y cuya interpretación es clara: $\hat{\phi}_+(x)$ destruye una partícula en el punto x y $\hat{\phi}_-(x)$ crea una antipartícula en el punto x , y los adjuntos hacen lo contrario (los subíndices $+$ y $-$ solo se ponen para indicar que son soluciones de energía positiva y negativa respectivamente).

Si utilizamos la representación espacial en lugar de la de números de ocupación un estado de muchas partículas localizadas en $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n$ será:

$$|\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n; t\rangle \equiv \phi_-^+(\vec{x}_1, t) \cdots \phi_-^+(\vec{x}_n, t) |0\rangle$$

y en el espacio de Fok un estado general con N_1 partículas de momento \vec{p}_1 , N_2 partículas de momento \vec{p}_2 , etcétera, será

$$|N_1, N_2, \dots\rangle = \frac{(a_1^+)^{N_1} (a_2^+)^{N_2} \dots}{(N_1! N_2! \dots)^{1/2}} |0\rangle$$

Y la función de onda correspondiente al estado anterior en la representación de coordenadas se puede poner como

$$\phi_{N_1, N_2, \dots}(x_1, \dots, x_n) = \langle \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n; t | N_1, N_2, \dots \rangle$$

con $n = N_1 + N_2 + \dots$. Se tratará de una función simétrica respecto al intercambio de partículas, y si pusiéramos el ejemplo de las antipartículas sería igual, lo que indica que las partículas de espín cero cumplen la estadística de *Bose-Einstein*.

Capítulo 19

ELECTRODINÁMICA CUÁNTICA

19.1. Introducción

El primer ejemplo satisfactorio de una teoría cuántica de campos fue la electrodinámica cuántica (**EDC** o, en inglés, **QED**), la teoría del electrón y el fotón.

Las dos consecuencias fundamentales de los principios de una teoría cuántica de campos se pueden ver aquí:

- 1) La fuerza electromagnética entre dos electrones surge de la emisión de un fotón por una de las partículas y su absorción por la otra. La conservación de la energía-momento está garantizada si uno admite el principio de incertidumbre.
- 2) Cuando Dirac publicó su ecuación relativista para el electrón en 1928, abrió las puertas para el desarrollo posterior de la QED. La interpretación de la ecuación de Dirac apuntaba la necesidad de la existencia del *positrón*, antipartícula del electrón, pero inicialmente Dirac no la predijo (por "pura cobardía", según palabras suyas). Sin embargo, fue descubierto experimentalmente en 1932 por Carl Anderson en Caltech y Patrick Blackett en Inglaterra, compartiendo premio Nobel por este hecho.

La electrodinámica cuántica, y cualquier teoría de campos, se pueden estudiar mediante unos diagramas inventados por el físico estadounidense Richard Feynman. En la figura 19.1 se puede apreciar el intercambio de un fotón virtual por dos electrones interactuando electromagnéticamente.

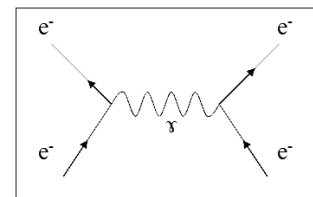


Figura 19.1: Diagrama de Feynman

Parte VI
MISTERIOS CUÁNTICOS

Es equivocado pensar que la tarea de la física es averiguar cómo es la naturaleza. La física se refiere a lo que nosotros podemos decir de ella.

N.Bohr [15]

Capítulo 20

INTERPRETACIÓN DE COPENHAGUE-GOTINGA

20.1. Introducción

Toda teoría física exige, además del formalismo que la encuadra, una interpretación que la haga comprensible. En ese sentido, la teoría cuántica es la que más interpretaciones ha generado, como por ejemplo: 1) la de Copenhague-Gotinga de Bohr, Heisenberg y Born; 2) la ortodoxa de von Neumann y Wigner; 3) la del universo participatorio de Wheeler; 4) La estadística de Einstein; 5) la de la onda-piloto de de Broglie 6) la causal de Bohm; 7) la de muchos mundos de Everett; 8) la de las historias decoherentes de Griffiths, Omnés, Gell-Mann, Hartle y Zurek, etc. Lo más sorprendente es que varias de estas interpretaciones coexisten todavía en la actualidad, aunque otras han sido claramente superadas.

La que aquí nos ocupa, la de Copenhague o Copenhague-Gotinga, que es como debería llamarse, es la interpretación que surgió en los albores de esta rama de la física y en los años 30 fue completada por la llamada *ortodoxa* que ha sobrevivido prácticamente hasta finales del siglo XX, siendo de nuevo completada aunque nunca refutada con éxito ni experimentalmente ni en su esencia filosófica. Los principales promotores de estas ideas fueron Bohr y su discípulo Heisenberg. En 1949, Albert Einstein recordaba sobre la época de la creación de la mecánica cuántica: “Todos mis intentos de adaptar las bases teóricas de la física a los nuevos resultados sufrieron un rotundo fracaso. Tenía la sensación como si perdiera pie y por ninguna parte se veía terreno firme donde se pudiera edificar. Siempre me pareció un milagro que esta base oscilante y llena de contradicciones resultara suficiente para permitir a Bohr, hombre de genial intuición y fino instinto, hallar las leyes más importantes de las líneas espectrales y de las envolturas electrónicas de los átomos, incluyendo su valor para la química. También ahora esto me parece un milagro. Es la suprema musicalidad en la esfera del pensamiento”

20.2. Principio de complementariedad

En el discurso de aceptación de su premio Nobel en 1954, Max Born recordó lo profundamente divididos que estaban los famosos teóricos cuánticos en dos campos: “. . . cuando digo

que los físicos aceptaban el modo de pensar que en aquella época habíamos desarrollado no estoy siendo del todo correcto. Entre los investigadores que contribuyeron de manera destacada a la construcción de la mecánica cuántica hubo algunas excepciones notabilísimas. El mismo Planck estuvo entre los escépticos hasta su muerte y Einstein, de Broglie y Schrodinger no dejaron nunca de subrayar los aspectos insatisfactorios de la teoría...”.

Este dramático desacuerdo giraba en torno a algunas de las cuestiones más fundamentales de toda ciencia: ¿existen los objetos atómicos con independencia de las observaciones humanas?; y si es así, ¿es posible que el hombre comprenda de forma correcta su comportamiento?

Puede decirse que, en general, las escuelas de Copenhague y Gotinga (Bohr, Heisenberg, Born...) respondieron de manera más o menos pesimista a esas cuestiones. Y en contra de esta idea estaban Einstein, Planck, Schrodinger, Ehrenfest y de Broglie. Con relación a esto Heisenberg escribió: “. . . todos los que se oponen a la interpretación de Copenhague están de acuerdo en un punto. En su opinión sería deseable volver al concepto de realidad de la física clásica o, para utilizar un término más filosófico, a la ontología del materialismo. Preferirían retornar a la idea de un mundo real objetivo, cuyas partes más pequeñas existen objetivamente del mismo modo que existen los árboles y las piedras, con independencia de si son observadas o no”

Dos fueron los desencadenantes físicos del desarrollo de la interpretación de Copenhague-Gotinga: **la dualidad onda-corpúsculo** y **el principio de incertidumbre**. El año más importante de culminación de esta interpretación fue 1927.

A partir de 1911, el industrial químico belga Solvay patrocina conferencias internacionales de física a las que se invita a la élite científica. Estos encuentros son ocasión de que especialmente Bohr y Einstein debatan las dificultades conceptuales de la nueva teoría y discutan sobre los denominados *experimentos mentales*. Uno y otro presentan su experimento conceptual para refutar la teoría del otro. En la Conferencia Solvay de 1927 el experimento a debatir toma como base el realizado por Thomas Young en 1801, el famoso **experimento de la doble rendija** en donde, a partir de unas franjas de interferencia, se ponía en evidencia la naturaleza ondulatoria de la luz. Este hecho no concordaba con la misma hipótesis cuántica que sobre la luz había hecho Einstein, según la cual ésta se comportaba de forma corpuscular en minúsculos paquetes denominados *fotones*.



Figura 20.1: Bohr y Einstein

Esta dualidad de la naturaleza, la luz actuando como onda si atravesaba rendijas o como corpúsculo si incidía sobre una placa fotográfica no satisfacía a Einstein: parecía perderse la realidad objetiva. Sin embargo, la escuela de Copenhague-Gotinga lo explicaba gracias al *principio de complementariedad* introducido poco antes, en septiembre de ese mismo año, por el propio Bohr. En síntesis este principio viene a afirmar que si se quiere aprehender la naturaleza como un todo, hay que expresarse utilizando modos de descripción contradictorios. Bohr decía que las teorías ondulatoria y corpuscular eran ejemplos de modos complementarios de descripción, válidos cada uno por sí mismos, aunque (en términos de la física de Newton) incompatibles entre sí. Este principio sería pues una forma de sortear la dualidad onda-corpúsculo y tam-

bién, como veremos a continuación el otro gran aporte que enunció su discípulo ese mismo año.

Werner Heisenberg propugna un nuevo principio de comportamiento de la naturaleza en el mundo microfísico, la interacción observador-observado no contemplada en el paradigma clásico. Por ejemplo, si queremos observar un electrón, de alguna manera lo tenemos que iluminar con fotones de luz, y esto lo perturbará, es decir, ya no estará en el estado que queríamos observar. Existe un límite fundamental en la precisión con que podemos determinar simultáneamente ciertos pares de variables. La naturaleza es así, cuanto más nos acercamos a ella más difuminada se nos muestra.

Sin embargo, según el principio de complementariedad pueden aparecer dos modos de descripción de un sistema determinado como mutuamente exclusivos, aunque ambos sean necesarios para la completa comprensión del sistema. Así, por una parte, podemos querer destacar la causalidad teniendo en cuenta que hay una evolución bien determinada del estado del sistema, definido por su función de onda. No obstante, esta descripción sólo tiene significado si dejamos de hacer observaciones de las variables de espacio y tiempo, ya que el proceso de efectuar estas observaciones perturbaría el estado de un modo imprevisible y destruiría la causalidad. Por otra parte, podríamos preferir destacar la descripción espacio-temporal y sacrificar la causalidad. Bohr sostiene que cada descripción ofrece una visión parcial de la “verdad” total respecto al sistema tomado en su conjunto.

Einstein intentó refutar el principio de incertidumbre mediante esos experimentos mentales en los que él era el mejor maestro. Tenía el finde probar que la interacción entre el aparato de medida y el objeto físico, el electrón por caso, no puede ser tan misteriosa e incognoscible como pretendían Bohr, Born y Heisenberg o que la discontinuidad no debía jugar un papel tan grande. Uno de esos experimentos mentales, por ejemplo, consistía en una pared con un agujero pequeño por el que pasaba un electrón que iba a chocar con una pantalla semiesférica, produciendo un centelleo en uno de sus puntos. Einstein argumentaba que inmediatamente antes del impacto, la función de onda tenía un valor no nulo en toda la pantalla, que se debería anular instantáneamente en el momento del impacto (pues el electrón no podía llegar ya a otro punto), lo que contradecía a la teoría de la relatividad pues habría una acción que se propagaría más deprisa que la luz. Bohr argumentó el día siguiente que el principio de incertidumbre obligaba a tener en cuenta el retroceso de la pared al pasar el electrón lo que obligaba a admitir una incertidumbre en el momento de paso, haciendo inválido el argumento de Einstein. Uno a uno Bohr iba refutando los argumentos de Einstein, al costo de varias noches de poco sueño y mucho trabajo.

Parece lógico entonces que cuando en 1947 la corona danesa concedió a Bohr el ingreso como caballero en la aristocrática *Orden del Elefante*, el escudo elegido (ver figura 20.2) llevaba la siguiente inscripción: **contraria sunt complementa**.



20.3. Positivismo

Hay que recordar que el ambiente filosófico de la época estaba impregnado por el **positivismo** lógico generado por físicos y filósofos agrupados en el denominado *Círculo de Viena* (1922). En esta interpretación se adopta el punto de vista basado en el necesario carácter medible de toda magnitud física.

Más adelante, el mismo Popper, el creador del concepto de *falsacionismo en ciencia*, que había sido influido por las bases de ese movimiento en los años 20 (y a veces se le confunde con uno más de ellos), hacía sus matizaciones hacia esta interpretación: “Tenemos ondas y partículas más bien que ondas o partículas. No existe la *complementariedad* bohriana ni tampoco la *indeterminación* heisenbergiana - la llamada fórmula de indeterminación debe ser interpretada como relaciones de dispersión” (1984).

Resumiendo, la interpretación de Copenhague fue una introducción de la filosofía positivista en la física llevada a sus últimas consecuencias, y el ingrediente fundamental de la misma fue el principio de complementariedad de Bohr. En general esta interpretación supone que el mundo físico posee justamente aquellas propiedades que se revelan por la experiencia, y que la teoría sólo puede tratar con los resultados de las observaciones, y no con una realidad hipotética subyacente que pueda o no yacer bajo las apariencias. Cualquier intento de ir más lejos para especificar con mayor precisión los detalles microscópicos de la estructura y evolución de un sistema atómico, inevitablemente sólo encontrará aleatoriedad e indeterminación.

Capítulo 21

EL GATO DE SCHRÖDINGER

21.1. Introducción

A mediados de los años 30 del siglo XX ya estaban establecidos los fundamentos de la Mecánica Cuántica y su interpretación ortodoxa. Sin embargo, fue en esa época cuando los físicos empezaron a ponerla en cuestión con rigurosidad. Uno de esos físicos fue el austriaco Erwing Schrödinger, precisamente uno de sus creadores.

21.2. Descripción

La primera aparición de nuestro gato fue en el mes de noviembre de 1935 en un artículo titulado *Die gegenwärtige Situation in der Quantenmechanik* ("La situación actual de la Mecánica Cuántica") en la revista alemana *Die Naturwissenschaften* ("Ciencias Naturales").

En este experimento mental, Schrödinger maquina una composición diabólica. Se trata de un gato encerrado en una caja de acero en el que hay una vasija cerrada con cianuro de hidrógeno (gas venenoso), amenazada por un martillo acoplado a un contador Geiger. Además, hay una fuente de átomos radiactivos, de manera que si se produce la desintegración radiactiva de algún átomo, el contador Geiger disparará el martillo, que romperá la vasija y, por consiguiente, el gato morirá (figura 21.1).

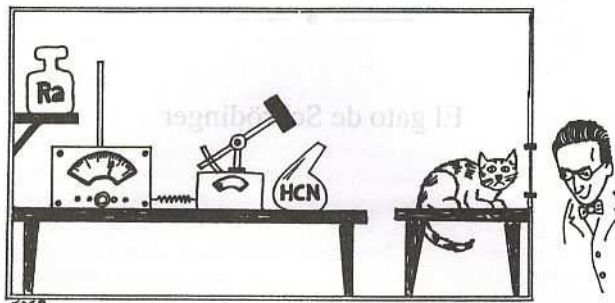


Figura 21.1: Experimento del gato

21.3. Análisis

La Mecánica Cuántica nos da una probabilidad del 50 % de que al cabo de una hora se haya producido la desintegración y el gato esté muerto. ¿Qué sabemos entonces, después de esa hora y sin abrir la caja, del estado del gato? Aparentemente se podría definir un estado puro para el gato en el que se mantuviera vacilando entre la vida y la muerte, en la superposición:

$$|gato\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|vivo\rangle + |muerto\rangle) \quad (21.1)$$

Este estado ya de por sí solo puede considerarse bastante chocante, pero más sinsentido si cabe le parecía a Schrödinger el hecho de que, si miráramos por una mirilla el estado del gato, éste pasaría a estar, o bien vivo, o bien muerto. Y que este hecho de la observación parezca definir la vitalidad del gato deviene, en efecto, absurdo.

De hecho, cualquier observación, por mínima que fuese, podría discernir el estado del gato y por consiguiente colapsar su estado de superposición. Un solo fotón nos podría dar la información de la vitalidad que buscamos y colocaría al gato en un estado vivo o muerto.

Pero a su vez, y este es uno de los aspectos más profundos y controvertidos de la paradoja, cualquier observador ajeno a nosotros podría colapsar ese estado, ¿o no? ¿Qué hay del propio gato observando el frasco? ¿Puede considerarse sólo la consciencia humana capaz de colapsar funciones de onda?

21.4. Interpretaciones

Las diferentes interpretaciones y soluciones que dan los físicos de este interesante experimento siguen siendo hoy en día cuestión de opinión, si bien es cierto que a mi juicio hay opiniones sobre esta paradoja que se alejan bastante del ámbito científico adentrándose en terrenos más resbaladizos, especialmente cuando entran en juego filosofías "orientalizantes", acabando en verdaderos disparates.

Vamos a ver algunas de las líneas interpretativas que a grandes rasgos se han podido encontrar.

21.4.1. Copenhague

Esta es la interpretación más aséptica, la que menos se compromete, ya que según ella lo prescriptivo es no intentar hacer averiguaciones sobre la realidad subyacente. Lo único que tenemos son las predicciones de la Mecánica Cuántica, y según estas la mitad de las veces encontraremos al gato vivo y la otra mitad muerto, cosa que en efecto ocurre. Caso cerrado. Los físicos nos referimos a esto con un viejo aforismo: "¡Calla y calcula!".

No obstante, en mi opinión ningún físico ha estado del todo cómodo con este planteamiento (que en realidad es un "no planteamiento") y, recordando al extraordinario pensador de fundamentos cuánticos John Bell, apetece seguir su máxima: "soy ingeniero cuántico, pero

los domingos tengo mis principios". Vamos a ver alguna otra línea de interpretación de la que se sirvieron sin duda para llenar algún día festivo.

21.4.2. Ortodoxa. Conciencia Cuántica

En los tiempos de la fundamentación de la Mecánica Cuántica pronto se vieron los problemas que planteaban sus postulados, especialmente el relacionado con la medida que rompía frontalmente con la evolución. Fue entonces cuando se pueden situar las explicaciones de la Mecánica Cuántica relacionadas con la consciencia (von Neumann, Wigner), hoy en su mayoría superadas.

No obstante, aún hoy en día existen ideas residuales que relacionan de una forma misteriosa los estados físicos con la consciencia, aunque también hay que decir que algunas de esas ideas las defiende todavía gente con una reputada carrera científica, con exposiciones bastante meditadas (Penrose), pero lógica y lamentablemente esto ha servido de caldo de cultivo en la sofística de la ciencia contemporánea, y hoy en día cualquier chamán puede tener su propia interpretación del problema.

Según estas interpretaciones, en el colapso de la función de onda juega un papel relevante la consciencia, aunque a veces no se deja claro cuál puede ser la definición de esta consciencia. Por ejemplo, qué entes pueden tener suficiente consciencia como para colapsar funciones de onda. Con el humor que le caracterizaba, el mismo John Bell se pregunta, si el sistema es el Universo, "¿estaba la función de ondas esperando a 'saltar' desde hace miles de millones de años, hasta que apareciera un organismo viviente unicelular? ¿o tuvo que esperar algo más hasta la aparición de un medidor cualificado, un doctor en física?" [3].

Como hemos dicho, en los orígenes de la Mecánica Cuántica esta interpretación parecía inevitable y fue propuesta por Eugene Wigner para dar fin a los aparatos de medida que se iban exigiendo recursivamente para que se produjera el colapso de la función de onda. Todo acabaría en la consciencia humana. En la década de los 80 Roger Penrose en cierta medida lo alimentó, si bien de forma mucho más sutil, al ser consciente de las limitaciones del argumento de Wigner. Penrose relaciona el proceso del colapso con la supuesta nueva teoría de la gravitación cuántica, y afirma que la consciencia debe de jugar algún papel activo, siempre que se defina la misma en términos de esa nueva teoría física. También parece admitir que el propio funcionamiento cerebral se debe en gran parte a efectos cuánticos: "...me parece que existe una posibilidad definida de que tales hechos puedan desempeñar un papel en los modos de pensamiento conscientes. Quizá no sea demasiado caprichoso sugerir que las correlaciones cuánticas podrían desempeñar un papel operativo en amplias zonas del cerebro" [23]. Parece no obstante que ni la opinión de sus colegas ni los hallazgos biofísicos sobre el funcionamiento del cerebro han apoyado sus teorías. (Para empezar porque en un órgano que funciona a temperatura ambiente parece inviable que se den efectos cuánticos).

Un punto de vista relacionado con la teoría ortodoxa de Wigner es el de **universo participatorio** de John A. Wheeler. Según este enfoque, las superposiciones lineales pueden resolverse en alternativas reales sin la presencia de una consciencia siempre que su evolución haya conducido a la localización de un ser consciente cuya existencia se explica precisamente porque

aquellas superposiciones han colapsado. Es un argumento circular al que no le falta atractivo: nuestra sola existencia explica multitud de colapsos.

Wheeler cuenta, a propósito de esta idea, una leyenda hebrea basada en una lucha de egos entre Jehová y Abraham: "ni siquiera existirías si no hubiera sido por mí", le dice Jehová, "es cierto, Señor, ya lo sé, pero también es cierto que Tú no serías conocido si no fuera por mí" [23].

Este perfume holístico de la Mecánica Cuántica es el que ha hecho que a veces se encuentre rodeada de corrientes filobudistas ajenas a la Ciencia.

21.4.3. Negaciones del colapso

Una de las teorías más llamativas que prescinden del colapso como determinante de la realidad fue la de los **muchos universos** publicada en 1957 por Hugh Everett III. Según esta teoría la función de onda nunca colapsaría, a costa de tener una visión de ella más global.

Para Everett, cada superposición de vida y muerte en el gato debe estar relacionado a su vez con distintos estados del observador, el que ve el gato vivo y el que ve el gato muerto. En cada medida que se produce el mundo se desdobra, de modo que en cada universo habrá un ejemplar distinto de observador y de gato:

$$|\Psi_{\text{total}}\rangle = |\text{vivo}\rangle \otimes |\text{observador viéndolo vivo}\rangle + |\text{muerto}\rangle \otimes |\text{observador viéndolo muerto}\rangle$$

Everett defiende que nunca se puede separar al observador de la función de onda, y que evolucionan siempre de forma determinista. Lo que ocurre es que cada versión del "yo" sólo percibe una parte de la función de onda global desdoblada en múltiples universos. El universo se bifurca cada vez que se realiza una medida generando constantemente nuevos universos paralelos con historias ligeramente diferentes.

Lógicamente esta curiosa interpretación se ha topado con numerosas críticas, especialmente en lo que atañe a su falta de realidad y poca economía (a su autor, ya fallecido, le han llegado a propugnar insultos como, "fumador empedernido"). Desde un punto de vista más riguroso, cabría preguntar todavía acerca de cuándo exactamente se produce la bifurcación de los mundos o si tenemos que contemplar diferentes líneas de desdoble dependiendo de la base en la que desarrollamos el vector de estado.

En esta línea de negación del colapso y huyendo de las interpretaciones que aluden a la conciencia se encuentra la **teoría de de Broglie-Bohm** (debido a que fue creada en su origen por Louis de Broglie y retomada y ampliada por David Bohm). En ella la función de onda es reinterpretada físicamente como un campo real de naturaleza ondulatoria que existe independientemente del observador, y es definida por la ecuación de Schrödinger. Pero además existe la partícula determinista que va "guiada" sobre la onda, cuya apariencia aleatoria se explica por indeterminaciones en la posición inicial. A menudo se habla por ello de la *onda piloto*, ya que la función de onda define el potencial que guía a la partícula. El colapso impuesto por Copenhague no es aquí más que el resultado de la interacción entre partículas con trayectorias

determinadas.

Hay que decir, sin embargo, que la parte de la función de onda correspondiente a lo no observado podría tener influencia futura, y que el mismo Bohm no creía que su teoría evitara completamente el problema de la conciencia. Como curiosidad decir que Einstein, a quien va dirigido el único agradecimiento de su artículo principal, dijo entre colegas: "David ha hecho algo bueno, pero no es lo que yo le dije".

Como vemos, una objeción importante a estas interpretaciones es lo que ocurre con las ramas de la función de onda que no se miden, ya que podrían dar lugar a futuras interferencias que en el mundo clásico no son observadas. La respuesta a esta cuestión parece que la da un proceso denominado **decoherencia**, que vamos a estudiar aparte por ser compatible con las demás interpretaciones.

21.5. Decoherencia

Según este fenómeno, nunca podremos ver los efectos cuánticos de superposición e interferencia en los sistemas complejos debido a la interacción con el entorno de sus múltiples grados de libertad. Se admite que las fluctuaciones con el entorno eliminan las coherencias de la función de onda, es decir, los procesos cuánticos de interferencia de las ramas de la función de onda son tan aleatorios que no se puede definir un estado puro coherente para un objeto tan complicado.

En el caso del gato, la decoherencia negaría la posibilidad de que se pueda escribir con una superposición como la dada por (21.1). Un gato es un sistema muy complejo, de unos 10^{23} átomos, muy difícil de aislar del entorno (aparte de que la fuerza de la gravedad no se puede apantallar) y en muy poco tiempo la superposición pasa a ser una mezcla de estados incoherentes en donde el gato, o bien estará vivo, o bien muerto, independientemente del observador. (La Luna continúa existiendo ahí fuera aunque nadie la mire porque es imposible que se mantenga en una superposición coherente).

Hay que puntualizar aquí una cosa, y es que nadie está negando que los efectos cuánticos se den a escala macroscópica. Lo que la decoherencia explica es la imposibilidad de observarlos, lo cual por otra parte es lo que nos dice la vida cotidiana. Si se pudiera descifrar exactamente todo lo que ha ocurrido en el entorno podríamos incluso advertir qué ramas darían un patrón de interferencia y exactamente qué otras ramas han hecho que finalmente no se observe. Si pudiéramos controlar exactamente todas las variables en efecto podríamos definir un estado puro total para el sistema, pero nos tenemos que conformar con un estado reducido mezcla estricta.

La decoherencia es por tanto un proceso de pérdida de información, y está relacionado por tanto con los procesos irreversibles. Y un ejemplo de estos sería el colapso. Mientras que la evolución de una función de onda es unitaria y reversible, el colapso es un proceso irreversible cuyos detalles serían justificados por este fenómeno. En este sentido la explicación por historias decoherentes sería la evolución moderna de la interpretación de Copenhague, pero de hecho lo que pretende es describir un proceso físico real, no proponer una interpretación más. De

esta forma estaría apuntalando la interpretación de Copenhague de la Mecánica Cuántica, en el sentido de entender el colapso como un proceso físico.

También ha sido llamada **darwinismo cuántico** por uno de sus defensores más convencidos, el físico de origen polaco Wojciech Hubert Zurek, debido a que se produce una suerte de selección natural debido a la cual sólo sobrevivirían los estados más estables.

Pero veamos de forma más clara que dice el fenómeno decoherente sobre el problema del gato. Podemos pensar en un estado puro un poco más complejo que el admitido hasta ahora, tal como:

$$|\Psi\rangle = \alpha|\Psi_1\rangle + \beta|\Psi_2\rangle$$

en donde, por ejemplo:

$$\begin{aligned} |\Psi_1\rangle &= |\text{vivo}\rangle \otimes |\text{frasco no roto}\rangle \otimes |\text{Geiger no detecta}\rangle \otimes |\text{fuente no emite}\rangle \\ |\Psi_2\rangle &= |\text{muerto}\rangle \otimes |\text{frasco roto}\rangle \otimes |\text{Geiger detecta}\rangle \otimes |\text{fuente emite}\rangle \end{aligned}$$

Sabemos del punto 13.3.1 que siempre podemos representar de forma más general ese estado mediante el proyector unidimensional:

$$\begin{aligned} \rho &= |\Psi\rangle\langle\Psi| = (\alpha|\Psi_1\rangle + \beta|\Psi_2\rangle) \otimes (\alpha^*\langle\Psi_1| + \beta^*\langle\Psi_2|) = \\ &= |\alpha|^2|\Psi_1\rangle\langle\Psi_1| + |\beta|^2|\Psi_2\rangle\langle\Psi_2| + \alpha\beta^*|\Psi_1\rangle\langle\Psi_2| + \beta\alpha^*|\Psi_2\rangle\langle\Psi_1| \end{aligned}$$

que en la base de vectores $|\Psi_1\rangle$ y $|\Psi_2\rangle$ se verá como:

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi| = \begin{pmatrix} |\alpha|^2 & \beta\alpha^* \\ \alpha\beta^* & |\beta|^2 \end{pmatrix}$$

Los elementos no diagonales son los responsables de los fenómenos de interferencia, las famosas **coherencias** que el proceso de decoherencia eliminaría quedando el estado como una mezcla incoherente representada por la matriz densidad (puesta de nuevo en desarrollo de proyectores):

$$\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi| = |\alpha|^2|\Psi_1\rangle\langle\Psi_1| + |\beta|^2|\Psi_2\rangle\langle\Psi_2|$$

en donde las dificultades de las superposiciones lineales han desaparecido, ya que este estado representa un colectivo de sistemas físicos en los cuales el gato está, o bien vivo, o bien muerto.

Aparte de esto, la mayoría de las explicaciones por decoherencia del fenómeno del gato hacen hincapié en lo ridículo que puede ser partir de un estado tan naif como el (21.1). En primer lugar porque si se prepara ese estado el gato debería tener multitud de otras propiedades distintas de la vitalidad perfectamente definidas (como las relacionadas con la expresión de su cara, por poner un ejemplo). O bien el gato podría estar también en los estados puros:

$$|gato\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|vivo\rangle - |muerto\rangle)$$

$$|gato\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|vivo\rangle + i|muerto\rangle)$$

$$|gato\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|vivo\rangle - i|muerto\rangle)$$

o en cualquier otro conjunto de estados mutuamente ortogonales de cualesquiera propiedades incompatibles que imaginemos distintas a la vitalidad.

Lógicamente hay mucha literatura científica discutiendo este fenómeno, especialmente sus partes oscuras, como la elección de la base para su explicación, la naturaleza de la interacción con el entorno o los tiempos en los que tiene lugar, pero hoy en día podemos decir que es muy asumible para muchos físicos. (Teniendo en cuenta, por supuesto, que esto sigue siendo materia de opinión, no de ciencia).

21.6. Los calamares de Schrödinger

Admitiendo por tanto que la Mecánica Cuántica es válida para todos los órdenes de magnitud, tanto microscópicos como macroscópicos, y observando el hecho de que a nivel macroscópico no se dan los efectos cuánticos relacionados con la superposición, cabe preguntarse qué ocurre en la escala intermedia, la mesoscópica, es decir, ¿se pueden observar mesogatos?

La respuesta la está dando la física experimental en las últimas décadas, y parece afirmativa. En principio la base del problema es limitar el número de estados que pueden alcanzar los sistemas, es decir, el problema estaría más relacionado con la complejidad que con la escala métrica. Lo que parece al alcance de cualquier laboratorio es enfriar los materiales cerca del cero absoluto, pero hay que encontrar también tanto un material de naturaleza adecuada como el dispositivo idóneo a emplear.

Aunque ya se dio un primer paso por científicos de la Universidad de Florencia en 1994 con moléculas de $Mn_{12}Ac_{16}$, los primeros imanes monomoleculares, en donde se observaban superposiciones magnéticas por una décima de microsegundo, el hallazgo más conocido se debe a Anton Zeilinger y sus colegas de la Universidad de Viena, en donde en 1999 se observaron interferencias cuánticas con fullerenos, moléculas de carbono de 60 átomos (C_{60}). A partir de este descubrimiento el año siguiente uno de los firmantes del artículo, Markus Arndt, y colegas de Alemania, Estados Unidos y Suiza lograron reproducir un experimento muy similar de hasta 430 átomos.

No obstante, el descubrimiento más espectacular en este sentido se ha producido en 2010 por el grupo de investigación de Andrew Cleland, en la Universidad de California (EEUU). En este experimento han entrado en juego los llamados **SQUIDS** (*Superconducting Quantum Interference Devices*), toros superconductores con una o varias uniones de Josephson (cortes de unos pocos nanómetros que, por efecto túnel, actúan como un cubit, con dos estados cuánticos

bien definidos). Enfriándolo a 25 mK se observaron estados de superposición en un material con unos ¡20 billones de átomos! Estos estados puros cuánticos correspondían a corrientes eléctricas en un sentido y el opuesto, cuyas superposiciones correspondían a dos autoestados de la energía (el fundamental y el excitado) que fueron los observados experimentalmente.

Debido al hecho de que "SQUID" en español se traduce como "calamar", los angloparlantes pueden afirmar que, aunque no se han observado gatos de Schrödinger, **los calamares de Schrödinger ya han sido observados** (aunque hay que tener claro que no a simple vista).

Desgraciadamente los tiempos de decoherencia calculados hasta ahora teóricamente a temperatura ambiente nos dan valores inferiores a la unidad de Planck, por lo que se puede afirmar que es prácticamente imposible observar efectos cuánticos en un sistema clásico, por mucho que la literatura periodística y la "sabiduría" no científica afirme que los físicos defendemos la ubicuidad de los gatos.

Capítulo 22

EL TEOREMA DE BELL

22.1. Introducción

Ya desde su primera formulación en los años 30, la mecánica cuántica recibió objeciones; algunas más superficiales y otras más serias que, si bien no la invalidan ni mucho menos, sí que señalan puntos que el formalismo, o su interpretación, debería aclarar; progresando sin duda en sus éxitos experimentales, pero con un ojo puesto en aquellas cuestiones fundamentales que no sean puramente lingüísticas. La historia que nos atañe aquí es compleja, y es fácil confundir lo sutil con lo trivial, pero vamos a echar un vistazo a los argumentos centrales.

22.2. Elementos de realidad

La más célebre de las mencionadas objeciones a la interpretación ortodoxa de la mecánica cuántica se halla en el famoso artículo de Einstein, Podolski y Rosen, abreviadamente EPR. En el mismo, se propone un concepto de *realidad de una magnitud física* que parece intachable, los llamados *elementos de realidad*:

Si, sin perturbar en modo alguno un sistema, podemos predecir con certeza (esto es, con probabilidad igual a uno) el valor de una cantidad física, entonces existe un elemento de realidad física correspondiente a esta cantidad física.

A. EINSTEIN, B. PODOLSKI, N. ROSEN (1935)

EPR plantean: ¿Podemos preparar un sistema físico en un estado en el que observables a los que la mecánica cuántica (MC en lo que sigue) asigna un carácter de *incompatibles* arrojen un valor cierto? EPR proponen tenderle esta “trampa” a la MC preparando un sistema compuesto por dos subsistemas que viajan a zonas causalmente separadas en las que se ejecutan las mediciones correspondientes simultáneamente en el referencial del laboratorio. EPR plantean el problema como una disyuntiva: o bien la MC es incompleta (existen elementos de realidad no cubiertos por la descripción cuántica), o las cantidades correspondientes a operadores que no conmutan no pueden tener valores definidos simultáneamente, y a continuación argumentan haber encontrado un ejemplo de tales cantidades. El argumento original de EPR es algo ingenuo, utilizando ondas planas para su razonamiento, y centrando su discusión en las variables de posición y momento lineal, en clara omisión de lo que hoy sabemos: que no es posible preparar

un estado completamente definido en *ambas* variables posición y momento lineal, con lo cual nunca tendremos correlaciones exactas, ni siquiera en principio, para ambos subsistemas, ya que las relaciones de indeterminación son constricciones sobre las dispersiones de las variables; no sobre los errores sistemáticos de los aparatos de medición. En otras palabras: cualquier estado conjunto que preparemos de dos partículas vendrá afectado de indeterminaciones en coordenadas y momentos lineales de su centro de masa. En cualquier descripción realista de esta preparación habrá unos ciertos $\Delta \mathbf{x}_{\text{CM}}, \Delta \mathbf{p}_{\text{CM}}$ que harán que incluso la determinación ideal de la posición de una de las partículas no permita garantizar que la segunda partícula tiene posición asignable con certeza, pues la suma $\mathbf{x}_{\text{CM}}^{(1)} + \mathbf{x}_{\text{CM}}^{(2)}$ no es nula de manera exacta (con dispersión nula). Otro tanto se puede decir para el momento lineal.

Esta objeción se supera con el espín, para el cual sí es posible preparar estados con dispersión *total* nula para una variable aditiva respecto a los subsistemas, lo que nos habilita para definir anticorrelaciones exactas dentro del formalismo de la MC.

Se atribuye a David Bohm (Max Jammer, 1974) trasladar la discusión al momento angular de espín. Un sistema de espines preparado en el estado singlete viene dado por:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (22.1)$$

Este estado es famoso en la física por diversos motivos, apareciendo en teoría de grupos, y en particular en la formulación del isospín. Esta *no es en absoluto una configuración exótica*: cualquier sistema de dos espines $\frac{1}{2}$ enfriado suficientemente, emite radiación hasta caer a un singlete. Baste decir que, aunque para su escritura hemos sugerido una configuración particular en términos de una dirección nominal (superposición de la función de onda con espines antiparalelos *menos* la intercambiada), en realidad es simétrico bajo rotaciones. Es decir:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_n\downarrow_n\rangle - |\downarrow_n\uparrow_n\rangle)$$

para cualquier vector unitario de referencia \mathbf{n} .

El singlete de espín, al contrario que los estados de posición y momento lineal (incluso en el caso más favorable de paquetes mínimos, o de indeterminación mínima), *sí tiene* las características deseadas de presentar correlaciones exactas (que en este contexto se llaman anticorrelaciones, por motivos que veremos), al menos en principio (si descartamos el efecto de ruido de los detectores, que siempre está presente). Efectivamente, si \mathbf{J} representa el momento angular total, según el principio de indeterminación, en su versión más general, para, p. ej. J_x y J_y :

$$(\Delta_{|\psi\rangle} J_x) (\Delta_{|\psi\rangle} J_y) \geq \frac{1}{2} \left| \langle [J_x, J_y] \rangle_{|\psi\rangle} \right| = \frac{1}{2} \left| i\hbar \langle J_z \rangle_{|\psi\rangle} \right| = \frac{\hbar}{2} \left| \langle J_z \rangle_{|\psi\rangle} \right| = 0$$

ya que el estado singlete de dos partículas con dos estados de espín (“arriba” y “abajo”) (22.1) satisface $\langle J_x \rangle_{|\psi\rangle} = \langle J_y \rangle_{|\psi\rangle} = \langle J_z \rangle_{|\psi\rangle} = 0$. Como $J_z = S_z^{(1)} + S_z^{(2)}$ (donde los superíndices (1) y (2) entre paréntesis denotarán a partir de ahora “partícula 1” y “partícula 2”), se deduce que la medición de la componente de espín según una dirección establecida para una partícula permite asegurar que la componente de espín según *la misma dirección* para la segunda partícula es igual y opuesta: El sistema presenta indeterminación en sus partes ($S_z = +1$ o $S_z = -1$ con iguales probabilidades de 0,5), y sin embargo certeza en el total

($J_z = 0$ con probabilidad 1); con lo cual, si en una de las partículas el espín S_z , p. ej., resulta positivo, en la otra ha de ser negativo y de igual magnitud. De ahí el nombre de “anticorrelaciones”. Se puede ver más en detalle, calculando los valores esperados cuánticos:

El valor esperado cuántico del cuadrado de $J_z = S_z^{(1)} + S_z^{(2)}$ es:

$$(\Delta_{|\psi\rangle} J_z)^2 = \langle J_z^2 \rangle_{|\psi\rangle} - \left(\langle J_z \rangle_{|\psi\rangle} \right)^2$$

Pero:

$$\begin{aligned} \langle J_z \rangle_{|\psi\rangle} &= \frac{1}{2} \langle \uparrow\downarrow | S_z^{(1)} \otimes I | \uparrow\downarrow \rangle + \frac{1}{2} \langle \downarrow\uparrow | S_z^{(1)} \otimes I | \downarrow\uparrow \rangle + \\ &\quad + \frac{1}{2} \langle \uparrow\downarrow | I \otimes S_z^{(2)} | \uparrow\downarrow \rangle + \frac{1}{2} \langle \downarrow\uparrow | I \otimes S_z^{(2)} | \downarrow\uparrow \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \times \left(\frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \times \left(-\frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \times \left(-\frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \times \left(\frac{1}{2} \right) = 0 \end{aligned}$$

Obsérvese para lo previo que:

$$\begin{aligned} \langle \uparrow\downarrow | S_z^{(1)} \otimes I | \downarrow\uparrow \rangle &= \langle \downarrow\uparrow | S_z^{(1)} \otimes I | \uparrow\downarrow \rangle = \\ &= \langle \downarrow\uparrow | I \otimes S_z^{(2)} | \uparrow\downarrow \rangle = \langle \uparrow\downarrow | I \otimes S_z^{(2)} | \downarrow\uparrow \rangle = 0 \end{aligned}$$

con lo cual:

$$(\Delta_{|\psi\rangle} J_z)^2 = \langle J_z^2 \rangle_{|\psi\rangle}$$

Desarrollando el cuadrado del momento angular total:

$$\langle J_z^2 \rangle_{|\psi\rangle} = \left\langle (S_z^{(1)})^2 \right\rangle_{|\psi\rangle} + \left\langle (S_z^{(2)})^2 \right\rangle_{|\psi\rangle} + 2 \langle S_z^{(1)} S_z^{(2)} \rangle_{|\psi\rangle} = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} - 2 \times \frac{1}{4} = 0$$

Estos son los cálculos:

Sustituyendo $\langle C \rangle_{|\psi\rangle} = \langle \psi | C | \psi \rangle$ con $C = (S_z^{(1)})^2$, $(S_z^{(2)})^2$, $S_z^{(1)} S_z^{(2)}$ y $|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$, y teniendo en cuenta que, en el espacio producto, lo que estamos promediando en realidad son los operadores producto: $S_z^{(1)} \otimes I$, $I \otimes S_z^{(2)}$ y $S_z^{(1)} \otimes S_z^{(2)}$, y que además $S_z = \frac{1}{2}\sigma_z$ (si las partículas son de espín $\frac{1}{2}$, que es lo que supondremos en adelante):

$$\begin{aligned} \langle (S_z^{(1)})^2 \rangle_{|\psi\rangle} &= \frac{1}{8} \langle \uparrow\downarrow | \sigma_z^2 \otimes I | \uparrow\downarrow \rangle + \frac{1}{8} \langle \downarrow\uparrow | \sigma_z^2 \otimes I | \downarrow\uparrow \rangle = \\ &= \frac{1}{8} \langle \uparrow\downarrow | I \otimes I | \uparrow\downarrow \rangle + \frac{1}{8} \langle \downarrow\uparrow | I \otimes I | \downarrow\uparrow \rangle = \frac{1}{4} \\ \left\langle (S_z^{(2)})^2 \right\rangle_{|\psi\rangle} &= \text{igual que el anterior} = \frac{1}{4} \\ \langle S_z^{(1)} S_z^{(2)} \rangle_{|\psi\rangle} &= \frac{1}{2} \times \frac{1}{4} \langle \uparrow\downarrow | \sigma_z \otimes \sigma_z | \uparrow\downarrow \rangle + \frac{1}{2} \times \frac{1}{4} \langle \downarrow\uparrow | \sigma_z \otimes \sigma_z | \downarrow\uparrow \rangle = \\ &= \frac{1}{8} \langle \uparrow | \sigma_z | \uparrow \rangle \langle \downarrow | \sigma_z | \downarrow \rangle + \frac{1}{8} \langle \downarrow | \sigma_z | \downarrow \rangle \langle \uparrow | \sigma_z | \uparrow \rangle = -\frac{1}{8} - \frac{1}{8} = -\frac{1}{4} \end{aligned}$$

Observación: Ninguno de los términos cruzados $\langle \downarrow \uparrow | C | \uparrow \downarrow \rangle$ (con C cualquiera de los operadores función de σ_z) contribuye.

$$\begin{aligned} (\Delta_{|\psi\rangle} J_z)^2 &= \langle J_z^2 \rangle_{|\psi\rangle} \\ \langle J_z \rangle_{|\psi\rangle} &= 0 = \langle S_z^{(1)} \rangle_{|\psi\rangle} = \langle S_z^{(2)} \rangle_{|\psi\rangle} \\ \langle S_z^{(1)} S_z^{(2)} \rangle_{|\psi\rangle} &= -1 = -\langle S_z^{(1)2} \rangle_{|\psi\rangle} = -\langle S_z^{(2)2} \rangle_{|\psi\rangle} \end{aligned}$$

Con lo que:

$$\langle J_z^2 \rangle_{|\psi\rangle} = \langle S_z^{(1)2} \rangle_{|\psi\rangle} + \langle S_z^{(2)2} \rangle_{|\psi\rangle} + 2 \langle S_z^{(1)} S_z^{(2)} \rangle_{|\psi\rangle} = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} - 2 \times \frac{1}{4} = 0$$

Un esquema que quizá pueda ayudar para el desarrollo de todos estos cálculos, incluyendo los que veremos más adelante para el teorema de Bell, es:

$$\left\langle \overbrace{1 \otimes 2}^{\text{vector}} \left| \overbrace{1 \otimes 2}^{\text{operador}} \right| \overbrace{1 \otimes 2}^{\text{vector}} \right\rangle = \left\langle \overbrace{1}^{\text{vector}} \left| \overbrace{1}^{\text{operador}} \right| \overbrace{1}^{\text{vector}} \right\rangle \left\langle \overbrace{2}^{\text{vector}} \left| \overbrace{2}^{\text{operador}} \right| \overbrace{2}^{\text{vector}} \right\rangle$$

22.3. Variables ocultas

Lo que quisiera cualquiera al que le convenza el argumento EPR, y cuya toma de posición sea que la MC es una teoría incompleta, es encontrar unas ciertas variables, que genéricamente llamaremos $\{\lambda\}$, y que modelen la descripción matemática de aquella supuesta parte de la realidad física que la MC no describe. Estas $\{\lambda\}$ no son meras suposiciones metafísicas, sino que tienen dos trabajos que hacer: (1) Valores definidos de las mismas deberían conducir a valores definidos de los elementos de realidad; y (2) Valores promediados de las mismas para cierta distribución de probabilidad $\rho(\{\lambda\})$ deberían conducir a dispersiones en las variables (en general, no compatibles) que tenga sentido medir *y que sean consistentes con las proporcionadas por la MC*. En otras palabras: son las supuestas variables cuya estadística debe dar la MC de modo análogo a como la mecánica estadística de las posiciones y velocidades atómicas da lugar a la termodinámica.

¿Por qué se nos exige una toma de posición? Recuérdese que EPR plantea una disyuntiva: *O bien* la MC es incompleta, *o* existen variables físicas que no pueden tener valores definidos simultáneamente. Téngase presente que, para quien está completamente convencido de que la MC es correcta y completa, no hay problema: ¡Por supuesto que hay variables físicas que no pueden tener valores definidos simultáneamente! Precisamente las que no conmutan.

22.4. Enredamiento

Cuando un sistema cuántico compuesto por dos subsistemas (con grados de libertad independientes) se halla en un estado conjunto tal que:

$$|\psi\rangle^{(1,2)} \neq |\psi\rangle^{(1)} \otimes |\psi\rangle^{(2)}$$

decimos que el sistema 1 está enredado con el sistema 2. Basta para ello que se cumpla, por ejemplo:

$$|\psi\rangle^{(1,2)} = \sum_i c_i |\psi\rangle_i^{(1)} \otimes |\psi\rangle_i^{(2)} \quad (22.2)$$

aunque el estado enredado más general es (de hecho, el estado cuántico más general de un sistema compuesto):

$$|\psi\rangle^{(1,2)} = \sum_{i,j} c_{ij} |i\rangle^{(1)} \otimes |j\rangle^{(2)} \quad (22.3)$$

En el estudio de la decoherencia, el enredamiento, la medición o la teoría cuántica de la información, este concepto de enredamiento se desarrolla en forma más concreta. Véase que los estados $|\psi\rangle_i^{(1)}$ o $|\psi\rangle_i^{(2)}$ referidos en (22.2) *podrían no ser ortogonales*. Cuando ambos conjuntos son ortogonales:

$$\langle \psi_i^{(1)} | \psi_j^{(1)} \rangle = \langle \psi_i^{(2)} | \psi_j^{(2)} \rangle = \delta_{ij}$$

entonces el índice i se presta a la asignación de un observable, que por construcción sería de la forma $(Q^{(1)} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_i q_i |\psi_i\rangle^{(1)} \langle \psi_i|^{(1)})$. Asimismo, se presta a la asignación de un observable del sistema 2 que puede usarse para medir $Q^{(1)}$ en el subsistema 1. En otras palabras, un sistema compuesto que presenta enredamiento en esta forma, es un sistema en el que la no factorizabilidad se produce de tal forma que los coeficientes de enredamiento c_{ij} en (22.3) forman una matriz diagonal. Es una observación de Wojciech Zurek que muchos sistemas físicos tienden a adoptar esta forma cuando se centra la discusión en una parte (1) que tiene pocos grados de libertad y una parte (2) que es típicamente “ambiental” (con muchos grados de libertad) y se tiene en cuenta que las interacciones son locales (funciones puntuales de la posición). Este concepto de Zurek se llama *einselection*, o “superselección de observables inducida por el ambiente”. Dicho de otra forma: el ambiente tiende a favorecer interacciones recurrentes a través de cualquier índice discreto i en el que centremos nuestra atención, rompiendo así la coherencia cuántica. Es una cuestión que tiene que ver con lo peculiar de describir lo que le ocurre a un átomo que está enredado con $\sim 10^{23}$ átomos.

Subsistemas enredados de esta forma peculiar, que es “diagonal” en cierto índice que podría formar parte o no de un conjunto completo de observables compatibles de cualquiera de ambos, se puede definir una entropía que caracteriza el nivel de enredamiento de *ambos*. Si ρ es la matriz densidad del sistema conjunto:

$$s^{(1)}(\rho) = s^{(2)}(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log \rho) = -\sum_i |c_i|^2 \log |c_i|^2 \quad (22.4)$$

donde “Tr” representa la traza de un operador lineal. Es decir:

$$\text{Tr}(\rho) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_i \langle i | \rho | i \rangle$$

para cierta base del espacio de Hilbert $\{|i\rangle\}_{i=1}^{\infty}$.

Funciones como $\log \rho$, que admiten un desarrollo en serie, se definen para operadores diagonalizables de la manera siguiente si admiten un desarrollo en serie de Taylor:

$$\begin{aligned}
 f(\rho) &= f(D^{-1} \text{diag}(\rho_1, \dots, \rho_N) D) = \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(\rho)}{n!} \Big|_{\rho=I} (D^{-1} \text{diag}(\rho_1, \dots, \rho_N) D)^n = D^{-1} f(\rho) D
 \end{aligned}$$

ya que:

$$\begin{aligned}
 &(D^{-1} \text{diag}(\rho_1, \dots, \rho_N) D)^n = \\
 &= D^{-1} \text{diag}(\rho_1, \dots, \rho_N) \overbrace{DD^{-1}}^I \text{diag}(\rho_1, \dots, \rho_N) D \dots \text{diag}(\rho_1, \dots, \rho_N) D \dots \\
 &\quad \dots D^{-1} \text{diag}(\rho_1, \dots, \rho_N) \overbrace{DD^{-1}}^I \text{diag}(\rho_1, \dots, \rho_N) D = \\
 &= D^{-1} \text{diag}(\rho_1, \dots, \rho_N)^n D = D^{-1} \text{diag}((\rho_1)^n, \dots, (\rho_N)^n) D
 \end{aligned}$$

donde D es la matriz que diagonaliza ρ : $\rho = \text{diag}(\rho_1, \dots, \rho_N) = D\rho D^{-1}$.

La definición de entropía (22.4) no es más que la usual en MC, pero referida a los coeficientes (probabilidades $p_i = |c_i|^2$) del desarrollo conjunto de los subsistemas, y recibe el nombre de *entropía de enredamiento*. Cuando dos sistemas están enredados en la forma (22.2) respecto a conjuntos ortogonales $\{|\psi\rangle_i^{(1)}\}$, $\{|\psi\rangle_i^{(2)}\}$, su entropía de enredamiento es una propiedad común, y se puede obtener para el subsistema 1 promediando sobre los estados del subsistema 2, o viceversa:

$$s(\rho) = -\text{Tr}^{(1)}(\rho^{(2)} \log \rho^{(2)}) = -\text{Tr}^{(2)}(\rho^{(1)} \log \rho^{(1)})$$

Es decir, primero promediamos sobre todos los estados del subsistema 2 para obtener la matriz densidad de 1, y después tomamos trazas usando la descomposición espectral de la identidad de 1; o viceversa.

22.5. Localidad

Por localidad quiero decir algo como los axiomas de Atiyah-Segal para cobordismos Riemannianos

(Tomado de un FORO DE FÍSICA TEÓRICA en INTERNET)

3.325. *Con el fin de evitar tales errores debemos hacer uso de un lenguaje de signos que los excluya evitando usar el mismo signo para símbolos diferentes y evitando usar en una forma superficial similar signos que tienen modos diferentes de significación: es decir, un lenguaje de signos que esté gobernado por una gramática lógica, por sintaxis lógica [...]*

LUDWIG WITTEGENSTEIN: *Tractatus Logico-Philosophicus*, Sección 3.325

El término “localidad” en física está afectado del síndrome de la torre de Babel: aparece en la literatura con significados que van desde *sutilmente* distintos a *completamente* distintos, lo cual crea mucha confusión. Intentaremos aclarar las diferencias.

L1 *Localidad en teoría de la matriz de scattering*: La transformada de Fourier de una *amplitud de scattering* con soporte compacto es exponencialmente acotada y analítica en el momento lineal. Es un concepto técnico que no nos interesa aquí y que Arkani-Hamed explica en este vídeo en inglés (hacia 6:20).

L2 *Localidad algebraica, analítica; o si se quiere, matemática* (esta acepción es puramente conversacional, pero es muy usual): A es función local de B si un punto en el espacio de las A (valor numérico a , de A) determina un punto en el espacio de las B (valor numérico b , de B). El significado de esto es “desarrollo en variables que conmutan todas dos a dos”. Los matemáticos hablan de un “desarrollo no local” cuando manejan expresiones polinómicas en variables que no conmutan; ej.: $(A + B)^2 = A^2 + AB + BA + B^2$; con $AB \neq BA$, o más simplemente, cuando $A = f(B)$; con $AB \neq BA$. ¿Por qué llaman a esto los matemáticos “no local”? Porque si $AB \neq BA$, (suponiendo, por simplificar, que tanto A como B son autoadjuntos) *todos los valores puntuales* (numéricos) de B están en *cualquier valor puntual* (numérico) de A : $|a\rangle = \sum_b |b\rangle \langle b|a\rangle$, que no es más que una manera elegante, inventada por Dirac, de escribir la transformación de Fourier.

Esta forma de no localidad nos interesa, porque, como veremos, las variables del experimento EPR *para el espín* son no locales en este sentido cuando uno acepta que la proposición $|a\rangle \langle a|$ (¡los proyectores son proposiciones!) para una partícula implica su negación $(I - |a\rangle \langle a|)$ para la otra partícula. La consecuencia es que la diagramática de Venn no es válida para proposiciones referidas a proyecciones de espín. Esta es la clave de la brillante idea de EPR: sortear la incompatibilidad cuántica, que es aplicable únicamente a operadores que actúan en el espacio de estados de una partícula y que no conmutan (p. ej. $[S_1, S_2] \neq 0$) trasladándola a proposiciones sobre operadores que sí conmutan ($[S_x^{(1)}, S_y^{(2)}] = [S_x^{(1)} \otimes I, I \otimes S_y^{(2)}] = 0$), pero relativos a la otra partícula, utilizando los principios de conservación.

L3 *Localidad en teoría de campos*: Las interacciones son funciones locales en el sentido de que los acoplamientos entre variables de campo en la lagrangiana se expresan en el mismo punto: $\Psi_i(x) \Psi_j(x)$, y nunca en puntos diferentes: $\Psi_i(x) \Psi_j(x + a)$. Una caracterización equivalente es que la lagrangiana no depende de derivadas espaciales de orden arbitrariamente alto. Concepto técnico también que no es el relevante aquí.

L4 *Causalidad del problema de Cauchy o, si se quiere, localidad einsteniana*: A veces se habla de “localidad” cuando a lo que se hace referencia realmente es a esto. Un problema de evolución es causal cuando los datos de Cauchy (condiciones iniciales) se propagan dentro de conos causales. Este concepto se solapa con el de causalidad en teoría cuántica de campos relativista. Estas formulaciones de la causalidad en términos del propagador también tienen un sentido técnico que no nos interesa aquí.

L5 *No localidad en sentido de Bell, Clauser, Shimony, etc.*, es decir, *no separabilidad*; en el sentido de efectos a distancia entre sistemas enredados (*entangled*). (Mejor aquí hablar de *no* localidad, ya que la peculiar descripción de los sistemas físicos que hace la MC es *no* local en este sentido preciso.) Esta no localidad específica de la MC se da por la concurrencia de dos aspectos diferentes:

(1) Los sistemas cuánticos están representados por campos (funciones de la posición y el tiempo), que satisfacen el principio de superposición.

(2) El espacio de estados de un sistema cuántico de varias partículas es un producto externo de los espacios de estados individuales.

Los campos clásicos, que cumplen el principio de superposición, *no presentan enredamiento*. P. ej., tanto el campo gravitatorio como el campo electromagnético clásicos, son magnitudes físicas que se obtienen por superposición de los efectos inducidos por todas las fuentes (cargas y corrientes) ambientales para contribuir a un único valor, $\mathbf{g}(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{E}(\mathbf{x}, t)$, $\mathbf{B}(\mathbf{x}, t)$, etc. Los campos clásicos, por tanto, cumplen (1), pero no cumplen (2).

Las partículas clásicas no presentan enredamiento. Es cierto que en la formulación estadística de Liouville de la mecánica clásica, los sistemas con interacción se enredan en su densidad de probabilidad en el espacio de fases: $\rho(x_1, \dots, x_n; p_1, \dots, p_n) \neq \rho_1(x_1, p_1) \cdots \rho_n(x_n, p_n)$, pero lo hacen sobre colectividades ideales llamadas colectividades de Gibbs. Los únicos observables de esta teoría son cosas como la presión, la temperatura, etc., que se definen como promedios sobre colectividades.

Por el contrario, los sistemas cuánticos de varias partículas, *se superponen, se propagan*; y además, sus estados dinámicos se construyen por *productos de estados individuales*. Esta es la combinación peculiar que constituye la *no separabilidad cuántica*, como algunos han propuesto llamarla para distinguirla de otros tipos de hipotéticas acciones a distancia. La consecuencia de esto es que será posible *copiar situaciones físicas* (estados) instantáneamente y a distancia, pero no transmitir *datos* o resultados de la misma manera.

22.6. El teorema de Bell

Recuérdese que dijimos que las supuestas variables ocultas $\{\lambda\}$ tenían dos trabajos que hacer:

(1) Valores definidos de $\{\lambda\}$ deben conducir a valores definidos de los elementos de realidad.

(2) Valores promediados de $\{\lambda\}$ para cierta distribución de probabilidad $\rho(\{\lambda\})$ deben conducir a dispersiones en las variables *consistentes con las proporcionadas por la MC*.

El teorema de Bell demuestra que (2) no es posible para cualquier observable que tenga sentido medir. Los teoremas de Gleason, de Kochen-Specker; así como el análisis de Greenberger-Horne-Zeilinger-Mermin (GHZM), algunos de los cuales discutiremos brevemente, se dirigen a demostrar la imposibilidad de (1). Son la continuación de un teorema de John Von Neumann que se dirige a demostrar la imposibilidad de la mera existencia de elementos de realidad.

El teorema de Bell tiene un lema previo muy sencillo (en matemáticas es tradicional llamar "lema" a un resultado breve que va a usarse después para una demostración más elaborada). El lema consiste en un resultado que permite traducir proposiciones sobre la partícula 1 en proposiciones sobre la partícula 2. En concreto, y como ya hemos apuntado, cuando se mide la componente de espín de una de las partículas respecto a cierta dirección de referencia y el resultado es $+1$, la componente de espín de la otra partícula respecto a la misma dirección de referencia es -1 , y viceversa. Llamaremos a este lema CHSHB-1¹:

CHSHB-1: Siempre que $\sigma^{(1)} \cdot \mathbf{n} = +1$, $\sigma^{(2)} \cdot \mathbf{n} = -1$.

Observaciones:

¹Clauser-Horne-Shimony-Holt-Bell.

(1) *Este resultado no es propiamente cuántico ni clásico; es la consecuencia de un principio de conservación que se cumple de manera exacta tanto en la mecánica clásica como en la cuántica.* La anticorrelación que se pone de manifiesto es la deducida de la conservación del momento angular: si el sistema no ha adquirido momento angular orbital debido a la desintegración, sus espines deben estar perfectamente compensados.

(2) $\sigma \cdot \mathbf{n}$ es un observable de espín según una dirección arbitraria. Denotando en lo que sigue por los índices 1, 2 y 3 los ejes espaciales x , y y z respectivamente, si $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ es el vector unitario en la dirección espacial dada, el vector $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ es un símbolo con tres componentes que son las matrices de Pauli:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Propiedades inmediatas de las matrices de Pauli son:

$$\begin{aligned} \sigma_1 \sigma_2 &= i \sigma_3 = -\sigma_2 \sigma_1 \\ \sigma_2 \sigma_3 &= i \sigma_1 = -\sigma_3 \sigma_2 \\ \sigma_3 \sigma_1 &= i \sigma_2 = -\sigma_1 \sigma_3 \\ (\sigma_1)^2 &= (\sigma_2)^2 = (\sigma_3)^2 \end{aligned} \tag{22.5}$$

Lo que se puede expresar abreviadamente como:

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} I + i \varepsilon_{ijk} \sigma_k \tag{22.6}$$

El segundo resultado, que es el teorema en sí mismo, *no tiene nada que ver con el espín.* Es una consecuencia simple del álgebra conmutativa de tres variables booleanas. Afirma que para tres proposiciones cualesquiera relativas a tres variables estadísticas que forman parte de un álgebra booleana, siempre se satisface la siguiente desigualdad: ²

$$\text{CHSHB-2: } N(A, \bar{B}) + N(B, \bar{C}) \geq N(A, \bar{C})$$

En palabras: el número de veces que se cumple A y *no* B más el número de veces que se cumple B y *no* C es mayor o igual que el número de veces que se cumple A y *no* C . Lo profundo de este teorema es que *¡el espín viola esta desigualdad en ciertos casos!*

Demostrar CHSHB-2 es fácil. Obsérvese en las figs. 1 y 2 que:

$$\begin{aligned} N(A, \bar{B}) &= N(A_0) + N(A \cap C \cap \bar{B}) \\ N(B, \bar{C}) &= N(B_0) + N(A \cap B \cap \bar{C}) \\ N(A, \bar{C}) &= N(A_0) + N(A \cap B \cap \bar{C}) \end{aligned}$$

Donde hemos llamado A_0 a la parte de A que no está ni en B ni en C , y análogamente para B_0 y C_0 (véase la fig. 2).

En la imagen puede verse claramente que:

²La versión original de la desigualdad de Bell, también llamada desigualdad de Clauser-Horne-Shimony-Holt, es $|\langle AB \rangle + \langle A\bar{B} \rangle| + |\langle \bar{A}B \rangle - \langle \bar{A}\bar{B} \rangle| \leq 2$. La versión que demostramos aquí es algo más sencilla e ilustra todos los aspectos que nos interesan.

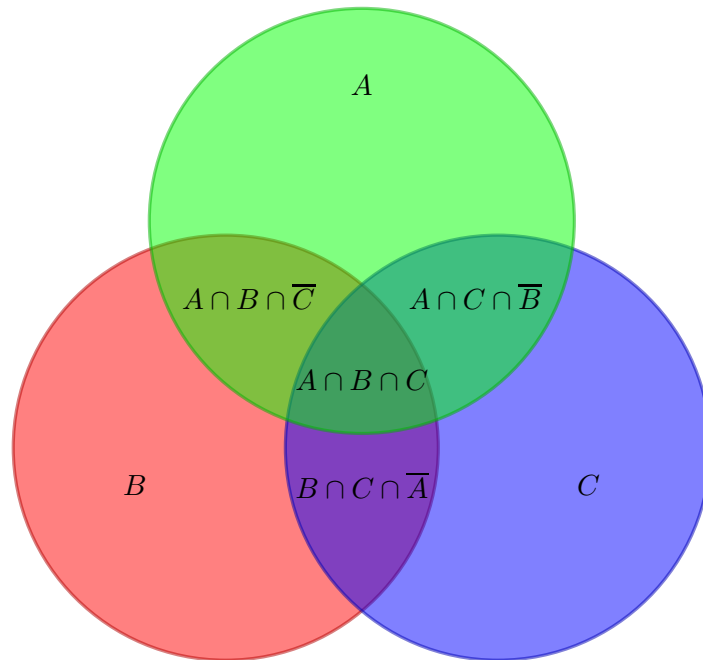


Figura 22.1: Diagrama de Venn más general para 3 proposiciones conmutantes A , B y C . El complementario de A (la negación de la proposición A) es \bar{A} , etc.

$$\begin{aligned} N(A, \bar{B}) + N(B, \bar{C}) - N(A, \bar{C}) &= \\ N(A_0) + N(A \cap C \cap \bar{B}) + N(B_0) + N(A \cap B \cap \bar{C}) - N(A_0) - N(A \cap B \cap \bar{C}) &= \\ = N(A \cap C \cap \bar{B}) + N(B_0) \end{aligned}$$

Pero $N(A \cap C \cap \bar{B}) + N(B_0)$ es obviamente mayor o igual que cero. Con lo que hemos demostrado que:

$$N(A, \bar{B}) + N(B, \bar{C}) \geq N(A, \bar{C}) \quad (22.7)$$

Pues bien, esto es lo que Bell demostró: Existen elecciones particularmente maliciosas de proposiciones A , B y C para las que *la mecánica cuántica predice lo opuesto*:

$$N(A, \bar{B}) + N(B, \bar{C}) < N(A, \bar{C}) \quad (22.8)$$

Esta es una conocida perversa elección:

Proposición A: $\sigma_z = +1$

Proposición B: $\sigma_{45^\circ} = +1$

Proposición C: $\sigma_x = +1$

Para demostrarlo hay que tener en cuenta que el número de casos favorables es proporcional a la probabilidad ($N(A, \bar{B}) \propto p(A, \bar{B})$, etc.), y que esta a su vez se obtiene mediante los cuadrados hermíticos de las amplitudes. Además, hay que tener en cuenta que la negación de la proposición A para una partícula equivale a la afirmación de la misma proposición para la otra partícula (véase OBS3 más adelante):

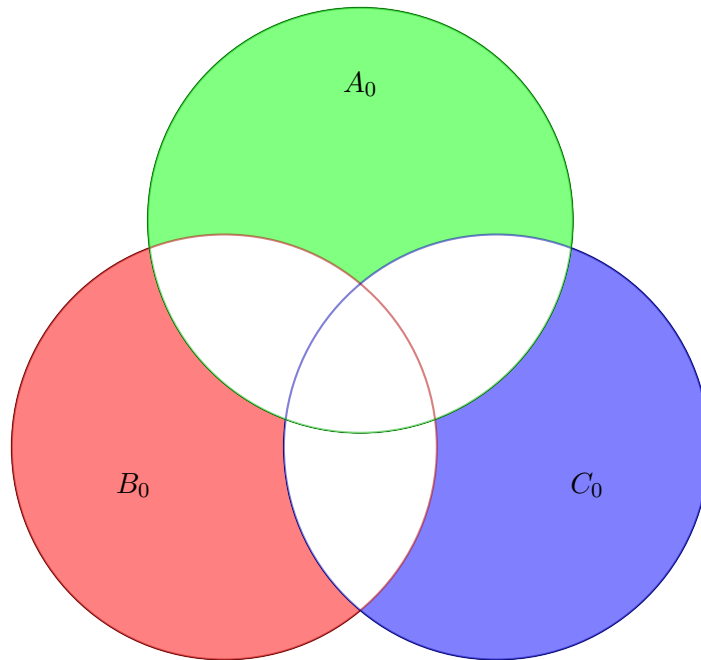


Figura 22.2: Definición de las proposiciones A_0 , B_0 y C_0 .

$$\begin{aligned}
 p_{|\psi\rangle}(A, \bar{B}) &= \langle \psi | \uparrow\uparrow_{45^\circ} \rangle \langle \uparrow\uparrow_{45^\circ} | \psi \rangle \\
 p_{|\psi\rangle}(B, \bar{C}) &= \langle \psi | \uparrow_{45^\circ} \uparrow_x \rangle \langle \uparrow_{45^\circ} \uparrow_x | \psi \rangle \\
 p_{|\psi\rangle}(A, \bar{C}) &= \langle \psi | \uparrow\uparrow_x \rangle \langle \uparrow\uparrow_x | \psi \rangle
 \end{aligned}
 \tag{22.9}$$

Como muchas veces en física, existe una o varias maneras difíciles de demostrarlo y una única manera sencilla. La escritura sugerida en (22.9) es la difícil. La manera más sencilla utiliza las siguientes observaciones:

OBS1:

$$p_{|\psi\rangle}(A, \bar{B}) = p_{|\psi\rangle}(B, \bar{C}) \tag{22.10}$$

ya que la configuración (B, \bar{C}) es idéntica a la configuración (A, \bar{B}) , pero rotada 45° en sentido positivo respecto al eje y .

OBS2:

El proyector sobre la dirección de espín $\sigma \cdot \mathbf{n}$ es $\frac{1}{2}(I + \sigma \cdot \mathbf{n})$.

Comprobación: Para $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$, $\frac{1}{2}(I + \sigma \cdot \mathbf{n}) = \frac{1}{2}(I + \sigma_3) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$. Como la dirección del eje z es en realidad arbitraria, la expresión es invariante. Pero comprobemos además que $P_{\mathbf{n}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(I + \sigma \cdot \mathbf{n})$ es en efecto un proyector: $[\frac{1}{2}(I + \sigma \cdot \mathbf{n})]^2 = \frac{1}{4}(I + \sigma \cdot \mathbf{n})(I + \sigma \cdot \mathbf{n}) = \frac{1}{4}(I + 2\sigma \cdot \mathbf{n} + (\sigma \cdot \mathbf{n})^2)$. Pero como de (22.5): $(\sigma \cdot \mathbf{n})^2 = I$, se deduce inmediatamente que $P_{\mathbf{n}}^2 = P_{\mathbf{n}}$.

OBS3: La negación de A para la partícula 1 equivale a la afirmación de A para la 2 (análogamente para B y C).

Necesitaremos también la forma del operador de espín "a 45° ", refiriéndonos a la dirección que está a 45° entre el eje x y el eje z :

$$\sigma_{45^\circ} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}_{45^\circ} = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{\sigma_1 + \sigma_3}{\sqrt{2}}$$

Todo esto permite escribir:

$$\begin{aligned} p_{|\psi\rangle}(A, \bar{B}) &= \left\langle \psi \left| \frac{1}{2} (I + \sigma_3) \otimes \frac{1}{2} \left(I + \frac{\sigma_1 + \sigma_3}{\sqrt{2}} \right) \right| \psi \right\rangle = \\ &= \frac{1}{8} (\langle \uparrow \downarrow | - \langle \downarrow \uparrow |) (I + \sigma_3) \otimes \left(I + \frac{\sigma_1 + \sigma_3}{\sqrt{2}} \right) (|\uparrow \downarrow\rangle - |\downarrow \uparrow\rangle) = \\ &= \frac{1}{8} (\langle \uparrow \downarrow | - \langle \downarrow \uparrow |) \left(\frac{1}{\sqrt{2}} |\uparrow \uparrow\rangle + \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \right) |\uparrow \downarrow\rangle \right) = \frac{1}{8} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \langle \uparrow \downarrow | \uparrow \downarrow \rangle \\ &= \frac{1}{16} (2 - \sqrt{2}) \end{aligned}$$

Recordando (22.10) $p_{|\psi\rangle}(A, \bar{B}) + p_{|\psi\rangle}(B, \bar{C}) = 2p_{|\psi\rangle}(A, \bar{B}) = \frac{1}{8} (2 - \sqrt{2})$

Por otra parte:

$$\begin{aligned} p_{|\psi\rangle}(A, \bar{C}) &= \langle \psi | \uparrow \downarrow_x \rangle \langle \uparrow \downarrow_x | \psi \rangle = \frac{1}{8} (\langle \uparrow \downarrow | - \langle \downarrow \uparrow |) (I + \sigma_3) \otimes (I + \sigma_2) (|\uparrow \downarrow\rangle - |\downarrow \uparrow\rangle) = \\ &= \frac{1}{8} (\langle \uparrow \downarrow | - \langle \downarrow \uparrow |) \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} (|\uparrow \downarrow\rangle - |\downarrow \uparrow\rangle) = \\ &= \frac{1}{4} (\langle \uparrow \downarrow | - \langle \downarrow \uparrow |) I \otimes \begin{pmatrix} 1 & -i \\ i & 1 \end{pmatrix} |\uparrow \downarrow\rangle = \\ &= \frac{1}{4} (\langle \uparrow \downarrow | - \langle \downarrow \uparrow |) (-i |\uparrow \uparrow\rangle + |\uparrow \downarrow\rangle) = \\ &= \frac{1}{4} \end{aligned}$$

Pero definiendo:

$$\delta \stackrel{\text{def}}{=} p_{|\psi\rangle}(A, \bar{B}) + p_{|\psi\rangle}(B, \bar{C}) - p_{|\psi\rangle}(A, \bar{C})$$

tenemos:

$$\delta = \frac{1}{8} (2 - \sqrt{2}) - \frac{1}{4} = \frac{1}{4} - \frac{1}{4} - \frac{\sqrt{2}}{8} = -\frac{\sqrt{2}}{8} < 0$$

En contradicción con (22.7).

22.7. El teorema de Gleason

Si P_r es un proyector que proyecta sobre un cierto $|r\rangle$ (podemos pensar en P_r como $|r\rangle \langle r|$ o como una cierta expansión $\sum_\alpha |r, \alpha\rangle \langle r, \alpha|$) y ρ es un estado mezcla arbitrario (podemos pensar en ρ como $|\psi\rangle \langle \psi|$ o una mezcla estadística de varios $|\psi_i\rangle \langle \psi_i|$, es decir $\sum_i p_i |\psi_i\rangle \langle \psi_i|$,

con $0 \leq p_i \leq 1$, $\sum_i p_i = 1$), la única función posible que define la probabilidad de obtener el resultado r es esencialmente:

$$P(r) = \text{Tr}(P_r \rho) \quad (22.11)$$

Como la función $\text{Tr}(P_r \rho)$ es continua sobre la esfera unidad como función de ρ , es imposible que adopte los valores 0 y 1 sobre la misma. Con la *esfera unidad* aquí nos referimos a una esfera de estados de espín, es decir, a todos los $|\psi\rangle$ tales que $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ en (22.11), y donde $\sigma \cdot \mathbf{n} |\psi\rangle = \pm |\psi\rangle$, y \mathbf{n} es una dirección arbitraria sobre la 2-esfera espacial de radio 1. *Una función continua sobre este conjunto no puede tomar los valores 0 y 1 sin tomar todos los valores intermedios posibles.*

La consecuencia de esto es que es imposible resolver todas las proposiciones de espín posibles con unas variables deterministas adicionales que fijen sus valores. Podríamos decir que este es un teorema de tipo ontológico: los valores definidos del espín no pueden ser la imagen matemática de un cierto conjunto matemático en una correspondencia punto a punto.

22.8. El teorema de Kochen-Specker

El teorema de Kochen-Specker es la elaboración de una cuestión planteada primero por Von Neumann y analizada más tarde por Bell. La idea de la que parte esta línea de investigación es un teorema de Von Neumann. El argumento de Von Neumann establece que, dado que si A y B son observables

$$C = \alpha A + \beta B \quad (22.12)$$

también es un observable; y dado que los promedios mecanocuánticos deben satisfacer:

$$\langle C \rangle = \alpha \langle A \rangle + \beta \langle B \rangle \quad (22.13)$$

si queremos que A , B , C estén *definidos* (definitud de valores o *value definiteness* en la literatura), debería cumplirse:

$$v(C) = \alpha v(A) + \beta v(B) \quad (22.14)$$

para una cierta función v que asigna un valor definido a cada uno de estos observables. Von Neumann afirma que esta construcción es imposible en general para conjuntos de observables de espín en la MC. Bell dio el ejemplo $A = \sigma_x$, $B = \sigma_y$, $C = \frac{1}{\sqrt{2}}(\sigma_x + \sigma_y)$ como una excepción posible, ya que $\pm 1 \neq \frac{1}{\sqrt{2}}(\pm 1 \pm 1)$ para ninguna elección de estas variables. Pero al mismo tiempo Bell también observó que la premisa (22.14) propuesta por Von Neumann era muy severa. Debería exigirse que esto fuera cierto, no en general, sino *únicamente para observables compatibles*.

Pues bien, el teorema de Kochen-Specker afirma que ni siquiera esta asignación es posible si a la vez admitimos la validez de la MC y para ciertas elecciones *finitas* y *compatibles* de proposiciones de espín. La única escapatoria es que la función v , en lugar de ser una asignación universal, sea una asignación dependiente de aspectos adicionales (el contexto). Es decir, que la definitud sea contextual, en lugar de una propiedad intrínseca de los sistemas físicos.

Así como el teorema de Bell se interpreta como la demostración de que no es posible la coexistencia del *realismo local* con la MC, el teorema de Kochen-Specker se interpreta como

la demostración de que no es posible la coexistencia del *realismo no contextual* o *intrínseco*, si se quiere, con la MC. En otras palabras: Hay ciertos observables en el espacio interno del espín que, aun siendo compatibles, no pueden tener definitud simultánea; no pueden por tanto considerarse propiedades intrínsecas del sistema.

22.9. GHZ

Este argumento se añadió a la cuestión de las variables ocultas en 1990 por Daniel M. Greenberger, Michael A. Horne y Anton Zeilinger, posteriormente simplificado por los mismos autores más Abner Shimony tras una sugerencia de David Mermin, todo en el mismo año. Aquí presentamos la idea en una forma que sigue estrechamente la exposición que dio Sidney Coleman en su famosa conferencia *Quantum Mechanics in Your Face*. Es la exposición más sencilla que yo conozco. Como dice el mismo Coleman: “Si alguien te despertara a altas horas de la madrugada y pusiera una pistola contra tu cabeza, podrías reproducir el argumento inmediatamente”.

Se trata de un sistema compuesto por tres partículas de espín $\frac{1}{2}$ que se hallan en un estado inicial:

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle) \quad (22.15)$$

Y se considera el observable:

$$O \stackrel{\text{def}}{=} \sigma_x^{(1)} \otimes \sigma_x^{(2)} \otimes \sigma_x^{(3)}$$

Es claro que los observables “parciales” $\sigma_x \otimes I \otimes I$, $I \otimes \sigma_x \otimes I$ y $I \otimes I \otimes \sigma_x$ pueden adoptar cualesquiera de sus valores espectrales $(-1, +1)$ en mediciones independientes efectuadas en respectivas regiones causalmente separadas. Sin embargo, el observable conjunto O adopta siempre el valor -1 :

$$\begin{aligned} \langle \psi | O | \psi \rangle &= \frac{1}{2} (\langle \uparrow\uparrow\uparrow | - \langle \downarrow\downarrow\downarrow |) O (|\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\downarrow\rangle) = \\ &= \frac{1}{2} \langle \uparrow\uparrow\uparrow | O | \uparrow\uparrow\uparrow \rangle - \frac{1}{2} \langle \uparrow\uparrow\uparrow | O | \downarrow\downarrow\downarrow \rangle - \frac{1}{2} \langle \downarrow\downarrow\downarrow | O | \uparrow\uparrow\uparrow \rangle + \frac{1}{2} \langle \downarrow\downarrow\downarrow | O | \downarrow\downarrow\downarrow \rangle = \\ &\quad \frac{1}{2} \langle \uparrow\uparrow\uparrow | \sigma_x \otimes \sigma_x \otimes \sigma_x | \uparrow\uparrow\uparrow \rangle - \frac{1}{2} \langle \uparrow\uparrow\uparrow | \sigma_x \otimes \sigma_x \otimes \sigma_x | \downarrow\downarrow\downarrow \rangle - \\ &\quad - \frac{1}{2} \langle \downarrow\downarrow\downarrow | \sigma_x \otimes \sigma_x \otimes \sigma_x | \uparrow\uparrow\uparrow \rangle + \frac{1}{2} \langle \downarrow\downarrow\downarrow | \sigma_x \otimes \sigma_x \otimes \sigma_x | \downarrow\downarrow\downarrow \rangle = \\ &= \frac{1}{2} \langle \uparrow | \sigma_x | \uparrow \rangle \langle \uparrow | \sigma_x | \uparrow \rangle \langle \uparrow | \sigma_x | \uparrow \rangle - \frac{1}{2} \langle \uparrow | \sigma_x | \downarrow \rangle \langle \uparrow | \sigma_x | \downarrow \rangle \langle \uparrow | \sigma_x | \downarrow \rangle - \\ &\quad - \frac{1}{2} \langle \downarrow | \sigma_x | \uparrow \rangle \langle \downarrow | \sigma_x | \uparrow \rangle \langle \downarrow | \sigma_x | \uparrow \rangle + \frac{1}{2} \langle \downarrow | \sigma_x | \downarrow \rangle \langle \downarrow | \sigma_x | \downarrow \rangle \langle \downarrow | \sigma_x | \downarrow \rangle = \\ &\quad \frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right]^3 - \frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right]^3 - \\ &\quad - \frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right]^3 + \frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right]^3 = \\ &\quad = -\frac{1}{2} - \frac{1}{2} = -1 \end{aligned}$$

Pero además, la dispersión es nula (es decir, no solo el *valor promedio* de O es -1 , sino lo hace con dispersión nula, o en otras palabras, la medición de O *siempre* da -1 para estados preparados en GHZ):

$$(\Delta_{|\psi\rangle} O)^2 = \langle O^2 \rangle_{|\psi\rangle} - \langle O \rangle_{|\psi\rangle}^2 = 1 - 1 = 0$$

ya que $O^2 = (\sigma_x \otimes \sigma_x \otimes \sigma_x)^2 = \sigma_x^2 \otimes \sigma_x^2 \otimes \sigma_x^2 = I$.

Las partículas presentan, por tanto, correlaciones exactas a tres. Dicho de otra manera: si una de ellas tiene $\sigma_x = +1$, y la segunda tiene $\sigma_x = +1$, la tercera no puede dar otro resultado que $\sigma_x = -1$ (y todas las demás variaciones obvias). No se puede obtener *cualquiera* de entre las $2^3 = 8$ variaciones independientes de los resultados básicos $\{\pm 1, \pm 1, \pm 1\}$ como posibles resultados del experimento, sino únicamente una de entre $2 \times 2 \times 1 = 4$ posibilidades. Esquemáticamente:

$$\begin{array}{l} \uparrow (1) \left\{ \begin{array}{l} \uparrow (2) \Rightarrow \downarrow (3) \\ \downarrow (2) \Rightarrow \uparrow (3) \end{array} \right. \\ \downarrow (1) \left\{ \begin{array}{l} \uparrow (2) \Rightarrow \uparrow (3) \\ \downarrow (2) \Rightarrow \downarrow (3) \end{array} \right. \end{array}$$

La moraleja de GHZ es que para que las partículas presenten estas correlaciones exactas a distancia, cualquier sistema de variables ocultas que lo explique debe violar la causalidad. Esa es la reivindicación de los que apelan al argumento GHZ, en cualquier caso.

Capítulo 23

INFORMACIÓN CUÁNTICA

23.1. Introducción

Antes de pasar al tema de computación cuántica, tan de actualidad en estos días (2011), debemos primero pararnos a analizar en qué consiste la información cuántica, la otra gran rama dentro de este contexto. En efecto, la computación estará relacionada con **el procesamiento y el cálculo** de la información, la cual a su vez está relacionada con **la comunicación y el almacenaje**.

Debemos hacer antes una reflexión epistemológica. Hasta ahora la teoría de la información era tratada generalmente al margen de la Física, en facultades e ingenierías informáticas. Sin embargo la información se transmite físicamente (ondas, corrientes...) y se guarda en soportes físicos (ya sea un cerebro, un papel o un disco duro). De esta interconexión tan estrecha ya empezó a darse cuenta el mismo Feynman en los años 80, aunque fue en los 90, después de su triste pérdida, cuando estalló el boom de la información cuántica. La información está sometida, pues, a las leyes de la Física y puede afirmarse con Landauer (1991) que la información **tiene** naturaleza física.

Si se cumple la función experimental de Gordon Moore, los dispositivos electrónicos básicos de los microchips llegarán al límite atómico-molecular en menos de 20 años, y empezarán a ese nivel a notarse los efectos cuánticos. Las ventajas que ofrecerían los ordenadores basados en la lógica del bit cuántico (**qubit**) son incuestionables. Así como el número de estados codificables con N bits es 2^N , el número de estados con N qubits será infinito, ya que en principio los valores posibles estarán relacionados con las distintas combinaciones lineales de una base (**superposición lineal**). Con unos cientos de qubits se podría acumular tal información que con bits no cabría en todo el Universo. Además gracias a este principio de superposición, cuánticamente se pueden hacer multitud de operaciones al tiempo (**paralelismo masivo**). Por contra, aunque la información guardada en bits es robusta, la información guardada en qubits es sumamente frágil (**decoherencia**) y hay que tener extremo cuidado a la hora de medir. Asimismo, aunque la información guardada en bits se puede copiar cuantas veces se quiera, se ha demostrado **la imposibilidad de clonación exacta de estados cuánticos no ortogonales**. Pero esta desventaja también ofrece su lado bueno, ya que teóricamente nos ofrece la posibilidad de algoritmos de encriptación absolutamente infalibles (**entrelazamiento**), al contrario de lo que ocurre con los bits, en los que todo algoritmo es susceptible de ser crac-

Sistema clásico:

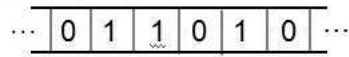


Figura 23.1: Multibit

keado (**criptografía**). De hecho en la actualidad (2011) la criptografía cuántica ha alcanzado un estatus comercial, aunque sigue teniendo muchas limitaciones de distancia por el hecho de degradación de la información y que no se puedan construir “repetidores” clásicos por el teorema de no-clonación.

23.2. El bit

La unidad para medir la información de un sistema clásico, introducida por Claude Elwood Shannon, es el *bit* (también llamado *cbit*, por bit clásico). El nombre de bit, por *binary digit*, así como el de *software*, se debe a John Wilder Tukey. Así un sistema como la tirada al azar de una moneda ideal contendría un bit de información, y se representaría por dos valores **0** ó **1**, según saliera una cara u otra (el caso en el que cayera de canto es tan improbable que ni siquiera se contemplaría).

En el caso de un sistema más complejo, como por ejemplo varias monedas distintas, tendríamos un sistema multibit, compuesto por una serie de resultados consistentes en ceros y unos (figura 23.1).

El número de estados, configuraciones o resultados posibles para n bits será por tanto:

$$N_s = 2^n \quad (23.1)$$

o, a la inversa, podemos definir el número de bits de un sistema como la cantidad:

$$\boxed{n \equiv \log_2 N_s} \quad (23.2)$$

con lo que obtendremos el número de bits para cualquier sistema. Por ejemplo, en el caso de la tirada de un dado, que tiene $N_s = 6$ estados, el número de bits sería aproximadamente $2'6$, es decir, no tiene por qué ser entero. Y así se puede generalizar para cualquier magnitud física, por ejemplo la temperatura en un recinto dividido en pequeños cubos de temperatura constante podría ser expresada en bits asociando a cada cubo su valor de la temperatura en binario.

De esta forma, si conocemos cómo evolucionan los bits en cada sistema, conoceremos cómo funciona su física.

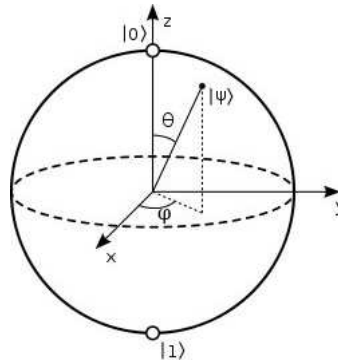


Figura 23.2: Esfera de Bloch

Sistema cuántico:

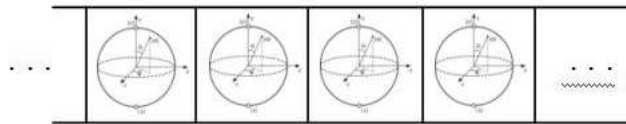


Figura 23.3: Multiqubit

23.3. El qubit

La unidad de información cuántica es el *qubit* (o qbit, por *quantum bit*), término acuñado por Benjamin Schumacher en 1995. Se trata de la unidad de información que posee un sistema cuántico cuya base de Hamel es 2, es decir, con dos estados base o configuraciones relevantes. El ejemplo típico de esto es el spin del electrón, aunque también se suele usar la dirección de polarización de un fotón o los niveles de excitación de un átomo.

23.3.1. Esfera de Bloch

El espacio de Hilbert de un qubit es isomorfo a \mathbb{C}^2 . Si denotamos por $|0\rangle$ y $|1\rangle$ a los estados base, vemos que el qubit puede estar en los infinitos estados de la forma:

$$|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \text{ con } \alpha \text{ y } \beta \in \mathbb{C} \quad (23.3)$$

que son estados puros o superposiciones lineales coherentes de los estados base. En principio por tanto tendría 4 grados de libertad reales, pero la irrelevancia de la fase global y la condición de normalización hace que podamos poner (23.3) en la forma:

$$|\Psi\rangle = \left(\cos \frac{\theta}{2}\right) |0\rangle + e^{i\phi} \left(\sin \frac{\theta}{2}\right) |1\rangle \quad (23.4)$$

en donde θ y ϕ son los ángulos esféricos que representan un punto en la llamada *esfera de Bloch* (figura 23.2). Y por tanto el espacio de Hilbert de esos estados puros se asociará con un punto en esa esfera y un sistema multiqubit será algo como lo expresado en la figura 23.3.

Capítulo 24

COMPUTACIÓN CUÁNTICA

24.1. Introducción

Aunque las primeras máquinas mecánicas de calcular se deben a Schickard, Pascal y Leibnitz en el siglo XVII, no fue hasta poco después de la primera revolución industrial en el siglo XIX cuando se produjo un salto cualitativo y el matemático británico **Charles Babbage**, inspirado por el telar de Joseph-Marie Jacquard, puso a punto, al menos en teoría, la primera calculadora automática digital de uso general, la *Máquina Analítica*. Era el año 1834.

Los mejores estudios sobre la Máquina Analítica los dio **Ada Augusta**, condesa de Lovelace, “la única hija de la casa y el corazón” del poeta Byron. Hoy en día es considerada la primera programadora de la historia y el lenguaje de programación **ADA**, relacionado con la seguridad aeronáutica, debe a ella su nombre.

Aunque hubo después más autores de trabajos interesantes sobre el automatismo, entre los que figura en buena posición el ingeniero cántabro **Leonardo Torres Quevedo**, el trabajo de Babbage fue olvidado hasta los años cuarenta del siglo XX, cuando otra generación de científicos e ingenieros, luchando de nuevo con el problema de diseñar calculadoras digitales de gran escala, llegaron a darse cuenta de que Babbage, con todos sus engranajes y bielas se les había anticipado.

El principal artífice del nuevo impulso fue el brillante matemático inglés **Alan Mathison Turing**, creando una abstracción mental de un ordenador tan profunda que entraña los principios generales de cualquier calculador que haya sido construido jamás, la *máquina de Turing*.

La primera materialización electrónica de esta máquina fue el computador *ENIAC*, “Integrador y calculador numérico electrónico”, desarrollado por la Universidad de Pennsylvania en 1946. Una máquina de 30 toneladas con un rendimiento de 200000 **flops** (operaciones de coma flotante por segundo). Hoy en día ese rendimiento lo alcanza cualquier calculadora de bolsillo. De hecho, los superordenadores actuales alcanzan rendimientos de decenas de petaflops, es decir, decenas de miles de billones de operaciones por segundo (concretamente al escribir estas líneas el record lo tenía el ordenador *CRAY XK6* o *Interlagos* de la empresa americana *Cray Inc.*, con 50 Pflops de rendimiento).

Hubo que esperar a los años ochenta para que surgiera la generalización de la máquina de Turing al caso cuántico (**Deutsch, Benioff**) como máquinas reversibles y a la primera propuesta de ordenador cuántico (**Feynman**). Una década más tarde surgieron los primeros algoritmos de cálculo eminentemente cuánticos, como el de **Shor** (1994) o el de **Grover** (1996). También en esta época empezaron a darse los primeros experimentos para implementar qubits y puertas lógicas, como los iones atrapados de **Cirac y Zoller** en 1995 o los experimentos de resonancia magnética nuclear de **Gershenfeld y Chuang** en 1997.

En la actualidad se manejan sistemas cuánticos cada vez más ambiciosos, la empresa IBM junto con la Universidad de Stanford ha implementado el algoritmo de Shor en el primer computador cuántico de 7 qbits, la Universidad de Innsbruck creó el primer qbyte con trampas de iones y se están intentando desarrollar los primeros buses y procesadores cuánticos, aunque parece que aún queda bastante para nuestro ansiado computador (2011).

24.2. Puertas lógicas

Las máquinas de Turing son equivalentes a circuitos lógicos en donde se le realizan procedimientos no triviales a la información. Estos procedimientos se denominan *puertas lógicas*. Normalmente estas puertas poseen en electrónica una representación normalizada, como se muestra en la figura 24.1.

24.2.1. Puertas unarias

El ejemplo más básico de puerta es la unaria (o monaria) que representa la negación, **NOT**, que pueden hacer por ejemplo los transistores sobre corrientes eléctricas, y cuya tabla de verdad y representación esquemática es como en la figura 24.2, y cuyo significado es obvio, si entra corriente no sale y si no entra sale.

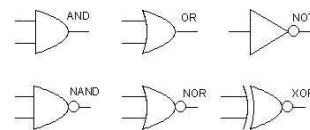


Figura 24.1: Puertas lógicas

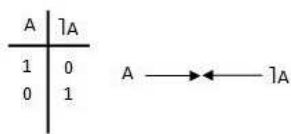


Figura 24.2: NOT

Esta primera puerta lógica se puede usar tanto clásica como cuánticamente, ya que es **reversible**, es decir, siempre se puede recuperar el estado inicial conocido su producto. Por el principio de Landauer, esta puerta no disiparía calor. En el formalismo cuántico se suele representar esta puerta como:

$$\begin{array}{c}
 NOT \\
 A \text{ --- } \oplus \text{ --- } \neg A
 \end{array}$$

Como hemos dicho, las puertas lógicas clásicas se implementan con elementos no lineales como los transistores. En el caso cuántico, las puertas lógicas deben representarse mediante operadores unitarios **U** que se consiguen en la práctica con interacciones reversibles entre los elementos cuánticos. Recuérdese que en el caso cuántico no sólo se actúa sobre dos posibles

estados del bit, sino sobre los infinitos estados del qubit.

Existen 4 puertas unarias, de las cuales sólo dos son reversibles, la identidad y la puerta **NOT** estudiada. Las otras dos serían las asignaciones $A \mapsto 1$ y $A \mapsto 0$, que al ser irreversibles no serían implementables cuánticamente, a no ser que se añada la información del qubit entrante en el producto.

El operador unitario correspondiente a **NOT** en la base estándar será:

$$U_{NOT} = \sigma_1 = X \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \begin{array}{l} |0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ |1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \end{array} \quad (24.1)$$

Veamos lo que ocurre para un qubit de información entrante $|\Psi_s\rangle$, que en general tendrá la forma:

$$|\Psi_s\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle \quad (24.2)$$

observando que, básicamente, se trata de una reflexión sobre la identidad, en la que el caso clásico (el cambio de 0's y 1's) es sólo un caso particular:

$$|\Psi_t\rangle = U_{NOT}|\Psi_s\rangle = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix} = b|0\rangle + a|1\rangle$$

Se puede hacer una interpretación en el contexto de los operadores fermiónicos en donde la base elegida correspondería a los estados cero y uno de una partícula (o fundamental y excitado). De esta forma el operador NOT sería la suma de los operadores de destrucción y creación:

$$\left. \begin{array}{l} a = \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ a^+ = \sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{array} \right\} \Rightarrow U_{NOT} = a + a^+$$

La condición de reversibilidad se puede comprobar

$$(U_{NOT})^2 = 1, \quad U_{NOT} = U_{NOT}^{-1} = U_{NOT}^+$$

Todas las puertas lógicas clásicas son susceptibles de ser implementadas también cuánticamente. La extensión de las puertas lógicas a la teoría cuántica se debe a David Deutsch (1985).

Cuánticamente cualquier matriz unitaria define una puerta cuántica válida, la mayoría sin contrapartida cuántica. Como ejemplo de puertas lógicas unarias cuánticas estaría el resto de las matrices de Pauli:

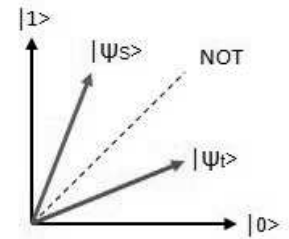


Figura 24.3: Reflexión NOT

$$Y \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad Z \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

en donde la actuación de Z es fácil de interpretar, ya que deja el estado fundamental inalterado y cambia el signo del excitado.

Otra puerta cuántica relevante es la de **Hadamard** (en honor al matemático francés **Jacques Hadamard**):

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + Z)$$

Esta puerta mezcla los estados equiprobablemente poniéndolos como suma y diferencia:

$$H|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)$$

$$H|1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$$

Recordando que en la esfera de Bloch se puede poner el estado como:

$$|\Psi\rangle = \cos(\theta/2)|0\rangle + e^{i\phi}\sin(\theta/2)|1\rangle$$

en donde θ es el radio entre $|0\rangle$ y $|1\rangle$ y ϕ una fase cuántica. En la esfera de Bloch por tanto, si se parte del estado:

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \quad (\theta = \pi/2, \phi = 0)$$

y se aplica el operador de Hadamard, se llega al estado fundamental:

$$H|\Psi\rangle = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = |0\rangle \quad (\theta = 0)$$

es decir, se produce una rotación sobre el eje y de 90° seguido de una de 180° sobre x (figura 24.4). El operador de Hadamard es una de las puertas cuánticas de mayor utilidad ya que realiza lo que se conoce como **paralelismo masivo**, ya que un estado de n qubits lo pone en superposición de 2^n estados. Por ejemplo, para $n = 2$:

$$n = 2$$

$$\begin{aligned} H \otimes H|00\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) = \\ &= \frac{1}{2}(|00\rangle + |10\rangle + |01\rangle + |11\rangle) = \\ &= \frac{1}{2}(|0\rangle + |1\rangle + |2\rangle + |3\rangle) \end{aligned}$$

en donde se ha utilizado la conversión a decimal ya explicada en el capítulo anterior. En general, cuando el operador de Hadamard se aplica n veces, se habla del operador de **Walsh-Hadamard**, en honor del matemático americano **Joseph Leonard Walsh**:

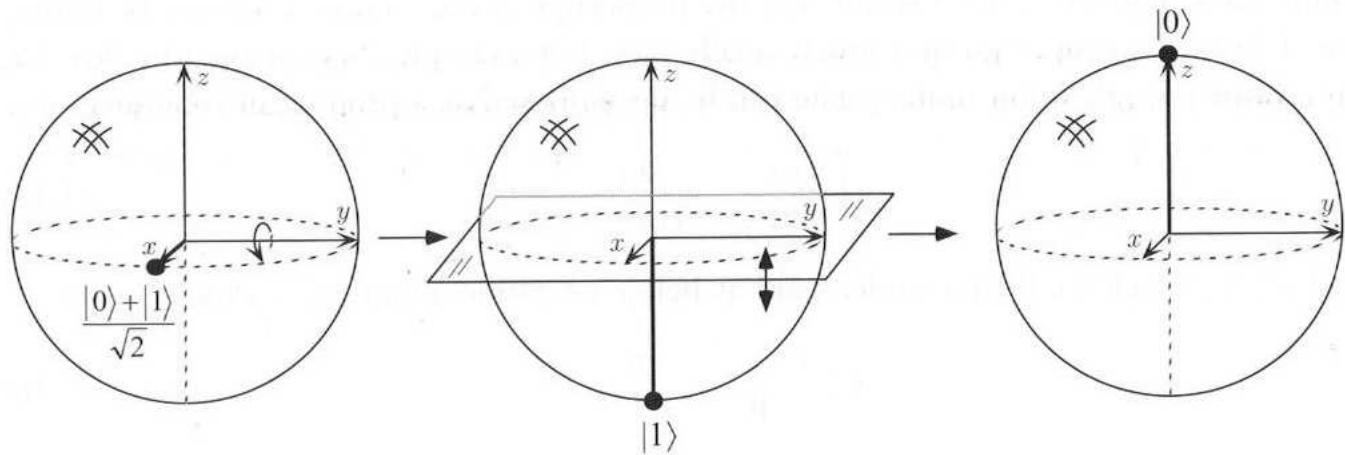


Figura 24.4: Puerta de Hadamard en la esfera de Bloch, actuando sobre $(|0\rangle + |1\rangle)/\sqrt{2}$

$$H \otimes H \otimes \dots \otimes H |00\dots 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle \quad (24.3)$$

Otra de las puertas monarias eminentemente cuánticas sería la raíz de *NOT*:

$$U_{\sqrt{NOT}} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\pi/4} (1 - i\sigma_1) = \begin{pmatrix} \frac{1+i}{2} & \frac{1-i}{2} \\ \frac{1-i}{2} & \frac{1+i}{2} \end{pmatrix}$$

Y también está la puerta de corrimiento de fase:

$$R_z(\delta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{i\delta} \end{pmatrix}$$

esta puerta genera una rotación en dirección contraria a la aguja del reloj respecto al eje z de la esfera de Bloch. Una rotación en general se puede poner, con ayuda de las matrices de Pauli (usando su nilpotencia-2), en la forma:

$$R_{\hat{n}}(\theta) \equiv e^{-i\theta\hat{n}\cdot\vec{\sigma}/2} = \cos(\theta/2)\mathbb{1} - i\sin(\theta/2)\hat{n}\cdot\vec{\sigma} = \cos(\theta/2)\mathbb{1} - i\sin(\theta/2)(n_x X + n_y Y + n_z Z)$$

En realidad se puede dar una expresión para las infinitas puertas cuánticas monarias, por ejemplo la correspondencia a la descomposición de las matrices 2×2 :

$$U = e^{i\delta} R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma)$$

en donde δ es la fase (mod π) del factor de $U(2)$ y α, β y γ son los ángulos de Euler que parametrizan el factor de $SU(2)$:

$$R_z(\alpha) = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}; \quad R_y(\beta) = \begin{pmatrix} \cos(\beta/2) & -\sin(\beta/2) \\ \sin(\beta/2) & \cos(\beta/2) \end{pmatrix}$$

A partir de esto se puede obtener otra descomposición interesante:

$$U = e^{i\alpha}AXBXC/ABC = I \quad X = \sigma_1$$

de forma que

$$A = R_z(\beta)R_y\left(\frac{\gamma}{2}\right); \quad B = R_y\left(-\frac{\gamma}{2}\right)R_z\left(-\frac{\delta + \beta}{2}\right); \quad C = R_z\left(\frac{\delta - \beta}{2}\right)$$

24.2.2. Puertas múltiples

Vamos a estudiar ahora las puertas de múltiples qubits, las más sencillas de las cuales son las puertas binarias, aunque su implementación en el laboratorio es extremadamente difícil, pues hay que poner en interacción controlada dos qubits espacialmente separados. **Cirac** y **Zoller** lo hicieron con iones fríos en una trampa lineal.

En general hay 256 puertas binarias. De hecho el número de puertas cuánticas que hay $m \times n$ es

$$\text{Puertas } m \times n \text{ (estados } 2^m \times 2^n) = 2^{n \times 2^m}$$

ya que es el número de funciones del tipo

$$f : \{0, 1\}^m \longrightarrow \{0, 1\}^n$$

Sin embargo puertas reversibles solo hay

$$\text{Puertas reversibles} = 2^m!$$

que es el número de funciones del tipo anterior que además son invertibles. Por tanto habrá 24 puertas binarias reversibles. En general las puertas son implementadas por matrices $2^m \times 2^m$. En el caso binario la base computacional es:

$$|0\rangle \otimes |0\rangle \equiv |00\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |0\rangle$$

$$|0\rangle \otimes |1\rangle \equiv |01\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = |1\rangle$$

$$|1\rangle \otimes |0\rangle \equiv |10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |2\rangle$$

$$|1\rangle \otimes |1\rangle \equiv |11\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |3\rangle$$

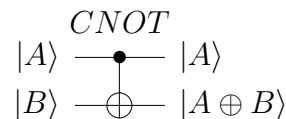
De las puertas binarias podemos destacar la puerta NOT-controlado, *CNOT*, en donde se distingue el primer qubit como de control y el segundo como blanco. Si el primer qubit es 0 el segundo se deja intacto, y si es 1 se cambia:

$$\left. \begin{array}{l} |00\rangle \longrightarrow |00\rangle \\ |01\rangle \longrightarrow |01\rangle \\ |10\rangle \longrightarrow |11\rangle \\ |11\rangle \longrightarrow |10\rangle \end{array} \right\} \text{Puerta } CNOT$$

Otra forma de ver esta puerta es relacionándola con la puerta clásica del OR exclusivo, *XOR*, ya que es precisamente el segundo qubit el que nos da los valores de *XOR*, que coinciden con la suma módulo 2 que representamos con \oplus :

$$(A, B) \longrightarrow (A, A \oplus B)$$

o mediante el gráfico



La expresión matricial de *XOR* es fácil de construir sabiendo que cada una de las columnas debe transformar $|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle$ y $|11\rangle$, de modo que

$$U_{CNOT} = U_{XOR} = |0\rangle\langle 0| \otimes \mathbb{1} + |1\rangle\langle 1| \otimes U_{NOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

La puerta *CNOT* se puede implementar con una molécula de cloroformo $CHCl_3$. Su estado corresponde a los estados de espín de los núcleos de carbono e hidrógeno, que invierten su sentido mediante pulsos de ondas de radio. Siempre es posible asegurarse de que el núcleo de hidrógeno invierte su espín sólo cuando el espín del núcleo de carbono apunta hacia arriba (el núcleo de carbono sería el control y el de hidrógeno la puerta *XOR*).

Nótese que la puerta *XOR* clásica sería irreversible (no invertible), dado que su tabla de verdad no nos permite, conociendo el resultado, deducir los estados iniciales. Se produce pérdida de información. En cambio como puerta cuántica unitaria siempre será invertible.

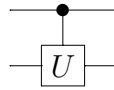
La puerta *CNOT* es de gran importancia, ya que como veremos cualquier puerta de múltiples qubits puede ser construida mediante la puerta *CNOT* y puertas cuánticas monarias.

Además, para implementar proposiciones del tipo "**Si A es verdadero, entonces haz B**", son útiles las llamadas operaciones controladas, basadas en el mismo principio que *CNOT*. Se

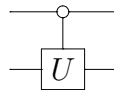
trata de puertas binarias U -controladas, es decir, que al qubit blanco se le aplica U dependiendo del valor del qubit de control. Esto se puede denotar como

$$(A, B) \longrightarrow (A, AU^A B)$$

o bien gráficamente



y en el caso en que el operador se tenga que hacer cuando el primer bit está a cero se utiliza el esquema:



Por ejemplo otra puerta binaria muy conocida es la del corrimiento de fase controlado, *CPHASE*:

$$CPHASE(\delta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{i\delta} \end{pmatrix}$$

cuando $\delta = \pi$ se tiene la puerta *CMINUS*.

En los años 80 **Tommaso Toffoli** y **Edward Fredkin** vieron que hacía falta un mínimo de tres qubits para cualquier computación clásica. La extensión a tres qubits de la puerta *CNOT* es la llamada **puerta de Toffoli** o *CCNOT*. En este caso hay dos bits de control que sólo actúan si están a 1.

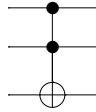
$$(A, B, C) \longrightarrow (A, B, AB \oplus C)$$

es fácil ver que al hacerla actuar dos veces se consigue la identidad, luego es también una puerta reversible (su inversa es ella misma). La expresión matricial en este caso sería:

$$U_T = |0\rangle\langle 0| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} + |1\rangle\langle 1| \otimes U_{CNOT} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

y gráficamente

Toffoli



Esta puerta se suele usar para simular puertas clásicas irreversibles y demostrar que cualquier ordenador cuántico puede hacer lo mismo que uno clásico. Entre su singularidad está el que en sus tripas está una de las puertas clásicas más importantes, la puerta *NAND* (NOT AND). Sucede cuando el tercer bit es uno, ya que se reproduce la tabla de verdad del *NAND*:

$$\left. \begin{array}{l} |001\rangle \longrightarrow |001\rangle \\ |011\rangle \longrightarrow |011\rangle \\ |101\rangle \longrightarrow |101\rangle \\ |111\rangle \longrightarrow |110\rangle \end{array} \right\} \text{Puerta } NAND$$

dicho de otra forma:

$$(A, B, 1) \xrightarrow{CCNOT} (A, B, \overline{A \wedge B})$$

Otra puerta interesante es la que intercambia los estados de dos qubits, en el caso binario es la puerta intercambiadora o *SWAP*:

$$U_{\text{SWAP}} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

y en el ternario se denomina intercambiador controlado o **puerta de Fredkin**:

$$U_F = |0\rangle\langle 0| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} + |1\rangle\langle 1| U_{\text{SWAP}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

o gráficamente

Fredkin



Además, siempre podemos definir operaciones controladas sobre estados de múltiples qubits. Si por ejemplo tenemos $n+k$ qubits y U es un operador unitario que actúa sobre k qubits, podemos definir la operación controlada $C^n(U)$ como

$$C^n(U)|x_1x_2\cdots x_n\rangle|\psi\rangle = |x_1x_2\cdots x_n\rangle U^{x_1x_2\cdots x_n}|\psi\rangle$$

y por tanto U sólo se aplica si los n primeros qubits son iguales a 1.

24.3. Teorema de no clonación

El teorema de no clonación, introducido independientemente por **William Wootters** y **Wojciech Zurek** por un lado y por **Dennis Dieks** por otro (este último relacionándolo con la causalidad relativista) en 1982, afirma que de acuerdo con las propiedades unitarias de la mecánica cuántica, no es posible hacer una copia o clonación de un estado cuántico arbitrario.

Lo que se afirma por tanto es que no existe la puerta cuántica:

$$U_{CLON}|b0\rangle = |bb\rangle \quad \forall |b\rangle$$

En efecto, consideremos el estado general:

$$|c\rangle = \alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle$$

Aplicando la linealidad tendremos

$$U_{CLON}|c0\rangle = \alpha_0 U_{CLON}|00\rangle + \alpha_1 U_{CLON}|10\rangle = \alpha_0|00\rangle + \alpha_1|11\rangle$$

y por otra parte

$$U_{CLON}|c0\rangle = |cc\rangle = (\alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle) \otimes (\alpha_0|0\rangle + \alpha_1|1\rangle) = \alpha_0^2|00\rangle + \alpha_0\alpha_1|01\rangle + \alpha_1\alpha_0|10\rangle + \alpha_1^2|11\rangle$$

el cual es un estado en general distinto a no ser que una de las dos amplitudes sea nula.

Por tanto, hemos probado, sólo admitiendo la linealidad de la MC, que no es posible clonar un estado cuántico arbitrario. Se puede ver además que la unitariedad implica que no se pueden clonar dos estados cuánticos distintos y no ortogonales. En efecto, sean los estados a clonar ψ y ϕ y el estado auxiliar χ , de forma que:

$$\begin{aligned} U_{CLON}|\psi\chi\rangle &= |\psi\psi\rangle \\ U_{CLON}|\phi\chi\rangle &= |\phi\phi\rangle \end{aligned}$$

y hagamos el producto escalar de las dos igualdades miembro a miembro:

$$\langle\phi\chi|U_{CLON}^\dagger U_{CLON}|\psi\chi\rangle = \langle\phi\phi|\psi\psi\rangle$$

aplicando la unitariedad se tiene

$$\langle \phi | \psi \rangle \overbrace{\langle \chi | \chi \rangle}^1 = \langle \phi | \psi \rangle^2$$

es decir

$$\langle \phi | \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle^2$$

lo cual sólo es cierto si $\phi = \psi$ (estados iguales) o si su producto escalar es cero (estados ortogonales).

La simplicidad de este teorema desconcertó a la comunidad científica, que no entendió cómo pudo pasar inadvertido durante tantos años.

Es cierto que este hecho, aunque tiene la grave desventaja en computación cuántica relacionada con las lecturas y las copias de seguridad, es de una gran importancia en criptografía cuántica.

Además, el teorema no impide la copia exacta de un estado conocido, y tampoco el hecho de que se puedan construir algoritmos de copia aproximados (**Vladimir Buzek, Mark Hillery, 1996**). Esto tampoco impide la teleportación de estados, en donde es borrado el estado original.

24.4. Circuitos cuánticos

24.4.1. Máquina de Turing cuántica

Clásicamente un ordenador se define como una cinta finita dividida en n estados (celdas) con un estado inicial y otro final distinguibles. Además las celdas son descritas mediante cierto alfabeto y habrá una cabeza que lea y escriba ese alfabeto, dirigida por una unidad de control que dicta ciertas reglas. Cuando la unidad de control alcanza un estado final se para.

En computación clásica los estados vienen representados por bits. En computación cuántica el estado viene representado por un vector del espacio de Hilbert:

$$\mathbb{H} = \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \dots \otimes \mathbb{C}^2 = \mathbb{C}^{2^n}$$

para un estado de n qubits. Es decir, un vector será de la forma:

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_{n-1}=0}^1 \dots \sum_{i_1=0}^1 \sum_{i_0=0}^1 c_{i_{n-1}, \dots, i_1, i_0} |i_{n-1}\rangle \otimes \dots \otimes |i_1\rangle \otimes |i_0\rangle = \sum_{i=0}^{2^n-1} c_i |i\rangle$$

con

$$\sum |c_i|^2 = 1$$

$$i = i_{n-1}2^{n-1} + \dots + i_12 + i_0$$

La diferencia principal con el caso clásico estriba en el principio de superposición. Si tenemos n bits podemos almacenar un solo entero de entre los 2^n posibles. Sin embargo, con

n qubits, gracias al principio de superposición podemos formar infinitos estados, cualquier combinación lineal de los 2^n estados base, y su especificación requiere conocer 2^n amplitudes (para $n = 300$ ese número es del orden del número de grados de libertad del universo visible). Esto hace que mientras en un ordenador clásico su capacidad de memoria sea linealmente proporcional a su tamaño, en uno cuántico habría dependencia exponencial.

Así como en computación clásica hay un teorema que establece la equivalencia entre máquinas de Turing y circuitos lógicos, curiosamente establecido en los años 70 (Savage, Schnorr, Fischer), mucho después de la construcción de los primeros ordenadores, en el caso cuántico hay un resultado similar de 1993 debido a **Andrew Chi-Chih Yao**, mostrando que la máquina de Turing cuántica se puede reducir al estudio de los circuitos cuánticos. Para cualquier cómputo cuántico se necesita:

- 1) Preparar un estado inicial $|\Psi_i\rangle$.
- 2) Manipularlo mediante transformaciones unitarias $|\Psi_f\rangle = U|\Psi_i\rangle$
- 3) Realizar una medición en nuestra base computacional (por ejemplo medir la polarización a lo largo del eje z mediante el operador de Pauli σ_z de cada uno de los qubits).

El proceso de medida convierte un estado simple de un qubit $|\Psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle$ en un bit clásico **R** que será cero con probabilidad $|\alpha|^2$ o 1 con probabilidad $|\beta|^2$. Gráficamente:

$$|\Psi\rangle \text{ --- } \boxed{\text{---}} \text{ --- } R$$

24.4.2. Generación de entrelazamiento

El fenómeno del entrelazamiento, puramente cuántico, viene a decir que los estados cuánticos de dos o más partículas se deben describir haciendo referencia a los estados de todos los objetos del sistema, sin importar que estén separados espacialmente.

Si los estados de dos partículas se definen por los subespacios \mathbb{H}_1 y \mathbb{H}_2 , un estado general del sistema no será de la forma

$$|\Psi\rangle = |\alpha\rangle_1 \otimes |\beta\rangle_2$$

en cuyo caso diríamos que es **separable**, sino un estado **entrelazado**, es decir, una combinación lineal del tipo:

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j=0}^1 c_{ij} |i\rangle_1 \otimes |j\rangle_2 \equiv \sum_{ij} c_{ij} |ij\rangle$$

Por ejemplo el estado

$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |11\rangle)$$

sería separable, ya que

$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle)_1 \otimes |1\rangle_2$$

Ejemplos clásicos de estados entrelazados son los **estados de Bell**:

$$|\beta_{00}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle)$$

$$|\beta_{01}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle + |10\rangle)$$

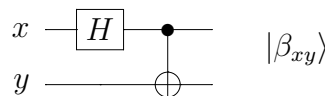
$$|\beta_{10}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle - |11\rangle)$$

$$|\beta_{11}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|01\rangle - |10\rangle)$$

en donde la notación nos permite usar la forma abreviada

$$|\beta_{xy}\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, y\rangle) + (-1)^x |1, \neg y\rangle$$

Se puede diseñar un circuito para obtener estos estados a partir de los de la base. Por ejemplo:



$$\begin{aligned} |00\rangle &\longrightarrow CNOT(H|0\rangle \otimes |0\rangle) = CNOT \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes |0\rangle \right] = \\ &= CNOT \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |10\rangle) \right] = \frac{1}{\sqrt{2}}(|00\rangle + |11\rangle) = |\beta_{00}\rangle \end{aligned}$$

y de la misma forma se generan los demás

$$|01\rangle \longrightarrow |\beta_{01}\rangle$$

$$|10\rangle \longrightarrow |\beta_{10}\rangle$$

$$|11\rangle \longrightarrow |\beta_{11}\rangle$$

24.4.3. Paralelismo cuántico

El mayor poder de cálculo en el terreno cuántico es originado por el llamado **paralelismo cuántico**, consecuencia a su vez de la superposición cuántica, que nos permitiría conocer los resultados de varias operaciones simultáneamente.

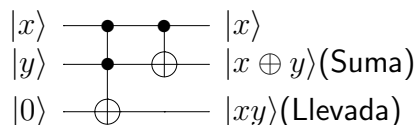
En 1995, los profesores de la Universidad de Oxford Vlatko Vedral, Artur Ekert y Adriano Barenco publicaron diferentes formas con las que se podían hacer operaciones clásicas cuánticamente. Veamos cómo se podrían realizar sumas simultáneas con una única unidad de control.

Recordemos primero cómo se hacían las sumas en binario (módulo 2):

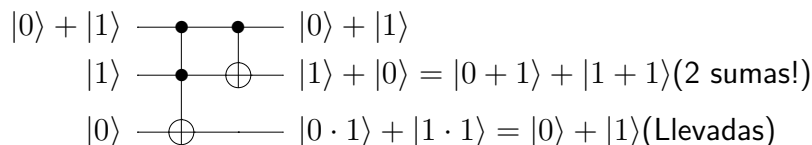
$$\begin{array}{r}
 \\
 \\
 \\
 \\
 \hline
 0 1 0 \\
 + 1 0 1 0 \\
 \hline
 0 1 1 0
 \end{array}$$

1 ← llevada

En el caso cuántico para las sumas de dos bits utilizamos la puerta de Toffoli con el tercer qubit a cero y la puerta *CNOT*:



Si preparamos el primer estado como superposición en teoría podríamos hacer dos sumas simultáneamente:



24.4.4. Interferencia cuántica

El fenómeno de interferencia se puede ilustrar con la aplicación de la puerta de Hadamard a un qubit arbitrario:

$$\alpha|0\rangle + \beta|1\rangle \xrightarrow{H} \left(\frac{\alpha+\beta}{\sqrt{2}}\right)|0\rangle + \left(\frac{\alpha-\beta}{\sqrt{2}}\right)|1\rangle$$

Se observa que en un caso las probabilidades se suman (interferencia constructiva) y en el otro se restan (interferencia destructiva). El caso extremo es aquel en el que:

$$\alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

en donde se tiene que el estado $|0\rangle$ pasa de tener 50% de probabilidades de aparecer a la certeza absoluta de encontrarlo después de la medición, cuando ya no se podrá encontrar el estado $|1\rangle$.

24.4.5. Circuitos universales

En computación clásica un teorema importante afirma que cualquier función sobre bits puede ser evaluada mediante la composición de puertas *NAND* únicamente, ya que como consecuencia de las **leyes de Morgan** (en honor del lógico inglés **Augustus De Morgan**), si denotamos con \uparrow a la operación *NAND* se puede probar que:

$$\begin{aligned}\neg a &= a \uparrow a \\ a \vee b &= (a \uparrow a) \uparrow (b \uparrow b) \\ a \wedge b &= (a \uparrow b) \uparrow (a \uparrow b)\end{aligned}$$

Esto implica que en computación cuántica nos bastaría con la puerta de Toffoli para evaluar funciones clásicamente. Es por esto que se dice que la puerta *NAND* es universal. En realidad si se habla de conjuntos universales, en este caso la mencionada puerta, para de verdad emular un verdadero computador, debería ir acompañada de la puerta *COPY* o *FANOUT* que copie estados, definida como:

$$x \in \{0, 1\} \mapsto (x, x)$$

En computación cuántica se dice que un conjunto de puertas es universal si cualquier operación unitaria puede ser aproximada con precisión arbitraria por un circuito cuántico construido con esas puertas. La puerta de Toffoli no es ya universal en computación cuántica.

Fue David Deutsch en 1989 el primero que mostró la existencia de una puerta universal cuántica, la puerta de Deutsch, de tres qubits. Se trata de una generalización de la puerta de Toffoli del tipo:

$$D(\alpha) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \text{icos}\alpha & \text{sen}\alpha \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \text{sen}\alpha & \text{icos}\alpha \end{pmatrix}$$

Como se ve, se trata en realidad de una familia de puertas. Además, debido al hecho de que $D(\alpha)D(\alpha') = iD(\alpha + \alpha')$, se suele fijar α como un múltiplo irracional de π , de forma que una puerta pueda generar todas las demás asintóticamente. Además, la equivalencia

$$D(\pi/2) = U_T$$

asegura que cualquier cálculo clásico se puede hacer también con un circuito cuántico.

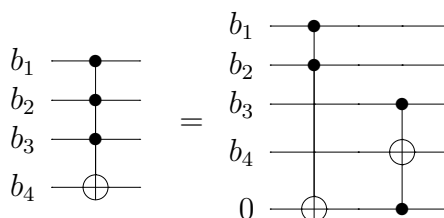
En 1994 David DiVicenzo descubrió que la puerta de Deutsch podía descomponerse en puertas binarias, lo cual fue una sorpresa, dado que la lógica clásica reversible requiere puertas ternarias para la universalidad. Ya comentamos que Toffoli y Fredkin observaron que hacían falta puertas ternarias para la lógica clásica reversible. Sin embargo, la puerta de Toffoli (y cualquiera) puede ser descompuesta en puertas binarias y monarias con la ayuda de las características eminentemente cuánticas, lo que implica el sorprendente resultado de que sólo son necesarios dos qubits para la lógica cuántica.

Vamos a desarrollar esto un poco más. Veamos por qué son necesarios tres bits en lógica clásica reversible. Imaginemos que queremos implementar la puerta universal *NAND* con solo dos bits. Para hacerla invertible deberíamos poner el resultado en uno de los dos bits entrantes:

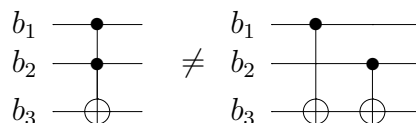
a_1	a_2	a_1	$a_1 \uparrow a_2$
0	0	0	1
0	1	0	1
1	0	1	1
1	1	1	0

Como se ve, esto no nos valdría ya que perdemos la reversibilidad. Las dos primeras entradas producen la misma salida. Es necesario pues un tercer bit que nos dé información de la entrada.

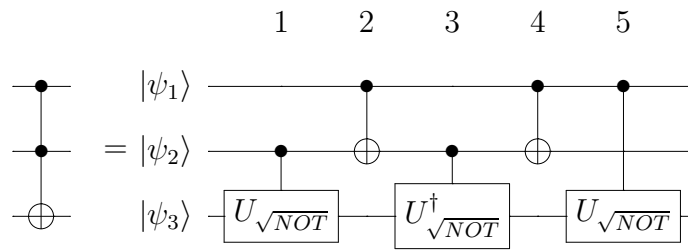
Con puertas ternarias clásicas sin embargo siempre se pueden simular puertas de más bits. Vemos por ejemplo cómo se puede reducir la puerta cuaternaria *CCC – NOT* con puertas de Toffoli:



como se ve, se usa un bit auxiliar inicializado a 0, de forma que en él se escriba el resultado de los dos primeros bits, si están a 1 este también estará a 1 y nos servirá para aplicar un *NOT* al cuarto bit siempre que también esté el tercero encendido, como hacía la puerta original cuaternaria. Se ha reducido pues una puerta cuaternaria a dos puertas ternarias. Veamos ahora por qué no se puede reducir clásicamente una ternaria con binarias:



vemos que el *NOT* aquí sobre b_3 se hace cuando uno de los dos bits son 1, no cuando lo son los dos. Sin embargo, con puertas eminentemente cuánticas sí se puede reducir el circuito ternario, en la forma:



En donde ya hemos estudiado la raíz de NOT como puerta unitaria, la recordamos aquí en sus varias formas:

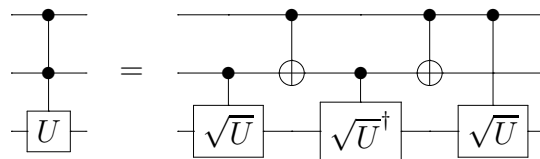
$$U_{\sqrt{NOT}} = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i\pi/4}(1 - i\sigma_1) = (1 - i)(\mathbb{1} + iX)/2 = \begin{pmatrix} \frac{1+i}{2} & \frac{1-i}{2} \\ \frac{1-i}{2} & \frac{1+i}{2} \end{pmatrix} = \frac{1+i}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$$

Para hacernos una idea de cómo actúan los circuitos, veamos en dos ejemplos cómo efectivamente las puertas binarias reproducen la de Toffoli:

$$\begin{aligned} |10\psi_3\rangle &\xrightarrow{1} |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes |\psi_3\rangle \xrightarrow{2} |1\rangle \otimes |1\rangle \otimes |\psi_3\rangle \xrightarrow{3} |1\rangle \otimes |1\rangle \otimes U^\dagger|\psi_3\rangle \\ &\xrightarrow{4} |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes U^\dagger|\psi_3\rangle \xrightarrow{5} |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes \underbrace{UU^\dagger}_1|\psi_3\rangle = |10\psi_3\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |11\psi_3\rangle &\xrightarrow{1} |1\rangle \otimes |1\rangle \otimes U|\psi_3\rangle \xrightarrow{2} |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes U|\psi_3\rangle \xrightarrow{3} |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes U|\psi_3\rangle \\ &\xrightarrow{4} |1\rangle \otimes |1\rangle \otimes U|\psi_3\rangle \xrightarrow{5} |1\rangle \otimes |1\rangle \otimes U^2|\psi_3\rangle = |1\rangle \otimes |1\rangle \otimes NOT|\psi_3\rangle \end{aligned}$$

En realidad esto se puede extender a cualquier puerta C^2-U , en donde siempre se tendrá la equivalencia:



El resultado general mostrado por Adriano Barenco y otros que se apoyaron en trabajos anteriores fue que **cualquier operación unitaria en el espacio de Hilbert \mathbb{H} de n qubits puede descomponerse en una secuencia de puertas de 1 qubit y de 2 qubits $CNOT$** . Este conjunto infinito además es exactamente universal. Existen sin embargo conjuntos discretos universales, como el formado por la puerta de Hadamard y la puerta de fase controlada.

24.4.6. Algoritmos cuánticos

Un algoritmo cuántico es un proceso encaminado a realizar alguna tarea computacional específica. Esto en la práctica supone extraer alguna de las amplitudes de los N qubits que forman parte de la computación. Recordemos que en efecto cualquier estado de un conjunto

de N bits queda especificado por N bits mientras que para especificar N qubits necesitamos los 2^N números que representan las amplitudes de superposición.

Aunque en teoría esto denota la mayor capacidad de cálculo de la computación cuántica, en la práctica esta información almacenada en las amplitudes permanece oculta, y la mayor parte se destruye en el proceso de medición, obteniendo sólo una pequeña parte. Aún así, la información extraída en un algoritmo suele ser de una utilidad y efectividad mucho mayor que la correspondiente al cálculo clásico.

Algunos de los algoritmos cuánticos más famosos son:

- 1.- **Algoritmo de Deutsch-Jozsa**, o "cómo mirar las dos caras de la moneda a la vez".
- 2.- **Algoritmo de Simon**, o "cómo averiguar, en tiempo polinómico, el periodo de una función".
- 3.- **Algoritmo de Shor**, o "cómo factorizar en tiempo polinómico".
- 4.- **Algoritmo de Grover**, o "cómo hallar una aguja en un pajar".

24.5. Algoritmo de Deutsch

Por razones históricas el primero de los algoritmos a estudiar es el propuesto por **David Deutsch** en 1985. Aunque en el fondo no sea de una gran utilidad para casos prácticos, en él se empieza a apreciar el funcionamiento y la potencia de los programas cuánticos.

Antes debemos hacer algún comentario sobre la forma de evaluar una función en computación cuántica. Para asegurar la reversibilidad del proceso de evaluación, es necesario siempre un registro auxiliar en donde se guarde el resultado de la consulta auxiliar (a veces denominada *query* por contagio de los lenguajes de bases de datos) además de encontrarse también los valores iniciales en el registro de salida. Es decir, usaremos un registro dividido en dos, la fuente (*source*) y el destino (*target*):

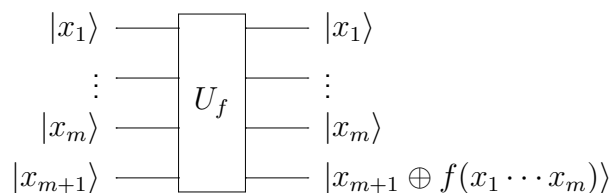
$$|\psi_0\rangle = |\psi_s\rangle \otimes |\psi_t\rangle$$

Para implementar una función booleana por tanto necesitaremos únicamente un qubit adicional que nos dé el resultado, el cual se puede evaluar fácilmente mediante la suma módulo 2 (\oplus), o, dicho de otra forma, el operador lógico *XOR*:

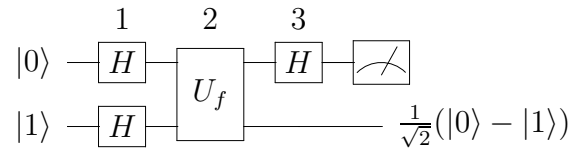
$$f : \{0, 1\}^m \longrightarrow \{0, 1\}$$

$$U_f : |x_1 \cdots x_m\rangle_s |x_{m+1}\rangle_t \longrightarrow |x_1 \cdots x_m\rangle_s |x_{m+1} \oplus f(x_1 \cdots x_m)\rangle_t$$

o gráficamente



El problema de Deutsch trata de discernir, para $m = 1$, si la función es constante o no con una sola pregunta. Es decir, una función puede que dé en una *query* $f(0) = 1$, pero por esto no podemos afirmar, clásicamente, que la función sea constante, habrá que averiguar también cuánto vale $f(1)$, es decir, hacer dos *queries*. Pues bien, usando adecuadamente el llamado a veces *oráculo* cuántico U_f (no deja de ser una puerta a la que se le hace una pregunta) se demuestra que con sólo una indagación en computación cuántica podemos averiguar el resultado. El circuito es el siguiente:



Vamos analizar el programa paso por paso. Antes recordemos la forma de actuar del operador de Hadamard:

$$H|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + (-1)^x|1\rangle)$$

Partimos del estado inicial

$$|\psi_0\rangle = |0\rangle \otimes |1\rangle$$

aplicamos los operadores de Hadamard:

$$|\psi_1\rangle = H^{\otimes 2}|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^2}}(|0\rangle + |1\rangle) \otimes (|0\rangle - |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2^2}} \sum_{x=0}^1 |x\rangle \otimes (|0\rangle - |1\rangle)$$

ahora haremos actuar el operador que implementa nuestra función, teniendo en cuenta que:

$$\begin{aligned} |x\rangle \otimes (|0 \oplus f(x)\rangle - |1 \oplus f(x)\rangle) &= |x\rangle \otimes (|0\rangle - |1\rangle) \quad \text{si } f(x) = 0 \\ |x\rangle \otimes (|0 \oplus f(x)\rangle - |1 \oplus f(x)\rangle) &= -|x\rangle \otimes (|0\rangle - |1\rangle) \quad \text{si } f(x) = 1 \end{aligned}$$

con lo que se podrá poner

$$|\psi_2\rangle = U_f|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^2}} \sum_{x=0}^1 (-1)^{f(x)} |x\rangle \otimes (|0\rangle - |1\rangle)$$

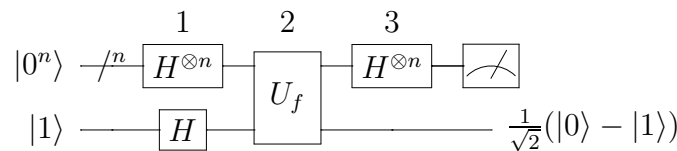
y por último el primer qubit pasa por una puerta de Hadamard:

$$\begin{aligned} |\psi_3\rangle &= (H \otimes \mathbb{1})|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^2}} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{x=0}^1 (-1)^{f(x)} (|0\rangle + (-1)^x|1\rangle) \otimes (|0\rangle - |1\rangle) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^2}} \sum_{x=0}^1 ((-1)^{f(x)}|0\rangle + (-1)^{x+f(x)}|1\rangle) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle) \end{aligned}$$

Sólo queda medir el primer qubit. Si está en el estado $|0\rangle$, la función será constante, de lo contrario no. Esto es así debido al siguiente hecho:

$$((-1)^{f(0)} + (-1)^{f(1)})|0\rangle + ((-1)^{f(0)} + (-1)^{1+f(1)})|1\rangle = \begin{cases} \propto |0\rangle & \text{si } f(0) = f(1) \\ \propto |1\rangle & \text{si } f(0) \neq f(1) \end{cases}$$

La generalización a funciones booleanas sobre n qubits la hizo Deutsch junto a Richard Jozsa en 1992. Ahora se trataba de ver si una función es constante o está equilibrada o balanceada, es decir, si es 0 para la mitad de las entradas y 1 para el resto. El circuito que se emplea es similar:



Ahora el estado inicial es de la forma:

$$|\psi_0\rangle = |0^n\rangle_s \otimes |1\rangle_t = |0\rangle_1 \otimes \dots \otimes |0\rangle_n \otimes |1\rangle$$

aplicando los operadores de Hadamard, recordando el resultado en notación decimal (24.5) se obtiene:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= H^{\otimes(n+1)}|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^{n+1}}}(|0\rangle + |1\rangle)^n \otimes (|0\rangle - |1\rangle) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2^{n+1}}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle \otimes (|0\rangle - |1\rangle) \end{aligned}$$

y después de pasar por la puerta funcional queda:

$$|\psi_2\rangle = U_f|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^{n+1}}} \sum_{x=0}^{2^n-1} (-1)^{f(x)} |x\rangle \otimes (|0\rangle - |1\rangle)$$

Para aplicar el operador de Hadamard sobre los n primeros estados hay que tener en cuenta el resultado:

$$H^{\otimes n}|x_{n-1} \dots x_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{y_{n-1}, \dots, y_0} (-1)^{x_{n-1}y_{n-1} + \dots + x_0y_0} |y_{n-1} \dots y_0\rangle$$

por ejemplo

$$H^2|11\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^2}}(|00\rangle - |01\rangle - |10\rangle + |11\rangle)$$

resultado que se puede compactar usando el producto escalar binario pero en notación decimal:

$$H^{\otimes n}|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{y=0}^{2^n-1} (-1)^{x \cdot y} |y\rangle \quad (24.4)$$

Usando el resultado obtenemos el estado final:

$$|\psi_3\rangle = (H^{\otimes n} \otimes \mathbb{1})|\psi_2\rangle = \frac{1}{2^n} \sum_{y=0}^{2^n-1} \sum_{x=0}^{2^n-1} (-1)^{f(x)+x \cdot y} |y\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$$

y de nuevo se puede obtener, con una sola medida, que si los primeros n qubits están en el estado $|0^n\rangle$ con probabilidad 1, la función será constante, y si la probabilidad es 0, la función estará balanceada, en los restantes casos la función simplemente no sería constante. Como ilustración, los términos para $n = 2$ para el primer qubit serían:

$$\begin{aligned} & [(-1)^{f(00)} + (-1)^{f(01)} + (-1)^{f(10)} + (-1)^{f(11)}] |00\rangle + \\ & + [(-1)^{f(00)} - (-1)^{f(01)} + (-1)^{f(10)} - (-1)^{f(11)}] |01\rangle + \\ & + [(-1)^{f(00)} + (-1)^{f(01)} - (-1)^{f(10)} - (-1)^{f(11)}] |10\rangle + \\ & + [(-1)^{f(00)} - (-1)^{f(01)} - (-1)^{f(10)} + (-1)^{f(11)}] |11\rangle \end{aligned}$$

por tanto, con una sola *query* podemos adivinar la constancia o el balanceo de la función. Nótese que, si a priori sabemos que la función es constante o balanceada, clásicamente en teoría habría que hacer tres medidas para averiguar cuál de las dos opciones es, en el peor de los casos (en el mejor con dos nos valdría). En general en el peor de los casos habría que indagar en la mitad más uno de los posibles resultados, es decir, para una función de n bits habría que hacer $2^n/2 + 1$ *queries*, frente a dos si tenemos suerte o a uno si aplicamos la computación cuántica.

La primera implementación experimental de este algoritmo fue propuesta, para dos qubits, en 1998 por **Jonathan Jones** y **Michele Mosca** para técnicas de espines bajo resonancia magnética nuclear (RMN). Hay que señalar que este algoritmo en el fondo no mejora exponencialmente los cálculos clásicos, ya que siempre se puede diseñar un algoritmo clásico probabilista (consultas aleatorias a la función) que nos dé el resultado con gran margen de precisión en muy poco tiempo.

24.6. Algoritmo de Simon

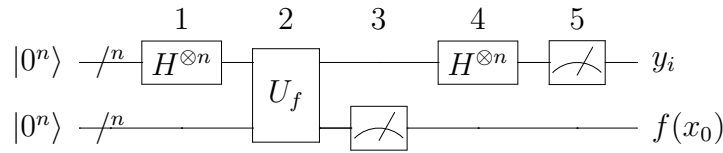
Este algoritmo fue propuesto por **Daniel Simon** en 1994. Se trata de encontrar el periodo de una función vectorial booleana del tipo:

$$f : \{0, 1\}^n \longrightarrow \{0, 1\}^n$$

El periodo por tanto será un vector booleano T que cumpla:

$$f(x) = f(x \oplus T) \quad T \in \{0, 1\}^n$$

Se puede probar que de nuevo clásicamente habría que evaluar f sobre la mitad más uno de los elementos del dominio ($2^{n-1} + 1$), es decir, el coste sería exponencial. Incluso con un algoritmo probabilista no podríamos ir más acá de las $2^{n/2}$ consultas. Veremos que en este caso la ganancia cuántica es clara ya que bastará evaluar U_f unas pocas veces, del orden de n , para encontrar el periodo con una buena cota de aproximación.



Ahora los dos registros del estado inicial tienen n qubits:

$$|\psi_0\rangle = |0^n\rangle_s \otimes |0^n\rangle_t$$

Aplicando los operadores de Hadamard al primer registro obtenemos:

$$|\psi_1\rangle = (H^{\otimes n} \otimes \mathbb{1}^{\otimes n}) |\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle \otimes |0^n\rangle$$

Si hacemos actuar ahora la función obtenemos, dado que todos los bits del registro están a cero:

$$|\psi_2\rangle = U_f |\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle \otimes |f(x)\rangle$$

Ahora añadimos un paso que no es necesario pero sí es muy útil desde el punto de vista pedagógico. Se trata de medir el segundo registro y obtener uno de los posibles valores de la función, digamos $f(x_0)$, quedando el estado colapsado a:

$$|\psi_3\rangle = M_2 |\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|x_0\rangle + |x_0 \oplus T\rangle) \otimes |f(x_0)\rangle$$

en donde por supuesto suponemos el estado más general combinación de x_0 y $x_0 + T$, dado que sólo conocemos el valor de la función. Si ahora aplicamos Hadamard sobre los primeros qubits se obtiene:

$$|\psi_4\rangle = (H^{\otimes n} \otimes \mathbb{1}^{\otimes n}) |\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^{n+1}}} \sum_{y=0}^{2^n-1} [(-1)^{x_0 \cdot y} + (-1)^{(x_0 \oplus T) \cdot y}] |y\rangle \otimes |f(x_0)\rangle$$

en donde lógicamente ahí sólo sobrevivirán los términos que cumplen que $T \cdot y = 0$, ya que el resto interferirá destructivamente. Si ahora medimos el primer registro:

$$|\psi_5\rangle = M_1|\psi_4\rangle = |y_i\rangle \otimes |f(x_0)\rangle$$

obtendremos para cada estado y_i una probabilidad:

$$\begin{aligned} \text{Prob}(y_i/T \cdot y_i = 0) &= \left| \frac{1}{\sqrt{2^{n+1}}} (-1)^{x_0 \cdot y_i} [1 + (-1)^{T \cdot y_i}] \right|^2 = \\ &= \frac{1}{2^{n+1}} |1 + (-1)^{T \cdot y_i}|^2 = \begin{cases} \frac{1}{2^{n-1}} & \text{si } T \cdot y_i = 0 \\ 0 & \text{si } T \cdot y_i \neq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

Repitiendo estos pasos del orden de n veces obtenemos n vectores y_i que nos darán un sistema lineal homogéneo de ecuaciones cuya solución no trivial nos dará las componentes de T :

$$T \cdot y_i = 0 \quad i = 1, \dots, n$$

que podemos resolver con un algoritmo clásico obteniendo T con un orden $O(n)$ de repeticiones. Como se ha dicho, este algoritmo es exponencialmente más eficiente que cualquier algoritmo clásico, incluso de tipo aleatorio.

24.7. Transformada cuántica de Fourier

Hemos visto en los algoritmos estudiados que una de las armas más potentes en computación cuántica es la puerta de Hadamard. En realidad esta puerta es un caso especial de la llamada transformada cuántica de Fourier (QFT):

$$\begin{aligned} \sum_{x=0}^{N-1} f(x)|x\rangle &\longrightarrow \sum_{y=0}^{N-1} \tilde{f}(y)|y\rangle \\ \text{con } \tilde{f}(y) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} e^{2\pi i xy/N} f(x) \end{aligned}$$

Por tanto, sobre los vectores de la base se aplica la transformación unitaria $N \times N$:

$$U_{F_N}|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{y=0}^{N-1} e^{2\pi i xy/N} |y\rangle$$

La QFT es por tanto una **transformada de Fourier discreta** (DFT). En principio harían falta del orden de $O(N^2)$ operaciones para realizarla, pero en el caso de $N = 2^n$, el orden $O(2^{2n})$ se puede reducir mediante la llamada **transformada rápida de Fourier** (FFT) a un

orden de $O(N \log N) = O(n 2^n)$. Aún así, sigue siendo un orden exponencial que veremos que el algoritmo cuántico mejora a cuadrático.

En este caso binario sustituiremos en la última expresión la expansión binaria:

$$y = y_{n-1}y_{n-2} \cdots y_0 = y_{n-1} \cdot 2^{n-1} + \cdots + y_0 \cdot 2^0 \quad \text{con } y_i \in \{0, 1\}$$

obteniendo

$$U_{F_{2^n}} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{y_{n-1}=0}^1 \cdots \sum_{y_0=0}^1 e^{2\pi i x \sum_{l=1}^n y_{n-l}/2^l} |y_{n-1} \cdots y_0\rangle$$

y utilizando que la exponencial de una suma es el producto de las exponenciales resulta:

$$U_{F_{2^n}} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \bigotimes_{l=1}^n \left[\sum_{y_{n-l}=0}^1 e^{2\pi i x y_{n-l}/2^l} |y_{n-l}\rangle \right]$$

En consecuencia se puede ver que la QFT transforma la base computacional en otra base con vectores factorizables, es decir, sin entrelazamiento.

Ahora, teniendo en cuenta la representación de las fracciones binarias:

$$\begin{aligned} \frac{x}{2} &= x_{n-1}2^{n-2} + \cdots + x_1 + x_02^{-1} = x_{n-1} \cdots x_1.x_0 \\ \frac{x}{2^2} &= x_{n-1}2^{n-3} + \cdots + x_2 + x_12^{-1} + x_02^{-2} = x_{n-1} \cdots x_2.x_1x_0 \end{aligned}$$

y despreciando la parte entera que en la exponencial sólo formará unidades, se tiene:

$$U_{F_{2^n}} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} (|0\rangle + e^{2\pi i 0.x_0} |1\rangle) \otimes (|0\rangle + e^{2\pi i 0.x_1x_0} |1\rangle) \otimes \cdots \otimes (|0\rangle + e^{2\pi i 0.x_{n-1} \cdots x_0} |1\rangle)$$

o de forma más compacta

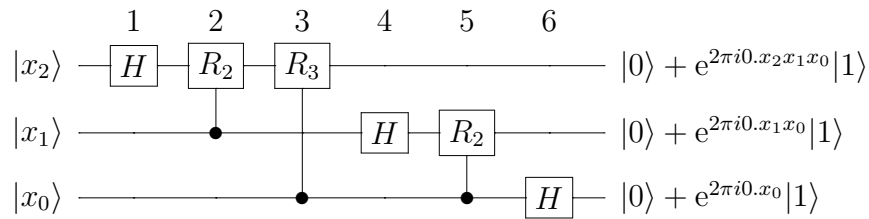
$$U_{F_{2^n}} = \frac{1}{\sqrt{2^n}} \bigotimes_{l=1}^n (|0\rangle + e^{2\pi i 0.x_{l-1} \cdots x_0} |1\rangle)$$

Nótese que como comentamos la puerta de Hadamard no deja de ser una transformada de Fourier actuando sobre un solo qubit:

$$H|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + (-1)^x |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{2\pi i x/2} |1\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{2\pi i 0.x} |1\rangle)$$

Vamos a ver un circuito que implementa esta transformación. Sea el caso $n = 3$ con el estado de entrada:

$$|\psi_0\rangle = |x_2x_1x_0\rangle$$



En donde definimos las rotaciones condicionales como:

$$R_k \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{2\pi i/2^k} \end{pmatrix}$$

La primera puerta de Hadamard actúa sobre el bit más significativo, generando el estado:

$$|\psi_1\rangle = (H \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1})|\psi_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{2\pi i 0 \cdot x_2} |1\rangle) \otimes |x_1x_0\rangle$$

Las siguientes puertas de rotación controlada agregan las fases $\pi/2$ y $\pi/4$ a $|x_2\rangle$ si los bits correspondientes están encendidos, esto es:

$$|\psi_2\rangle = (R_2 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1})|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{2\pi i 0 \cdot x_2 x_1} |1\rangle) \otimes |x_1x_0\rangle$$

$$|\psi_3\rangle = (R_3 \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1})|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|0\rangle + e^{2\pi i 0 \cdot x_2 x_1 x_0} |1\rangle) \otimes |x_1x_0\rangle$$

De la misma forma se aplica Hadamard y su rotación controlada al segundo bit:

$$|\psi_4\rangle = (\mathbb{1} \otimes H \otimes \mathbb{1})|\psi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^2}} (|0\rangle + e^{2\pi i 0 \cdot x_2 x_1 x_0} |1\rangle) \otimes (|0\rangle + e^{2\pi i 0 \cdot x_1} |1\rangle) \otimes |x_0\rangle$$

$$|\psi_5\rangle = (\mathbb{1} \otimes R_2 \otimes \mathbb{1})|\psi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^2}} (|0\rangle + e^{2\pi i 0 \cdot x_2 x_1 x_0} |1\rangle) \otimes (|0\rangle + e^{2\pi i 0 \cdot x_1 x_0} |1\rangle) \otimes |x_0\rangle$$

y por último la puerta de Hadamard al último bit:

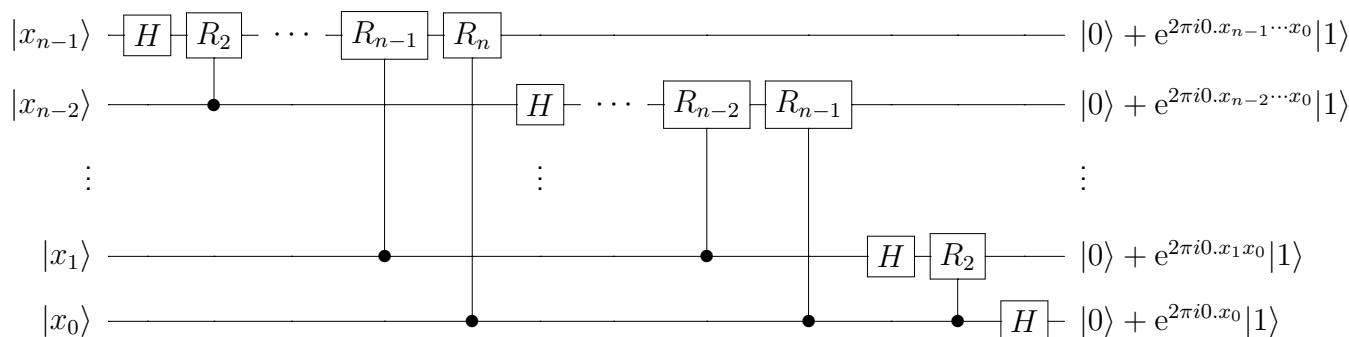
$$|\psi_6\rangle = (\mathbb{1} \otimes \mathbb{1} \otimes H)|\psi_5\rangle = \frac{1}{\sqrt{2^3}} (|0\rangle + e^{2\pi i 0 \cdot x_2 x_1 x_0} |1\rangle) \otimes (|0\rangle + e^{2\pi i 0 \cdot x_1 x_0} |1\rangle) \otimes (|0\rangle + e^{2\pi i 0 \cdot x_0} |1\rangle)$$

Vemos que para $n = 3$ se han necesitado 3 puertas de Hadamard y 3 puertas de rotación condicionada. Para el caso general se necesitan:

$$\text{Puertas QFT} = n \text{ Hadamard} + \binom{n}{2} \text{ Rotaciones} = n + \frac{n(n-1)}{2} = \frac{n(n+1)}{2} \text{ puertas}$$

Por tanto, el orden de cálculo de esta transformación cuántica es $O(n^2) = O((\log N)^2)$, lo que denota una ganancia exponencial frente al mejor algoritmo clásico, que como comentamos era del orden $O(n2^n)$.

Por claridad no hemos incluido las puertas *SWAP* que se necesitan (del orden de $n/2$) para obtener el orden correcto al final para nuestra transformada de Fourier tal como la definimos al principio. Un circuito general para n qubits sería de la forma:



24.8. Algoritmo de Grover

24.8.1. Descripción del problema

Un algoritmo de búsqueda es el que nos permite encontrar un elemento x_0 en un conjunto posible de soluciones (estructura de datos) que cumpla una determinada proposición $f(x)$. Dentro de este tipo de problemas están la búsqueda en una base de datos o el coloreado ordenado de una gráfica.

Si no sabemos nada sobre la estructura del espacio de soluciones estamos ante un problema desestructurado, como el que resolvió **Lov K. Grover** en 1996. Un ejemplo sería la búsqueda de un teléfono en una guía telefónica sin conocer el nombre. Clásicamente el mejor algoritmo aleatorio nos llevaría a un coste de $O(N)$ (si se quiere $N/2$ consultas de media) para una base de datos de tamaño N . Con el algoritmo de Grover se mejora este resultado con una ganancia cuadrática de orden $O(\sqrt{N})$. El algoritmo de Grover es probabilístico, es decir, sólo da la respuesta correcta con cierta probabilidad (al contrario que el de Deutsch por ejemplo que era determinista).

Lógicamente nuestra proposición aquí está implementada por un oráculo que actúe de la siguiente forma:

$$f_{x_0}(x) : \{0, 1\}^n \longrightarrow \{0, 1\} / \begin{cases} 1 & \text{si } x = x_0 \\ 0 & \text{si } x \neq x_0 \end{cases}$$

$$U_{f_{x_0}} |x\rangle \otimes |y\rangle = |x\rangle \otimes |y \oplus f_{x_0}(x)\rangle$$

Por tanto, asumimos que de entrada necesitaremos un registro fuente de n qubits tal que $N = 2^n$ y uno adicional para almacenar la información de la función. (Nótese el hecho de que conocer de antemano x_0 no es lo mismo que *reconocerlo* entre un conjunto de estados).

24.8.2. Estrategia

La estrategia será preparar un estado superposición de todas las entradas del catálogo:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle$$

después aplicar el oráculo que nos dé todos los valores de la veracidad de la proposición sobre las entradas:

$$|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle \otimes |f(x)\rangle$$

para en último lugar desbalancear los pesos estadísticos de forma que halla suficiente probabilidad de encontrar el estado $|x_0\rangle|1\rangle$. Para ello hay que utilizar las operaciones de **cambio de signo** e **inversión sobre el promedio**.

24.8.3. Cambio de signo

Se trata de aplicar un cambio de signo al elemento que cumpla la proposición, de forma que quede de algún modo marcado (figura 24.5). En el algoritmo clásico esto ya supondría, lógicamente, el haberlo encontrado, pero recordemos que aquí el elemento sigue dentro de un estado global que todavía no podremos medir por no tener la suficiente certeza de que el resultado nos va a dar nuestro elemento. El operador a implementar será de la forma:

$$U_{x_0} \equiv (\mathbb{1} - 2|x_0\rangle\langle x_0|) |x\rangle = \begin{cases} -|x_0\rangle & \text{si } x = x_0 \\ |x_0\rangle & \text{si } x \neq x_0 \end{cases}$$

La forma de implementar este algoritmo es preparando un estado destino, tal como hicimos para el de Deutsch-Jozsa (inicializándolo a $|1\rangle$ y aplicando Hadamard), en $|0\rangle - |1\rangle$. De este modo el oráculo de la función nos dará un cambio de signo cuando ésta sea 1.

$$U_{f_{x_0}} |x\rangle \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right) = (-1)^{f_{x_0}(x)} |x\rangle \left(\frac{|0\rangle - |1\rangle}{\sqrt{2}} \right)$$

es decir, al no alterarse el segundo registro lo que se tiene es que:

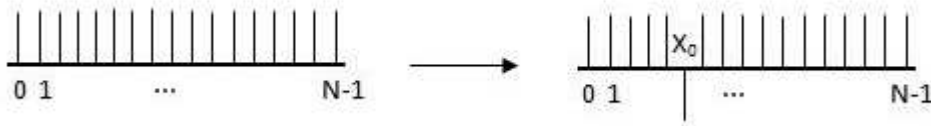


Figura 24.5: Cambio de signo

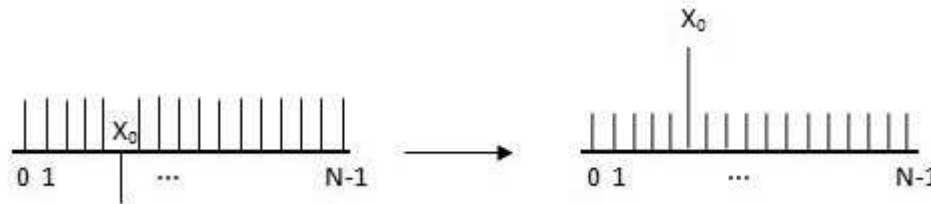


Figura 24.6: Inversión sobre el promedio

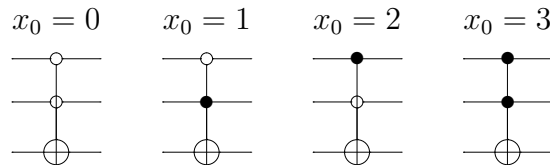
$$U_{f_{x_0}} = U_{x_0} \otimes \mathbb{1}$$

De esta forma el oráculo marca la solución del problema, mediante el operador cambio de signo:

$$U_{x_0} |x\rangle = (-1)^{f_{x_0}(x)} |x\rangle = (\mathbb{1} - 2|x_0\rangle\langle x_0|) |x\rangle$$

$$U_{x_0} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots - 1^{(x_0)} \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

Para $N = 4$ por ejemplo este operador oráculo se puede implementar mediante las siguientes puertas de tipo Toffoli, dependiendo de si el $x_0 = 0, 1, 2, 3$:



24.8.4. Inversión sobre el promedio

Se trata de un algoritmo que superpone sobre la media la diferencia respecto de ésta. De este modo el valor negativo recientemente invertido aparecerá por encima de todos los demás (figura 24.6). Para ello hay que usar el llamado por Grover **operador de difusión**:

$$D = H^{\otimes n}(-U_0)H^{\otimes n} = H^{\otimes n}(2|0\rangle\langle 0| - \mathbb{1})H^{\otimes n}$$

El efecto de este operador es equivalente a realizar una reflexión respecto del estado:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle$$

es decir

$$D = 2|\psi_1\rangle\langle\psi_1| - \mathbb{1} = \begin{pmatrix} \frac{2}{N} - 1 & \frac{2}{N} & \cdots & \frac{2}{N} \\ \frac{2}{N} & \frac{2}{N} - 1 & \cdots & \frac{2}{N} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{2}{N} & \frac{2}{N} & \cdots & \frac{2}{N} - 1 \end{pmatrix}$$

lo que se deduce simplemente aplicando la definición del operador Walsh-Hadamard respecto al estado fundamental y calculando después los elementos de matriz respecto de la base computacional.

Lo más interesante de este operador es estudiar lo que hace con las componentes de cualquier entrada que se le ponga, del tipo general:

$$|\psi\rangle = \sum_x \alpha_x |x\rangle$$

cuya acción es

$$\begin{aligned} D|\psi\rangle &= (2|\psi_1\rangle\langle\psi_1| - \mathbb{1})|\psi\rangle = \left(\frac{2}{N} \sum_x |x\rangle \sum_{x'} \langle x'| - \mathbb{1} \right) \sum_{x''} \alpha_{x''} |x''\rangle = \\ &= \left(\frac{2}{N} \sum_{xx'x''} \alpha_{x''} |x\rangle \langle x'| x''\rangle - \sum_x \alpha_x |x\rangle \right) = \left(\frac{2}{N} \sum_{x'} \alpha_{x'} \sum_x |x\rangle - \sum_x \alpha_x |x\rangle \right) = \\ &= \left(2 \langle \alpha \rangle \sum_x |x\rangle - \sum_x \alpha_x |x\rangle \right) = \sum_x (2 \langle \alpha \rangle - \alpha_x) |x\rangle \end{aligned}$$

es decir, se produce un cambio de las amplitudes en la forma

$$\alpha_x \longrightarrow 2 \langle \alpha \rangle - \alpha_x = \langle \alpha \rangle + (\langle \alpha \rangle - \alpha_x)$$

Vamos a ver el ejemplo de la actuación del cambio de signo y esta inversión para el caso $N = 4$ (que puede ser implementado con dos qubits). En el registro entrante las amplitudes de todos los estados son las mismas:

$$\begin{aligned} \alpha_x &= \frac{1}{\sqrt{4}} = \frac{1}{2} \\ \langle \alpha \rangle_{\psi_1} &= \frac{1}{4} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right] = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Número de iteraciones aconsejadas con error $1/N$ (0.25) =1

Numero de elementos 4 (2 qubits)		x_o	
Iteración	0 ->	0.50000	0.50000
Iteración	1 ->	0.00000	1.00000
Iteración	2 ->	-0.50000	0.50000
Iteración	3 ->	-0.50000	-0.50000
Iteración	4 ->	0.00000	-1.00000
Iteración	5 ->	0.50000	-0.50000
Iteración	6 ->	0.50000	0.50000
Iteración	7 ->	0.00000	1.00000
Iteración	8 ->	-0.50000	0.50000
Iteración	9 ->	-0.50000	-0.50000
Iteración	10 ->	0.00000	-1.00000

Figura 24.7: Algoritmo de Grover para $N=4$ y $s=1$

si se aplica un cambio de signo (sea $x_0 = 2 = (10)$):

$$\langle \alpha \rangle_{\psi} = \frac{1}{4} \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2} - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right] = \frac{1}{4}$$

y por último aplicamos el operador de difusión, con lo que las amplitudes cambian a:

$$\begin{aligned} (\alpha_x)_{x \neq x_0} &= \frac{1}{2} \longrightarrow 2 \cdot \frac{1}{4} - \frac{1}{2} = 0 \\ (\alpha_x)_{x=x_0} &= -\frac{1}{2} \longrightarrow 2 \cdot \frac{1}{4} + \frac{1}{2} = 1!! \end{aligned}$$

Lo que indica que en una sola iteración ya tenemos la certeza absoluta de encontrar el elemento, frente a una media de 2 en el caso clásico. En la figura 24.7 se ven las primeras iteraciones en este caso (y lo perjudicial que puede ser calcular de más). En general podemos decir que el aumento que se produce en la inversión temporal es aproximadamente:

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} + \left(\sim \frac{1}{\sqrt{N}} \right)_{\text{por iteración}}$$

lo que sería una forma heurística de ver que en efecto el método de Grover es de orden $O(\sqrt{N})$, dado que con ese orden de iteraciones llegaríamos a la unidad. En realidad esto no es así dado que las sucesivas iteraciones no tienen el mismo comportamiento, por eso va a ser tan importante calcular el número de iteraciones suficiente para una cierta probabilidad.

Para implementar este algoritmo basta con saber cómo se implementa la inversión respecto del eje $|0\rangle$ dada por $-U_0$. Para ello se usa el hecho de que:

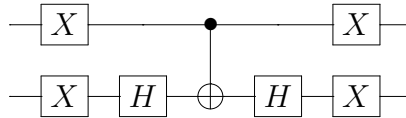
$$HXH = Z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

A partir de esto podemos construir, con ayuda de puertas *CNOT* o Toffoli controladas, el operador que actúa reflejando el último vector de la base $|111 \dots 1\rangle$. Si nos ayudamos también

de puertas X podemos dar la vuelta al estado de forma que lo que gire sea el primero. Por ejemplo, para dos qubits tendríamos:

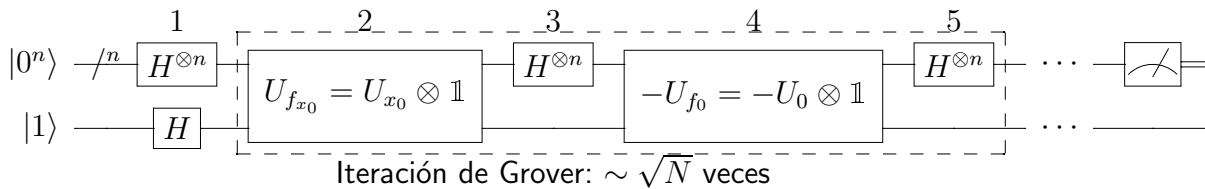
$$U_0 = (X \otimes X)(\mathbb{1} \otimes H)U_{CNOT}(\mathbb{1} \otimes H)(X \otimes X)$$

y el circuito correspondiente a U_0 sería:



como para implementar una puerta de Toffoli de n bits se necesitan $2n-5$ puertas ternarias de Toffoli, será ese el orden de cálculo de este algoritmo, es decir $O(n)=O(\log N)$.

24.8.5. Descripción del algoritmo



Partimos de un estado entrante de la forma:

$$|\Psi_0\rangle = |0^n\rangle \otimes |1\rangle$$

y al pasar por las puertas de Hadamard se tiene:

$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$$

Como a partir de aquí el segundo registro no se va a modificar, es útil trabajar sólo con el primero y empezar con el estado:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle$$

y estudiar su evolución bajo las iteraciones del operador de Grover:

$$G = (2|\psi_1\rangle\langle\psi_1| - \mathbb{1})(1 - 2|x_0\rangle\langle x_0|) = DU_{x_0}$$

y de esta forma también podemos simplificar su representación gráfica:

$$|0^n\rangle \xrightarrow{H^{\otimes n}} \overset{1}{G} \xrightarrow{H^{\otimes n}} \overset{2}{G} \cdots \xrightarrow{H^{\otimes n}} \overset{\sim \sqrt{N}}{G} \xrightarrow{H^{\otimes n}}$$

donde

$$G = \xrightarrow{U_{x_0}} \xrightarrow{H^{\otimes n}} \xrightarrow{-U_0} \xrightarrow{H^{\otimes n}}$$

Por tanto la primera reflexión respecto a $|x_0\rangle$ nos dará en el primer registro el resultado:

$$U_{x_0}|\psi_1\rangle = (\mathbb{1} - 2|x_0\rangle\langle x_0|)|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\sum_{x \neq x_0} |x\rangle - |x_0\rangle \right]$$

y la inversión sobre el promedio nos da:

$$\begin{aligned} |\psi_2\rangle &= DU_{x_0}|\psi_1\rangle = (2|\psi_1\rangle\langle\psi_1| - \mathbb{1}) \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\sum_{x \neq x_0} |x\rangle - |x_0\rangle \right] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\sum_{x \neq x_0} \left(1 - \frac{4}{N}\right) |x\rangle + \left(3 - \frac{4}{N}\right) |x_0\rangle \right] \end{aligned}$$

en donde se ve claramente que para $N = 4$ con una sola iteración ya se puede medir. Si continuamos el siguiente paso nos daría:

$$|\psi_3\rangle = G|\psi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\sum_{x \neq x_0} \left(1 - \frac{12}{N} + \frac{16}{N^2}\right) |x\rangle + \left(5 - \frac{20}{N} + \frac{16}{N^2}\right) |x_0\rangle \right]$$

La expresión general es difícil de compactar con fracciones polinómicas (seguramente habría que hacer uso de las funciones de Chebyshev), pero tiene una expresión trigonométrica particularmente sencilla:

$$\boxed{\frac{1}{\sqrt{N-1}} \cos \left[(2k+1) \arccos \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \right) \right] \sum_{x \neq x_0} |x\rangle + \text{sen} \left[(2k+1) \arccos \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \right) \right] |x_0\rangle}$$

24.8.6. Interpretación geométrica

El estado $|\psi_1\rangle$ se puede separar mediante una base reducida en dos estados ortonormales:

$$|\psi_1\rangle = \sqrt{\frac{N-1}{N}} |x_\perp\rangle + \frac{1}{\sqrt{N}} |x_0\rangle / |x_\perp\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{N-1}} \sum_{x \neq x_0} |x\rangle$$

De forma que U_{x_0} es una simetría respecto a $|x_{\perp}\rangle$ y D es una simetría respecto a $|\psi_1\rangle$ que en este caso tiene la forma:

$$D = 2 \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{N-1}{N}} & \\ & \frac{1}{\sqrt{N}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{N-1}{N}} & \frac{1}{\sqrt{N}} \\ & \frac{1}{\sqrt{N}} \end{pmatrix} - \mathbb{1} = \begin{pmatrix} 1 - \frac{2}{N} & \frac{2\sqrt{N-1}}{N} \\ \frac{2\sqrt{N-1}}{N} & \frac{2}{N} - 1 \end{pmatrix}$$

Por geometría básica se sabe que la composición de dos reflexiones de ejes secantes es un giro de ángulo doble al que forman los ejes. Sea ese ángulo de giro θ , luego el que forman los ejes será la mitad y

$$\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) = \langle x_{\perp} | \psi_1 \rangle$$

luego

$$\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) = \sqrt{\frac{N-1}{N}} \quad y \quad \text{sen}\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{1}{\sqrt{N}}$$

Si llamamos $\gamma = \theta/2$ el estado inicial es

$$|\psi_1\rangle = \cos(\gamma)|x_{\perp}\rangle + \text{sen}(\gamma)|x_0\rangle$$

y la aplicación del algoritmo supone un giro de $\theta = 2\gamma$ en ese plano, es decir

$$|\psi_2\rangle = \cos(3\gamma)|x_{\perp}\rangle + \text{sen}(3\gamma)|x_0\rangle$$

por lo que después de k interacciones tendremos

$$|\psi_{k+1}\rangle = \cos((2k+1)\gamma)|x_{\perp}\rangle + \text{sen}((2k+1)\gamma)|x_0\rangle$$

24.8.7. Cálculo del número óptimo de iteraciones

Es obvio que para rotar completamente el estado $|\psi_i\rangle$ a $|x_0\rangle$ se debe cumplir:

$$\text{sen}[(2k_0+1)\gamma] = 1 \Rightarrow (2k_0+1)\gamma = \frac{\pi}{2} \Rightarrow k_0 = \frac{\pi}{4\gamma} - \frac{1}{2}$$

Expresión que no es entera, y por tanto habrá que aproximar, y aquí es cuando sale la dependencia del algoritmo en cuanto al orden $O(N)$.

$$k_{\text{aprox}} = \left\lfloor \frac{\pi}{4\gamma} \right\rfloor \leq \left\lfloor \frac{\pi}{4\text{sen}(\gamma)} \right\rfloor = \left\lfloor \frac{\pi\sqrt{N}}{4} \right\rfloor$$

Vamos a calcular la probabilidad de fallo, definida como

$$\text{Prob} = \cos^2[(2k_{\text{aprox}}+1)\gamma] = \text{sen}^2\left[\frac{\pi}{2} - (2k_{\text{aprox}}+1)\gamma\right]$$

usando el siguiente hecho

Número de iteraciones aconsejadas con error $1/N$ (0.015625) =6

Numero de elementos 64 (6 qubits)		x_o	
Iteración	0 ->	0.12500	0.12500
Iteración	1 ->	0.11720	0.36719
Iteración	2 ->	0.10210	0.58643
Iteración	3 ->	0.08054	0.76901
Iteración	4 ->	0.05399	0.90354
Iteración	5 ->	0.02406	0.98159
Iteración	6 ->	-0.00736	0.99829
Iteración	7 ->	-0.03833	0.95260

Figura 24.8: Algoritmo de Grover para $N=64$ y $s=1$

$$|k_0 - k_{aprox}| \leq \frac{1}{2} \Rightarrow \left| \frac{\pi}{2} - (2k_{aprox} + 1)\gamma \right| = |(2k_0 + 1)\gamma - (2k_{aprox} + 1)\gamma| =$$

$$= |2\gamma(k_0 - k_{aprox})| \leq \gamma$$

por tanto

$$Prob \leq \text{sen}^2 \gamma = \frac{1}{N}$$

Y por esto la probabilidad de fallo después de $\pi\sqrt{N}/4$ iteraciones es $1/N$. Normalmente además la probabilidad de encontrar el elemento es mayor que esta cota, como se aprecia en la figura 24.8 para 64 elementos, en donde aunque esta probabilidad es de 0.016, en realidad en la iteración recomendada tenemos una amplitud de 0.998, con lo que el margen de error probabilístico es de 0.004.

24.8.8. Dependencia con el número de soluciones

Para introducir la dependencia con el número de soluciones hay que definir los conjuntos:

$$X_0 = \{x/f(x) = 0\}$$

$$X_1 = \{x/f(x) = 1\}$$

de forma que, si s es el número de soluciones

$$|x_{\perp}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N-s}} \sum_{x \in X_0} |x\rangle$$

$$|x_0\rangle = \frac{1}{\sqrt{s}} \sum_{x \in X_1} |x\rangle$$

y por tanto

$$|\psi_1\rangle = \sqrt{\frac{N-s}{N}} |x_{\perp}\rangle + \sqrt{\frac{s}{N}} |x_0\rangle$$

Y de nuevo tendremos la misma interpretación trigonométrica:

$$|\psi_{k+1}\rangle = \cos[(2k+1)\gamma]|x_{\perp}\rangle + \text{sen}[(2k+1)\gamma]|x_0\rangle$$

solo que ahora el ángulo se define como

$$\cos\left(\frac{\theta}{2}\right) = \cos(\gamma) = \langle x_{\perp} | \psi_1 \rangle = \sqrt{\frac{N-s}{N}} \Rightarrow \gamma = \text{arc sen}\left(\sqrt{\frac{s}{N}}\right)$$

Así que por la misma razón ahora el orden de iteraciones va con $O(\sqrt{N/s})$:

$$\left\lfloor \frac{\pi}{4\gamma} \right\rfloor \leq \left\lfloor \frac{\pi}{4\text{sen}(\gamma)} \right\rfloor = \left\lfloor \frac{\pi}{4} \sqrt{\frac{N}{s}} \right\rfloor$$

con una probabilidad de error de s/N .

Casos particulares interesantes son:

1.- $s = 1$. Ya hemos visto que si N es grande:

$$\left\lfloor \frac{\pi}{4\gamma} \right\rfloor \simeq \frac{\pi\sqrt{N}}{4}$$

2.- $s = N/4$. En este caso $\text{sen}(\gamma) = 1/2$ y

$$\left\lfloor \frac{\pi}{4\gamma} \right\rfloor = \left\lfloor \frac{3}{2} \right\rfloor = 1$$

es decir, con una sola iteración se consigue la solución.

3.- $s = N/2$. Entonces $\text{sen}(\gamma) = 1/\sqrt{2}$ luego $\gamma = \pi/4$ y

$$\left\lfloor \frac{\pi}{4\gamma} \right\rfloor = 1$$

pero en este caso la aplicación del algoritmo no mejora la probabilidad de acierto clásica, que sigue siendo $s/N = 1/2$:

$$|\psi_2\rangle = \cos(3\gamma)|x_{\perp}\rangle + \text{sen}(3\gamma)|x_0\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}|x_{\perp}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|x_0\rangle$$

4.- $s > N/2$. A partir de aquí, el número de iteraciones se va haciendo más grande y no se gana respecto al caso clásico, ya que el ángulo de giro cumple:

$$\text{sen}(\theta) = \text{sen}(2\gamma) = 2\text{sen}(\gamma)\cos(\gamma) = \frac{2}{N}\sqrt{s(N-s)}$$

expresión que alcanza su valor máximo en $s = N/2$, con lo que después desciende y por tanto el número de iteraciones será mayor.

De todo esto se deduce que **si a priori no se conoce el número de soluciones el algoritmo no es útil**. En efecto, si por ejemplo $N = 2^{20}$, ya hemos visto que una probabilidad de fallo menor que 2^{-20} nos la darían, para una solución

$$\left\lceil \frac{\pi\sqrt{N}}{4} \right\rceil = 804 \text{ iteraciones}$$

pero si mantenemos este número de iteraciones y resulta que existen $s = 4$ soluciones el error que se comete es muy grande, ya que en este caso deberíamos haber empleado 402 iteraciones, encontrando para el valor 804:

$$\text{sen}\left[1609 \text{arc sen}\left(\frac{1}{512}\right)\right] = -0,000987!$$

cuando teníamos que haber parado en el 402:

$$\text{sen}\left[805 \text{arc sen}\left(\frac{1}{512}\right)\right] = 1$$

No obstante, hay formas de usar el algoritmo de Grover más cuidadosamente cuando uno tiene pistas sobre el número de soluciones (Boyer, Brassard, Hoyer, Tapp, 1996), e incluso un algoritmo de conteo de soluciones mediante la transformada de Fourier (Brassard, Hoyer, Tapp, 1998).

24.8.9. Relación de recurrencia

Para hallar la relación de recurrencia escribimos el estado en la forma:

$$|\psi_{k+1}\rangle = a_k \sum_{x \in X_0} |x\rangle + b_k \sum_{x \in X_1} |x\rangle$$

en donde la semilla es

$$a_0 = b_0 = \frac{1}{\sqrt{N}}$$

Como en cada iteración las amplitudes cambian de signo y se produce la inversión en el promedio, las relaciones recursivas son

$$\begin{aligned} a_{k+1} &= 2M_k - a_k & b_{k+1} &= 2M_k + b_k \\ M_k &= \frac{(N-s)a_k - sb_k}{N} \end{aligned}$$

En forma matricial

$$\begin{pmatrix} a_{k+1} \\ b_{k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{N-2s}{N} & -\frac{2s}{N} \\ \frac{2N-2s}{N} & \frac{N-2s}{N} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}$$

Por inducción se puede demostrar que la solución de este sistema es precisamente el resultado obtenido geoméricamente:

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{N-s}} \cos((2k+1)\gamma) \quad b_k = \frac{1}{\sqrt{s}} \operatorname{sen}((2k+1)\gamma)$$

24.8.10. Generalizaciones

Un artículo de los profesores Galindo y Martín-Delgado de la Universidad Complutense aparecido en *Physical Review* en el 2000, titulado "Family of Grover's quantum-searching algorithm" abrió varias vías de investigación sobre los algoritmos de tipo Grover.

La más evidente es la posible generalización aprovechando el hecho de que

$$|\tilde{x}\rangle \equiv U_{QFT}|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_x |x\rangle = |\psi_1\rangle \Rightarrow |\psi_1\rangle\langle\psi_1| = |\tilde{0}\rangle\langle\tilde{0}|$$

por tanto la inversión sobre la media toma la misma forma matricial en la base de momentos que el cambio de signo en la de coordenadas. Si definimos

$$\bar{P} = |\psi_1\rangle\langle\psi_1| = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & 1 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

en la base transformada toma la forma:

$$\tilde{\bar{P}} = U_{QFT}^{-1} \bar{P} U_{QFT} = |0\rangle\langle 0| \equiv P_0$$

Esto, aparte de abrir el estudio hamiltoniano del sistema que ya se había dado (Farhi, Gutmann, 1998), nos puede inducir a descubrir qué pasaría si se utiliza un proyector sobre otro estado de "momento". Los estudios hechos muestran que el caso concreto encierra toda la esencia del algoritmo, parece que no aportando la generalización nuevos hechos.

En cualquier caso, el artículo aludido se centra en la generalización de los operadores de Grover a operadores de la forma:

$$G = \alpha P + \beta Q, \quad P^2 = P, \quad Q^2 = Q, \quad P + Q = \mathbb{1}$$

definiendo la iteración de Grover como la composición de dos de estas superposiciones de proyectores ortogonales, con el llamado *kernel de Grover*:

$$K = G_2 G_1$$

donde

$$\begin{aligned} G_1 &= \alpha P + \beta Q \\ G_2 &= \gamma \bar{P} + \delta \bar{Q} \end{aligned}$$

con

$$P \equiv |x_0\rangle\langle x_0| = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \cdots & 1^{(x_0)} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

La elección particular de Grover lógicamente es

$$\alpha = -1, \quad \beta = 1, \quad \gamma = -1, \quad \delta = 1, \quad (G_1 = U_{x_0}, \quad G_2 = -D)$$

en general podemos poner

$$G_1 = \beta \mathbb{1} + (\alpha - \beta)P$$

$$G_2 = \delta \mathbb{1} + (\gamma - \delta)\bar{P}$$

que en forma matricial en la base reducida ya estudiada

$$\{|x_0\rangle, |x_\perp\rangle\}$$

toma la forma

$$G_1 = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}$$

$$G_2 = \begin{pmatrix} \delta & 0 \\ 0 & \gamma \end{pmatrix} + \frac{(\gamma - \delta)}{N} \begin{pmatrix} s & \sqrt{s(N-s)} \\ \sqrt{s(N-s)} & -s \end{pmatrix}$$

Pero lógicamente en el kernel cada operador de Grover tendrá una libertad de fase con la que podemos reducir a dos el número de grados de libertad, fijando por conveniencia:

$$\alpha = \gamma = -1$$

con lo que un cálculo fácil nos da la expresión para el kernel en la base reducida:

$$K = \frac{1}{N} \begin{pmatrix} s + \delta(s - N) & -\beta(1 + \delta)\sqrt{s(N-s)} \\ (1 + \delta)\sqrt{s(N-s)} & \beta(s + \delta s - N) \end{pmatrix}$$

La estrategia de generalización se basa en recoger la expresión para la amplitud de probabilidad después de m iteraciones del kernel:

$$\mathcal{A}(x_0) \equiv \langle x_0 | K^m | \psi_1 \rangle$$

entonces, si somos capaces de diagonalizar K en términos de sus autovectores $\{|k_1\rangle, |k_2\rangle\}$ y autovalores $\{e^{i\omega_1}, e^{i\omega_2}\}$ la expresión quedaría más manejable y podríamos sacar conclusiones.

El caso $s = 1$ estudiado en el artículo nos daría un desarrollo:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}(x_0) &\equiv \langle x_0 | K^m | \psi_1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^2 \left\{ |\langle x_0 | k_j \rangle|^2 + \sqrt{N-1} \langle x_0 | k_j \rangle \langle k_j | x_\perp \rangle \right\} e^{im\omega_j} = \\ &= e^{im\omega_1} \left(\frac{1}{\sqrt{N}} + (e^{im\Delta\omega} - 1) \langle x_0 | k_2 \rangle \langle k_2 | \psi_1 \rangle \right) \quad \text{con} \quad \Delta\omega = \omega_2 - \omega_1 \end{aligned}$$

un estudio para $N \rightarrow \infty$ de estos autovectores nos da

$$|k_2\rangle \propto \begin{pmatrix} \frac{\beta-\delta}{1+\delta} \sqrt{N} + O\left(\frac{1}{\sqrt{N}}\right) \\ 1 \end{pmatrix}$$

pero el primer sumando de la primera componente nos daría una probabilidad no convergente, con lo que necesariamente

$$\beta = \delta \neq -1$$

y de este modo se obtiene

$$\mathcal{A}(x_0) \sim \left| \text{sen}\left(\frac{m\Delta\omega}{2}\right) \right|$$

que alcanza su valor máximo en

$$M = \left\lfloor \frac{\pi}{\Delta\omega} \right\rfloor$$

y teniendo en cuenta que la expresión de los autovalores da un comportamiento asintótico cuando $N \rightarrow \infty$ de

$$\Delta\omega \sim \frac{4}{\sqrt{N}} \text{Re}\sqrt{\delta}$$

si parametrizamos el parámetro de Grover como $\delta = e^{i\Phi}$ se tiene la expresión

$$M \sim \left\lfloor \frac{\pi}{4\cos(\Phi/2)} \sqrt{N} \right\rfloor$$

obteniendo por fin una expresión generalizada para la eficacia de los algoritmos tipo Grover. Lógicamente para $\Phi = 0$ recuperamos el principal. Además en el artículo mencionado se hace un estudio de las perturbaciones sobre las condiciones iniciales viendo su estabilidad.

Algo de lógica

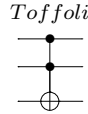
Lógica clásica → irreversible. La puerta NAND de dos bits es universal, ya que

$$\begin{aligned} \neg a &= a \uparrow a \\ a \vee b &= (a \uparrow a) \uparrow (b \uparrow b) \\ a \wedge b &= (a \uparrow b) \uparrow (a \uparrow b) \end{aligned}$$

cuánticamente con puertas lógicas clásicas se necesita un tercer qubit para reproducirla. La análoga cuántica es la puerta de Toffoli o CCNOT (NOT controlado dos veces):

$$U_T = |0\rangle\langle 0| \otimes \mathbb{1} \otimes \mathbb{1} + |1\rangle\langle 1| \otimes U_{CCNOT}$$

y gráficamente

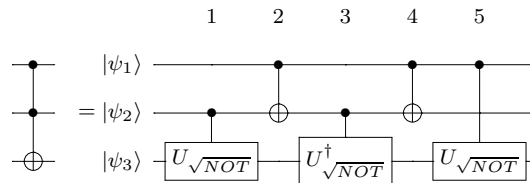


$$(A, B, 1) \xrightarrow{CCNOT} (A, B, A \uparrow B)$$

de esta forma se demuestra que cualquier ordenador cuántico puede hacer lo mismo que uno clásico. PERO puede hacer más cosas...

Lógica cuántica → reversible. La puerta de Toffoli ya no es universal, lo es la puerta de Deutsch (1989) a tres qubits, eminentemente cuántica, de forma que la de Toffoli es un caso particular $D(\pi/2) = U_T$.

Sin embargo, en 1994 David Divicenzo se dio cuenta que usando puertas sin análogo clásico la puerta ternaria de Deutsch se podía simular con puertas binarias, con lo que con solo dos qubits se puede definir la lógica cuántica entera (la clásica reversible y la que no tiene correspondencia clásica, lógicamente también reversible).



$$U_{\sqrt{NOT}} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{i\pi/4} (1 - i\sigma_1) = (1 - i)(1 + iX)/2 = \begin{pmatrix} \frac{1+i}{2} & \frac{1-i}{2} \\ \frac{1-i}{2} & \frac{1+i}{2} \end{pmatrix} = \frac{1+i}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ -i & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} |10\psi_3\rangle &\xrightarrow{1} |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes |\psi_3\rangle \xrightarrow{2} |1\rangle \otimes |1\rangle \otimes |\psi_3\rangle \xrightarrow{3} |1\rangle \otimes |1\rangle \otimes U^\dagger |\psi_3\rangle \\ &\xrightarrow{4} |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes U^\dagger |\psi_3\rangle \xrightarrow{5} |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes \underbrace{UU^\dagger}_1 |\psi_3\rangle = |10\psi_3\rangle \end{aligned}$$

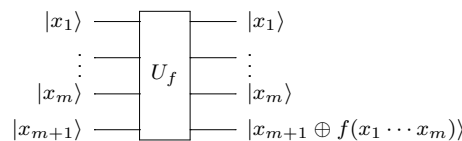
$$\begin{aligned} |11\psi_3\rangle &\xrightarrow{1} |1\rangle \otimes |1\rangle \otimes U |\psi_3\rangle \xrightarrow{2} |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes U |\psi_3\rangle \xrightarrow{3} |1\rangle \otimes |0\rangle \otimes U |\psi_3\rangle \\ &\xrightarrow{4} |1\rangle \otimes |1\rangle \otimes U |\psi_3\rangle \xrightarrow{5} |1\rangle \otimes |1\rangle \otimes U^2 |\psi_3\rangle = |1\rangle \otimes |1\rangle \otimes NOT |\psi_3\rangle \end{aligned}$$

Oráculos

$$|\psi_0\rangle = |\psi_s\rangle \otimes |\psi_t\rangle$$

$$f : \{0, 1\}^m \rightarrow \{0, 1\}$$

$$U_f : |x_1 \cdots x_m\rangle_s |x_{m+1}\rangle_t \rightarrow |x_1 \cdots x_m\rangle_s |x_{m+1} \oplus f(x_1 \cdots x_m)\rangle_t$$



Hadamard

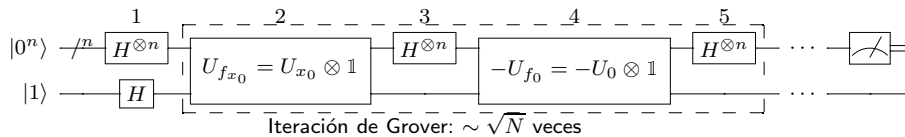
$$\begin{aligned}
 H &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(X + Z) \\
 H|x\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle + (-1)^x|1\rangle) \\
 H \otimes H \otimes \dots \otimes H|00\dots 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2^n}} \sum_{x=0}^{2^n-1} |x\rangle
 \end{aligned} \tag{24.5}$$

Algoritmo de Grover (1996)

Mejora cuadráticamente la búsqueda en bases de datos. Buscamos un elemento x_0 que cumpla una condición $f(x)$:

$$\begin{aligned}
 f_{x_0}(x) : \{0, 1\}^n &\longrightarrow \{0, 1\} / \begin{cases} 1 & \text{si } x = x_0 \\ 0 & \text{si } x \neq x_0 \end{cases} \\
 U_{f_{x_0}}|x\rangle \otimes |y\rangle &= |x\rangle \otimes |y \oplus f_{x_0}(x)\rangle
 \end{aligned}$$

La estrategia es primero poner todo el catálogo en un solo estado superposición con operadores de Hadamard y después aplicar reiteradamente el operador de Grover que hace dos cosas: primero localiza e invierte mediante el oráculo la componente que cumple la condición (**cambio de signo**) y después aumenta la probabilidad de esa y disminuye las de las demás (**inversión sobre el promedio** o difusión) de forma que haya garantías de medir el resultado correcto al final (el buen programador cuántico mide al final:-)



Partimos de un estado entrante de la forma:

$$|\Psi_0\rangle = |0^n\rangle \otimes |1\rangle$$

y al pasar por las puertas de Hadamard se tiene:

$$|\Psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle - |1\rangle)$$

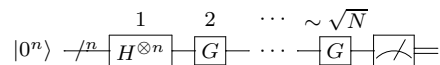
Como a partir de aquí el segundo registro no se va a modificar, es útil trabajar sólo con el primero y empezar con el estado:

$$|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{x=0}^{N-1} |x\rangle$$

y estudiar su evolución bajo las iteraciones del operador de Grover:

$$G = (2|\psi_1\rangle\langle\psi_1| - \mathbb{1})(\mathbb{1} - 2|x_0\rangle\langle x_0|) = DU_{x_0}$$

y de esta forma también podemos simplificar su representación gráfica:



donde

$$G = U_{x_0} H^{\otimes n} - U_0 H^{\otimes n}$$

Por tanto la primera reflexión respecto a $|x_0\rangle$ nos dará en el primer registro el resultado:

$$U_{x_0}|\psi_1\rangle = (\mathbb{1} - 2|x_0\rangle\langle x_0|)|\psi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\sum_{x \neq x_0} |x\rangle - |x_0\rangle \right]$$

y la inversión sobre el promedio nos da:

$$\begin{aligned}
 |\psi_2\rangle &= DU_{x_0}|\psi_1\rangle = (2|\psi_1\rangle\langle\psi_1| - \mathbb{1}) \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\sum_{x \neq x_0} |x\rangle - |x_0\rangle \right] = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{N}} \left[\sum_{x \neq x_0} \left(1 - \frac{4}{N}\right) |x\rangle + \left(3 - \frac{4}{N}\right) |x_0\rangle \right]
 \end{aligned}$$

Parte VII
EL RELICARIO

La historia es la ciencia más fundamental porque todo conocimiento humano pierde su carácter científico cuando los hombres olvidan las condiciones en las que se originó, las preguntas que venía a contestar y las funciones al servicio de las cuales se creó.

E.Schrodinger [20]

Capítulo 25

PAUL EHRENFEST (1880-1933)



25.1. Introducción

Las fuentes de donde he sacado esta biografía han sido:

- i) Franco Selleri. *El debate de la teoría cuántica*. Alianza Universidad, Madrid, 1986
- ii) L.I. Ponomarev *Bajo el signo del cuanto*. MIR-Rubiños, Madrid, 1992

Asimismo he consultado su entrada en la Wikipedia:

http://es.wikipedia.org/wiki/Paul_Ehrenfest.

25.2. Biografía

Además de los profetas a la ciencia le hacen falta apóstoles. Además de genios aislados que cambian el cauce de la ciencia, ésta necesita personas que guarden su fuego y sean capaces de encenderlo en las almas de los neófitos. Semejantes personas crean en torno suyo un ambiente de belleza intelectual y de auge espiritual, en el cual comienzan a florecer impetuosamente los talentos y se afianzan las dotes.

A este tipo de personas pertenecía *Paul Ehrenfest*. Nació y creció en Viena, estudió en la universidad de su ciudad natal, siendo discípulo de Ludwig Boltzmann, y en la de Gotinga bajo la dirección de Felix Klein.

Perdió su fe religiosa a los 12 años y cogió una gran afición a argumentar con agudeza sobre lo disparatado y falso de todas las religiones organizadas. Sus lecturas fueron amplias e incluían a Schopenhauer, Nietzsche, Bergson y Marx. Cabe muy poca duda de que en política tenía ideas progresistas, a juzgar por el entusiasmo con el cual recibió las noticias revolucionarias rusas.

Después de terminar sus estudios vivió cinco años en Rusia y en 1912, a petición de Lorentz, reemplazó a este último en la cátedra de física teórica de la Universidad de Leyden. Poco antes había tenido ya la oportunidad de transformarse en el sucesor de Einstein en la Universidad de Praga, pero se interponía, no obstante, un obstáculo: en el imperio Austro-Húngaro no se podía ser profesor sin tener una afiliación religiosa. Se trataba de un asunto meramente formal, que Einstein mismo había cumplido con anterioridad a pesar de carecer de compromisos religiosos desde hacía más de una década. Sin embargo, Ehrenfest rechazó ajustarse a este requisito, con el sentimiento de que habría sido una hipocresía declarar su judaísmo con el único objeto de poder ser candidato a profesor universitario. Este hecho ilumina un rasgo característico de la personalidad de Ehrenfest que le guió tanto a través de su vida privada como de su investigación: su completa honestidad. Por esta razón sus colegas le consideraban: "**la conciencia de la física**" y sintió más que ninguna otra persona "en lo profundo de su corazón el drama de la física contemporánea", como escribió Langevin en 1933.

Ehrenfest se suicidó en Amsterdam en 1933, después de disparar a su hijo Vassily (que padecía síndrome de Down). En relación con esto Einstein escribió que, a menudo, Ehrenfest se había sentido incapaz para las tareas de investigación, y que este sentimiento solía deprimirle. "En los últimos años", añade Einstein, "esta situación se agravó por el desarrollo extrañamente turbulento que recientemente había sufrido la física teórica. Aprender y enseñar cosas que uno no puede aceptar por completo en su corazón es siempre un asunto complicado, y de doble complicación para una mente de fanática honestidad, una mente para la cual la claridad lo era todo... No sé cuántos lectores de estas líneas serán capaces de captar cumplidamente esta tragedia. Y sin embargo fue ella la que ocasionó, en primer lugar, su fuga de la vida".

25.3. Aportaciones científicas

Einstein y Ehrenfest creían en una realidad objetiva inteligible para el hombre y en las leyes causales, y se opusieron de forma enérgica a la mecánica cuántica; Born y Bohr fueron los creadores de las concepciones más importantes contrarias a la causalidad y a la inteligibilidad, e incluso limitaron de un modo considerable la relevancia del concepto de realidad física. El caso de Schrodinger era más complicado, aunque rechazaba también la síntesis cuántica elaborada por Bohr. Todos ellos se opusieron al nazismo, aunque tenían diferentes opiniones políticas.

Ehrenfest dirigía seminarios los martes en la Universidad de Leyden en donde intervenían los grandes científicos de la época. Allí nació y se consolidó la hipótesis sobre **el spin del electrón**, y Ehrenfest fue su impulsor. También intervino como iniciador y organizador de la famosa polémica entre Bohr y Einstein.

Paul Ehrenfest dejó tras de sí ideas físicas que sobrevivieron la memoria de sus discípulos y amigos. Tendió un puente sobre el abismo que en la mente de sus contemporáneos separaba los fenómenos cuánticos de los clásicos por medio del conocido **teorema de Ehrenfest**. En ello radica la esencia del *principio de correspondencia* que en 1918 formuló Niels Bohr y en 1927 demostró Paul Ehrenfest.

Como profesor de la Universidad de Leiden en Holanda, Ehrenfest aplica un poco el pragmatismo estadounidense que asimiló en sus viajes a América, y crea un enlace entre los académicos y los ingenieros en pro del desarrollo industrial del país. El laboratorio experimental de la empresa Philips, por ejemplo, fue alimentado por alumnos de Leiden.

Asimismo, gradúo a varios físicos que resultaron valiosos no sólo en el campo de la física. Por ejemplo, Jan Tinbergen, alumno de Ehrenfest, aplicó conceptos de la termodinámica a la economía y se hizo acreedor al primer Premio Nobel de Economía en 1969.

Capítulo 26

MAX BORN (1882-1970)



26.1. Introducción

La fuente principal de la que he sacado la biografía de Born ha sido el magnífico libro de Franco Selleri, *El debate de la teoría cuántica*, en la edición al castellano de Miguel Ferrero en Alianza, Madrid 1986 [22]. Asimismo he consultado su entrada en la Wikipedia:

http://en.wikipedia.org/wiki/Max_Born

26.2. Biografía

Max Born nació en Breslau, Alemania (hoy Wrocław, Polonia) en 1882. Su padre era especialista en anatomía y embriología y su madre procedía de una rica familia de industriales silesios. Estudió en la Universidad de Breslau desde 1904, pasando, no obstante, dos semestres en Heidelberg y Zurich. De 1904 a 1906 permaneció en Gotinga donde fue alumno de los famosos matemáticos Felix Klein, Hilbert y Minkowsky. Obtuvo su grado de doctor en 1906 con una tesis sobre matemáticas dirigida por Hilbert. En los años siguientes trabajó en diferentes universidades adquiriendo una gran capacidad en matemáticas y física teórica, y en 1921 fue nombrado catedrático de física teórica en la Universidad de Gotinga. Teniéndole a él como teórico, y a James Franck (autor del famoso experimento Franck-Hertz) como físico experimental, esa universidad prosperó y se transformó con suma rapidez en uno de los centros principales de investigación en física. Baste con decir que en esa época trabajaron en Gotinga muchos físicos famosos: K.T. Compton, Condon, Blackett, von Hippel, Houtermans, Rabinowitsch, etc., entre los experimentales; y Pauli, Heisenberg, Fermi, von Neumann, Wigner y Dirac entre los teóricos. De los múltiples discípulos de Max Born, los más famosos fueron: Delbruck, Elsasser, Jordan, Maria Goeppert-Mayer, Nordheim, Oppenheimer y Weisskopf. En 1933 los nazis le destituyeron por motivos raciales y le forzaron a emigrar de Alemania. Se marchó al Reino Unido, primero a Cambridge (1933-1936) y después a Edimburgo (1936-1952). En 1954 se retiró a Bad Pyrmont (Alemania), en donde pasó el resto de su vida.

En 1954, le fue el concedido el premio Nobel a Max Born por sus investigaciones en física cuántica.

Born fue uno de los firmantes en 1955 del manifiesto Russell-Einstein, un escrito pacifista contra la proliferación de armas de destrucción masiva (por aquel entonces las nucleares).

Murió en Gotinga y está enterrado en el mismo cementerio que Hilbert, Planck, Weber, von Laue o Nernst.

26.3. Aportaciones científicas

Born fue, junto con Bohr y Heisenberg, uno de los pocos físicos que construyó la estructura filosófica de la mecánica cuántica. Su principal contribución fue, como se sabe, la interpretación probabilística de las ondas de Schrodinger, una interpretación que sitúa el concepto de probabilidad en el papel principal y deja ampliamente indeterminado el comportamiento de un sistema individual, abriendo así el camino a una descripción acausal. No fue por coincidencia por lo que Born empezó a considerar la idea de acausalidad en física ya en 1920, mucho antes incluso de interesarse por la teoría cuántica.

Las ideas de Born relativas a la naturaleza de la física eran opuestas a las de Einstein, y lo admitía con franqueza cuando escribía sobre sus disputas científicas: "Se trata, en realidad, de una diferencia fundamental en la concepción de la naturaleza". Einstein, por su parte, asentía en una carta a Born: "...En nuestras perspectivas científicas nos hemos vuelto antípodas. Tú crees en el Dios que juega a los dados y yo creo en la ordenación total y en las leyes de un mundo que existe objetivamente y que trato de captar en una forma frenéticamente especulativa".

Born aceptó sin reservas el principio de complementariedad de Bohr; la frase siguiente expresa esa afirmación con la suficiente claridad: "...el desarrollo de la física moderna ha enriquecido nuestro pensamiento con un principio nuevo de importancia fundamental: la idea de complementariedad". Esto hace comprensibles y hasta naturales las opiniones pesimistas que Born tenía con respecto a nuestras posibilidades de comprender el mundo físico: "Hemos llegado al final de nuestro viaje por los abismos de la materia. Buscábamos un suelo firme y no lo hemos encontrado. Cuanto más profundamente penetramos, tanto más inquieto, más incierto y más borroso se vuelve el Universo".

Totalmente coherente con sus ideas, Born también consideró con detalle el determinismo clásico, y en un artículo titulado *Is Classical Mechanics in fact deterministic?*, publicado en 1955, presentó un estudio de un gas propuesto por Lorentz como el movimiento de esferas duras en un plano, de forma que un pequeño cambio en las condiciones iniciales alteraría considerablemente la trayectoria de una partícula en el gas. Born concuyó que tampoco el determinismo asociado con la mecánica clásica era real.

Capítulo 27

ETTORE MAJORANA (1906-?)



27.1. Introducción

La fuente principal en la que me he inspirado para esta biografía ha sido el libro de Leonardo Sciasca, *La desaparición de Majorana*[21]. Asimismo he consultado las entradas en Internet:

http://en.wikipedia.org/wiki/Ettore_Majorana
<http://www.historiasdelaciencia.com/?p=34>
<http://www.lnds.net/blog/2012/04/el-extrano-caso-de-ettore-majorana.html>

27.2. Biografía

"Treinta y un años, 1,70 de estatura, delgado, moreno de pelo, ojos oscuros, larga cicatriz en el dorso de la mano. Se ruega a quien sepa algo se dirija al reverendo padre Marianecci, Viale Regina Marguerita, 66, Roma".

Este es el anuncio que apareció en la sección de desaparecidos del suplemento semanal italiano *La Domenica del Corriere* el 17 de julio de 1938. Y es que desde que nuestro protagonista cogió el barco correo de Nápoles a Palermo el 25 de Marzo, y a pesar de que el día después mandó una carta desde Palermo en donde se entendía su regreso en el mismo barco, nadie lo volvió a ver.

Ettore Majorana había nacido en Catania, Sicilia, el 5 de agosto de 1906. Era el menor de cinco hermanos en el seno de una familia acomodada y de buena tradición cultural y científica (su padre también era físico y sus tíos grandes juristas, estadistas y diputados). Religioso, fue alumno en el colegio jesuita Massimo de Roma. Estudió el Bachillerato de letras obteniendo el título en 1923. En Roma cursó la carrera de ingeniería hasta el penúltimo curso cuando, aconsejado por su amigo Emilio Segrè y tras una entrevista con Enrico Fermi, se pasó a la física a principios de 1928. En 1933 consigue una beca y viaja a Alemania y a Dinamarca conociendo a Heisenberg, con quien le unió una buena amistad, y a Bohr. En 1935 fue nombrado catedrático de física teórica de la Universidad de Nápoles.

Dicen los que le conocieron que Majorana estaba dotado de un talento excepcional para la física. El mismo Fermi después de su desaparición le llegó a comparar con Galileo o Newton, pero desgraciadamente no nos ha dejado la obra suficiente para poder confirmar este punto. Lo único que se puede decir a juzgar por los escritos de sus familiares es que fue un niño precoz al que le solían hacer las típicas encerronas de cálculo para que averiguara el resultado de tal o cual operación. Evidentemente su talento se vio más tarde reforzado por el hecho de trabajar al lado de Fermi y el llamado *Grupo de Roma*, también llamados *Los chicos de la Vía Panisperna* (por encontrarse el departamento de física de la Universidad de la Sapienza de Roma en esta calle), que había formado este a su alrededor.

A Majorana no le ayudó mucho su carácter. Tímido, reservado e introvertido, algunos le consideraban directamente un neurótico. Huía de las demostraciones de talento que le rodeaban y a menudo ocultaba brillantes ideas físicas al resto. De hecho se dice que los cuatro años anteriores a su desaparición salía poco de casa, aquejado según algunos de "agotamiento nervioso". Según su hermana Ettore solía decir que los físicos "van por mal camino", y algunos relacionan este hecho con la liberación inminente del poder de la energía atómica. En ese tiempo sólo publica dos artículos, y uno de ellos no era de física, sino de filosofía. Publicado cuatro años después de su desaparición, extraemos un fragmento que muestra la visión que tenía de por dónde debían tirar las ciencias sociales:

"...desde el punto de vista estrictamente científico, nada nos impide considerar plausible la idea de que el origen de ciertos acontecimientos humanos pueda consistir en un hecho vital sencillo, invisible e imprevisible. Si así fuera, como creemos, las leyes estadísticas en ciencias sociales resultarían de gran provecho, pues además de determinar empíricamente la resultante de un gran número de causas desconocidas, describirían la realidad de manera inmediata y concreta. Saber interpretarlas requiere de un arte especial, que no debería desdeñar el buen gobernante".

Para Sciascia, en aquellos tiempos Majorana se comportaba básicamente como una persona asustada. Recordemos que vivía en plena Italia fascista y eran tiempos de gran tensión económica, pero aparte de ello la física vivía un momento de vorágine especial con la teoría atómica. La relación de Majorana con las ideas fascistas sólo se puede entrever por su estrecha relación con Heisenberg y su opinión al respecto de la "revolución nazi":

"La población de Leipzig, que era mayoritariamente socialdemócrata, ha aceptado la revolución sin problemas. (...) La mayoría aria se felicita de la persecución de los judíos. El número de personas que encontrarán empleo en la administración pública y en numerosas empresas privadas tras la expulsión de los judíos no es nada desdeñable, de ahí la gran popularidad de la lucha antisemita. (...) Con todo eso creo que el Gobierno no hace sino responder a una necesidad histórica: hacer hueco a una nueva generación que de otro modo se asfixiaría en el actual marasmo económico".

quizá demasiado poco para tacharle de fascista como se ha sugerido en alguna fuente, ya que en esa época era muy complicado rechazar abiertamente las ideas imperantes.

En cuanto a su desaparición, parece que hay tres teorías sobre la mesa: suicidio, convento o huída a Argentina. En cualquier caso es un hecho que fue premeditada, ya que escribió una carta a Carrelli, director del Instituto de Física de Nápoles, y otra a su familia, que en efecto puede interpretarse como la antesala del suicidio:

"Sólo os pido una cosa: no vistáis de negro, y, si es por seguir la costumbre, poneos sólo alguna señal de luto, pero no más de tres días. Luego, si podéis, recordadme con vuestro corazón y perdonadme".

La familia no admitió sin embargo esta hipótesis, como se puede ver en la carta que la madre de Ettore escribió a Mussolini:

"Fue siempre una persona juiciosa y equilibrada y por eso el drama de su alma y sus nervios parece un misterio. Pero una cosa es cierta, y así lo dirán todos sus amigos, su familia y yo misma, que soy su madre: nunca dio muestras de trastorno psíquico o moral como para que podamos pensar que se suicidó; al contrario, lo tranquilo y riguroso de su vida y sus estudios no permite, incluso lo prohíbe, creer que fuera otra cosa que una víctima de la ciencia".

En contra de su suicidio también está el hecho de que días antes retiró el importe de las pagas de los meses de octubre a febrero que había dejado acumularse, y a principios de año le había dicho a su madre que le enviara todo su dinero.

En cuanto a las hipótesis del convento y Argentina, la primera se basa en la respuesta que dio al anuncio del periódico un religioso de un convento de jesuitas que creyó haberlo visto indagando sobre el retiro en uno de estos monasterios, y la segunda, la más factible, está apoyada por varias pistas independientes. En 1950, el físico chileno Carlos Rivera vivió en Buenos Aires y se alojó temporalmente en la casa de una anciana. Por casualidad, la anciana descubrió el nombre de Majorana entre los papeles, y contó que su hijo conocía a un hombre con ese apellido, pero que ya no se desempeñaba en el campo de la física, sino en el de la ingeniería. Aparte, en 1970, el escritor guatemalteco Miguel Ángel Asturias dijo que en la década de 1960 conoció a un físico llamado Ettore Majorana que era muy íntimo amigo de una matemática llamada Eleonora. Sin embargo, esta falleció y sus hermanas, tal vez por haber prometido silencio al físico, se negaron a revelar nada. En cualquier caso nunca sabremos dónde Ettore acabó su tiempo.

27.3. Aportaciones científicas

Ettore Majorana se doctoró bajo la dirección de Enrico Fermi con el trabajo: *La teoría cuántica de los núcleos radiactivos*, con el que obtuvo sobresaliente *cum laude*. En total escribió nueve artículos, pero, aparte de sus contribuciones a la aplicación del modelo estadístico de Fermi a la espectroscopía, por lo que ha pasado a la historia de la física teórica es sobre todo por dos conceptos: la ecuación de Majorana y el fermión de Majorana.

Ecuación de Majorana: Se trata de un artificio que proporciona una formulación equivalente a la ecuación de Dirac que permite una representación real del grupo de Lorentz, y requiere que las partículas en juego sean neutras para la conservación de la carga.

http://en.wikipedia.org/wiki/Majorana_equation

Fermión de Majorana: Se trata de fermiones que son sus propias antipartículas. Que el neutrino sea una partícula de esta naturaleza es una hipótesis que se baraja desde hace tiempo. Además, los fermiones de Majorana son unos de los posibles candidatos a materia oscura, y por tanto se intentan encontrar desde hace tiempo.

http://en.wikipedia.org/wiki/Majorana_fermion

Signatures of Majorana Fermions in Hybrid Superconductor-Semiconductor Nanowire Devices

Aparte, una de las anécdotas más sabrosas de su vida científica fue que parece ser que Majorana fue el primero en desarrollar un modelo nuclear de protones y neutrones (término que él sugirió) a partir de los experimentos de los Curie-Joliot acerca del "protón neutro". Aunque Fermi le animó a publicar sus resultados nunca lo hizo, y más adelante lo desarrolló Heisenberg y concederían el premio Nobel a James Chadwick por el descubrimiento del neutrón.

Capítulo 28

JOSEPH ROTBLAT (1908-2005)



28.1. Introducción

La fuente principal en la que me he inspirado para esta biografía ha sido el libro de Freeman Dyson, *El científico rebelde*, Barcelona 2010 [4]. Asimismo he consultado las entradas en Internet:

http://es.wikipedia.org/wiki/Jozef_Rotblat
http://enciclopedia.us.es/index.php/Joseph_Rotblat

28.2. Biografía

Durante el proyecto Manhattan, en Los Álamos los científicos británicos y estadounidenses estaban tan inmersos en la carrera para producir una bomba, que no se les ocurrió parar cuando sus competidores del equipo alemán la abandonaron. En 1944, cuando quedó claro que no habría bomba alemana, sólo uno de entre todos los científicos de Los Álamos abandonó la competición. Aquel hombre era Joseph Rotblat.

Rotblat nació en Varsovia (Polonia) en el seno de una familia de comerciantes judíos del transporte en carruajes que se vio arruinada por la Primera Guerra Mundial. Hubo de trabajar como electricista y formarse de manera autodidacta hasta que consiguió ingresar en la Universidad Libre de Polonia, donde se graduó en 1932 y fue Director Asistente del Instituto de Física Atómica (1937-1939). Simultáneamente fue investigador del Laboratorio Radiológico de la Sociedad Científica de Varsovia (1933-1939).

Rotblat prosiguió sus estudios en la Universidad de Varsovia, donde se doctoró en 1938. Al año siguiente se trasladó a la Universidad de Liverpool en donde obtuvo la beca Oliver Lodge. Su mujer, Tola Gryn, que no lo acompañó por encontrarse convaleciente, quedó atrapada por la invasión nazi de Polonia y murió en el gueto de Varsovia. Al finalizar la Segunda Guerra Mundial, el gobierno británico identificó a varios parientes de Rotblat que habían sobrevivido al Holocausto (su madre y tres de sus hermanos) y facilitó su reencuentro en el Reino Unido. En 1946 adquirió la ciudadanía británica.

Como contribución a la lucha contra el nazismo, Rotblat participó en el proyecto Tube Alloys de la Universidad de Liverpool y en el Proyecto Manhattan de desarrollo de la bomba atómica, pero al enterarse de que existía el propósito ulterior de afirmar la superioridad estadounidense sobre la Unión Soviética, una vez confirmado el hecho de que los alemanes iban a ser incapaces de su desarrollo, abandonó el proyecto. Esto le valió el mote de espía y tener prohibida la entrada a los Estados Unidos hasta la década de 1960.

Tras dejar el Proyecto Manhattan, Rotblat se reintegró a la Universidad de Liverpool, donde llegó a ser director de investigación en Física Nuclear. Más tarde fue nombrado profesor de Física en el Hospital Universitario St Bartholomew de la Universidad de Londres (1950-1976), orientando su trabajo hacia aplicaciones médicas. Fue nombrado Profesor Emérito de dicha universidad.

Fue el fundador en 1948 de la Asociación Británica de Científicos Nucleares (BASA), que reunió a una amplia gama de investigadores preocupados por la aplicación militar de la tecnología nuclear.

En 1955 Rotblat fue el signatario más joven del Manifiesto Russell-Einstein contra las armas atómicas, presentando el documento al público junto con Bertrand Russell, y participó más tarde en la organización de la Conferencia Pugwash, un mecanismo de colaboración entre los científicos de ambos lados de la cortina de hierro. Fue su secretario general (1957-1973), presidente del Directorio del capítulo británico (1978-1988) y presidente mundial de la organización (1988-1997).

28.3. Aportaciones científicas

No es Rotblat un físico al que conozcamos preeminentemente por su contribución científica. Sus mayores logros en Física Fundamental los obtuvo en la Universidad de Liverpool junto a James Chadwick, estudiando la energía de los neutrones liberados en la fusión del átomo de uranio.

En la Universidad de Londres, su trabajo en Física Médica se centró en el efecto de la radiación sobre el organismo humano: radioterapia y radiobiología. Ocupó el cargo de editor de la revista *Physics in Medicine and Biology* y fue presidente del Instituto Británico de Radiología. Esta especialización le permitió volver a tomar contacto con el desarrollo de armas nucleares, cuando tuvo oportunidad de revisar los datos que mostraban el efecto de uno de los primeros ensayos de la bomba de hidrógeno en la tripulación de una nave japonesa que se vio afectada.

Sin embargo, a Rotblat siempre se le recordará por ser uno de los físicos que más ha contribuido a la historia del pacifismo nuclear y la ética investigadora. Muy mercedamente fue galardonado con el premio Nobel de la Paz en 1995. No obstante, como bien apunta Freeman Dyson [4], de haber estado en el momento oportuno en el lugar oportuno quizás su contribución hubiera sido mayor.

En efecto, el verano de 1939 fue el momento en el que se podría haber emprendido una acción decisiva para anticiparse a la fabricación de armas atómicas. Unos meses antes, en enero, se había celebrado un encuentro de físicos en la Universidad George Washington en donde Bohr y Enrico Fermi llevaron desde Europa las noticias sobre la fisión nuclear. Durante los meses posteriores Bohr y John Wheeler se dedicaron a desarrollar la teoría en Estados Unidos; la posibilidad de una reacción de fisión en cadena quedó confirmada mediante experimentos realizados en distintos países; entre otros, Rotblat lo hizo en Polonia, y Yakov Zeldovich y Yuli Khariton desarrollaron la teoría en Rusia. Todavía no era nada secreto, todos estos trabajos se comentaron abiertamente y se publicaron con rapidez. Los protagonistas de todos los países (Bohr, Einstein, Fermi, Werner Heisenberg, Piotr Kapitsa, Khariton, Igor Kurchatov, Frederic Joliot, Rudolf Peierls y J. Robert Oppenheimer) tenían aún libertad para hablar entre ellos y elegir una línea de acción común. Quizás un libro de estilo ético similar al que emprendieron los biólogos cuando años después se descubrió la recombinación del ADN, en la declaración de Asilomar.

Nadie se atrevió, estaban más preocupados, como dejaron claro en la anterior conferencia Bohr y Fermi, en absurdos debates sobre el mérito científico y las anticipaciones de unos u otros sobre ciertas ideas. Aunque esto es pura especulación de Dyson en su libro, desgraciadamente el único que quizás podemos pensar que hubiera emprendido esta tarea era Joseph Rotblat, que lamentablemente se encontraba todavía en Polonia cuando los físicos se reunieron en Estados Unidos y hablaron de la posibilidad de crear armamento nuclear.

Capítulo 29

SIDNEY RICHARD COLEMAN (1937-2007)



29.1. Introducción

Las fuentes bibliográficas principales de las que he sacado esta biografía son:

- http://en.wikipedia.org/wiki/Sidney_Coleman
- http://ptonline.aip.org/journals/doc/PHTOAD-ft/vol_61/iss_5/69_1.shtml?bypassSSO=1 (obituario de Coleman escrito por Sheldon Glashow en Physics Today)
- <http://www.math.columbia.edu/~woit/wordpress/?p=620>
- <http://betsydevine.com/blog/2007/11/20/our-friend-sidney-coleman-has-left-the-planet/>

29.2. Biografía

Si no es más conocido por el gran público no especializado pero curioso de la física, es porque Sidney Coleman era un erudito conocedor del formalismo de las teorías cuánticas y de sus entresijos, más que un ponente de nuevas ideas o un revolucionario. El anecdotario de Coleman es sabroso; su fino humor, proverbial; y sus lecciones de física, un monumento didáctico. Coleman representa posiblemente la cumbre de la fe en el formalismo cuántico y su potencia para explicar el mundo.

Coleman se crió en el *Far North Side* de Chicago, donde había nacido. Se licenció en 1957 en el Illinois Institute of Technology. Se doctoró en el 62 en Caltech y de allí fue a Harvard, donde se quedó para siempre. Conoció a la que sería su mujer, Diana, a finales de los 70 y se casó en 1982. Era un apasionado de la ciencia ficción, y dicen los que lo conocieron que su erudición era apabullante también en este terreno.

En una reedición de la famosa frase de Newton “Si he podido ver más allá que otros es porque me he aupado a espaldas de gigantes”, Coleman socarronamente declaró: “Si he podido ver más allá que otros es porque he permanecido en pie tras las espaldas de enanos”. Coleman definió la física teórica como “el estudio sistemático del oscilador armónico”. Fumador empedernido, trasnochador impenitente (era sobradamente conocido que no se podía esperar que Coleman se personase en sitio alguno antes de las 12 del mediodía), Coleman encontró un fin prematuro a causa de la enfermedad de Parkinson.

29.3. Aportaciones científicas

Teorema de Coleman-Mandula: Es un famoso teorema de imposibilidad que asegura que no es posible extender la simetría del espaciotiempo (grupo de Poincaré) y las simetrías de gauge globales (simetrías que mezclan entre sí las partículas de los multipletes del modelo estándar) a un grupo más general del que ambas sean subgrupos, a no ser que tal embebimiento sea trivial (producto directo en cada punto de ambos grupos). El intento más serio de superar la importante objeción de Coleman y Mandula se llama supersimetría, y es un viejo sueño de la física teórica desde los tiempos de Kaluza y Klein (1923) unificar el espacio de las cargas (un espacio de identidades, por así decirlo) con el espaciotiempo (un espacio habitáculo o *background*, en otras palabras).

Acceso al artículo original del *Physical Review* del año 1967:

http://iktp.tu-dresden.de/Lehre/SS2009/SUSY/literatur/coleman_madula_p1251_1.pdf

Diagramas renacuajo (*tadpoles*): Diagramas de Feynman con un solo bucle que contribuyen a las llamadas funciones de correlación a un punto.

Teorema de Mermin-Wagner o **teorema de Coleman**: Las simetrías continuas no pueden sufrir ruptura espontánea a temperatura finita en sistemas con interacciones de suficientemente corto alcance en dimensión espacial $d \leq 2$. Esto implica que para estos sistemas, las fluctuaciones de largo alcance están entrópicamente favorecidas.

Q-bolas: Se trata de cierto tipo de soluciones de ecuaciones de teorías de campos (solitones no topológicos <http://en.wikipedia.org/wiki/Q-ball>)

Potencial de Coleman-Weinberg: http://en.wikipedia.org/wiki/Coleman-Weinberg_potential

Análisis semiclásico de la evolución del falso vacío: La posibilidad de que el espaciotiempo pueda evolucionar a un mínimo más favorable (auténtico vacío) por efecto túnel a través de una barrera energética.

[http://eknigu.com/info/_Papers/Physics/Coleman %20S., %20De %20Luccia %20F. %20Gravitational %20effects %20on %20and %20of %20vacuum %20decay %20\(PRD %202021, %20p3305, %201980\)\(600dpi\)\(T\)\(11s\).djvu](http://eknigu.com/info/_Papers/Physics/Coleman%20S.,%20De%20Luccia%20F.%20Gravitational%20effects%20on%20and%20of%20vacuum%20decay%20(PRD%202021,%20p3305,%201980)(600dpi)(T)(11s).djvu)

[http://eknigu.com/info/_Papers/Physics/Callan, %20Coleman. %20Fate %20of %20the %20false %20vacuum %20I. %20First %20quantum %20corrections %20\(PRD %2016, %201977\)\(600dpi\)\(T\)\(7s\).djvu](http://eknigu.com/info/_Papers/Physics/Callan,%20Coleman.%20Fate%20of%20the%20false%20vacuum%20I.%20First%20quantum%20corrections%20(PRD%2016,%201977)(600dpi)(T)(7s).djvu)

[http://eknigu.com/info/_Papers/Physics/Coleman. %20Fate %20of %20the %20false %20vacuum.. %20semiclassical %20theory %20\(PRD %2015, %201977\)\(600dpi\)\(T\)\(9s\).djvu](http://eknigu.com/info/_Papers/Physics/Coleman.%20Fate%20of%20the%20false%20vacuum..%20semiclassical%20theory%20(PRD%2015,%201977)(600dpi)(T)(9s).djvu)

Un estudio revelador de diversas propiedades de la ecuación de seno-Gordon: http://en.wikipedia.org/wiki/Sine-Gordon_equation

Apéndices

Apéndice A

Cálculo de la métrica Robertson-Walker con *Mathematica*

```
G = {{1, 0, 0, 0}, {0, -(R[t])^2/(1 - kr^2), 0, 0}, {0, 0, -(R[t])^2r^2, 0}, {0, 0, 0, -(R[t])^2r^2(Sin[theta])^2}};
F = {{1, 0, 0, 0}, {0, -(1 - kr^2)/(R[t])^2, 0, 0}, {0, 0, -1/((R[t])^2r^2), 0}, {0, 0, 0, -1/((R[t])^2r^2(Sin[theta])^2)}};
x0 = t;
x1 = r;
x2 = theta;
x3 = phi;
m = 0;
While[m < 4,
j = 0;
While[j < 4,
i = 0;
While[i < 4,
Gamma[m, j, i] = 1/2 Sum[n=0, 3] (F[[m + 1, n + 1]] (Dx_i G[[n + 1, j + 1]] + Dx_j G[[n + 1, i + 1]] - Dx_n G[[j + 1, i + 1]])) //FullSimplify;
Print [m, j, i, "=", Gamma[m, j, i];
i++;
j++;
m++;
m = 0;
While[m < 4,
j = 0;
While[j < 4,
Rie[j, m, j, m] = Dx_j Gamma[j, m, m] - Dx_m Gamma[j, m, j] + Sum[i=0, 3] Gamma[j, j, i] Gamma[i, m, m] - Sum[i=0, 3] Gamma[j, m, i] Gamma[i, m, j] //FullSimplify;
j++;
Ricm, m = Sum[i=0, 3] Rie[i, m, i, m] //FullSimplify;
Print [m, m, "=", Ricm, m];
m++;
Ricci = F[[1, 1]] Ric0, 0 + F[[2, 2]] Ric1, 1 + F[[3, 3]] Ric2, 2 + F[[4, 4]] Ric3, 3 //FullSimplify;
Print ["Ricci=", Ricci]
000 = 0
```

001 = 0
 002 = 0
 003 = 0
 010 = 0
 011 = $\frac{R[t]R'[t]}{1-kr^2}$
 012 = 0
 013 = 0
 020 = 0
 021 = 0
 022 = $r^2 R[t]R'[t]$
 023 = 0
 030 = 0
 031 = 0
 032 = 0
 033 = $r^2 R[t]\text{Sin}[\theta]^2 R'[t]$
 100 = 0
 101 = $\frac{R'[t]}{R[t]}$
 102 = 0
 103 = 0
 110 = $\frac{R'[t]}{R[t]}$
 111 = $\frac{kr}{1-kr^2}$
 112 = 0
 113 = 0
 120 = 0
 121 = 0
 122 = $r(-1 + kr^2)$
 123 = 0
 130 = 0
 131 = 0
 132 = 0
 133 = $r(-1 + kr^2)\text{Sin}[\theta]^2$
 200 = 0
 201 = 0
 202 = $\frac{R'[t]}{R[t]}$
 203 = 0
 210 = 0
 211 = 0
 212 = $\frac{1}{r}$
 213 = 0
 220 = $\frac{R'[t]}{R[t]}$
 221 = $\frac{1}{r}$
 222 = 0
 223 = 0
 230 = 0
 231 = 0
 232 = 0
 233 = $-\text{Cos}[\theta]\text{Sin}[\theta]$
 300 = 0
 301 = 0
 302 = 0
 303 = $\frac{R'[t]}{R[t]}$
 310 = 0
 311 = 0
 312 = 0
 313 = $\frac{1}{r}$
 320 = 0
 321 = 0
 322 = 0
 323 = $\text{Cot}[\theta]$
 330 = $\frac{R'[t]}{R[t]}$
 331 = $\frac{1}{r}$
 332 = $\text{Cot}[\theta]$
 333 = 0
 00 = $-\frac{3R''[t]}{R[t]}$
 11 = $\frac{2(k+R'[t]^2)+R[t]R''[t]}{1-kr^2}$
 22 = $r^2(2(k+R'[t]^2)+R[t]R''[t])$
 33 = $r^2\text{Sin}[\theta]^2(2(k+R'[t]^2)+R[t]R''[t])$

$$\text{Ricci} = - \frac{6(k + R'[t]^2 + R[t]R''[t])}{R[t]^2}$$

Índice de figuras

1.1. Grafo de Cayley para el grupo S_3	6
2.1. Trayectorias en el espacio de configuraciones	16
7.1. Las observaciones de la coordenada x leída por los observadores O y O' se diferencian en un término que aumenta proporcionalmente al tiempo	
9.1. Conservación de las distinciones. Dos condiciones iniciales para la coordenada q y su momento asociado p no conmutantes	
10.1. Movimiento relativo al eter	76
10.2. Experimento de Michelson	77
10.3. Velocidad respecto al eter para el haz vertical	77
10.4. La relatividad de la simultaneidad	79
10.5. Relatividad de la duración	80
10.6. Tren en reposo	80
10.7. Tren en movimiento	81
10.8. Sistemas inerciales	81
10.9. Invariante espacio-tiempo	82
10.10. Sistemas inerciales	83
11.1. Grupo de galaxias del Gran Atractor	85
11.2. Superficies de curvatura constante	90
14.1. Paquete de ondas	118
14.2. Pozo cuadrado de potencial	119
14.3. Primeros tres estados	121
14.4. Soluciones de energía	121
14.5. Pozo cuadrado infinito	122
14.6. Funciones de onda en una caja	123
14.7. Primeros tres estados	125
16.1. Evolución paquete gaussiano	139
17.1. Modos del campo cuántico	156
17.2. Scattering de uno a dos bosones	157
17.3. Dispersión elástica	158
17.4. Delta de Dirac	159
17.5. Como función de k	160
19.1. Diagrama de Feynman	185
20.1. Bohr y Einstein	192
20.2. Escudo elegido por Bohr	193
21.1. Experimento del gato	195
22.1. Diagrama de Venn más general para 3 proposiciones conmutantes A , B y C . El complementario de A (la negación de la proposición A) es A_0 , B_0 y C_0	213
22.2. Definición de las proposiciones A_0 , B_0 y C_0	213
23.1. Multibit	220
23.2. Esfera de Bloch	221
23.3. Multiqubit	221
24.1. Puertas lógicas	224
24.2. NOT	224

24.3. Reflexión NOT	225
24.4. Puerta de Hadamard en la esfera de Bloch, actuando sobre $(0\rangle + 1\rangle)/\sqrt{2}$	227
24.5. Cambio de signo	250
24.6. Inversión sobre el promedio	250
24.7. Algoritmo de Grover para $N=4$ y $s=1$	252
24.8. Algoritmo de Grover para $N=64$ y $s=1$	256

Bibliografía

- [1] M. Alonso, E.J. Finn: *Física Tomos I,II,III*. Ed. Addison-Wesley Iberoamericana, México, 1986.
- [2] Leslie E. Ballentine: *Quantum Mechanics. A Modern Development*. World Scientific Publishing Co., Singapore, 1998.
- [3] J.S.Bell: *Lo decible y lo indecible en mecánica cuántica*. Ed. Alianza Universidad, Madrid, 1990.
- [4] F. Dyson: *El científico rebelde*. Debolsillo, Barcelona, 2010.
- [5] R.Eisberg, R.Resnick: *Física Cuántica*. Limusa, México D.F., 1989.
- [6] R.P. Feynman y S. Weinberg: *Las partículas elementales y las leyes de la Física*. Gedisa, Barcelona, 1997.
- [7] A.Galindo,P.Pascual: *Mecánica cuántica I,II*. Eudema, Madrid, 1989.
- [8] H. Goldstein: *Mecánica clásica*. Reverte, Barcelona, 1990.
- [9] G. Holton: *Introducción a los conceptos y teorías de las ciencias físicas*. Reverte, Barcelona, 1993.
- [10] J. Kepler: *De fundamentis astrologiae certioribus en Joannis Kepleri astronomi Opera Omnia, Vol.I* Christian Frisch. Frankfurt a.M.Erlangae, Heyder and Zimmer 1858/1871
- [11] L.D. Landau, E.M. Lifshitz: *Mecánica. Volumen 1 Curso de Física Teórica*. Reverte, Barcelona, 2ª Edición, 1985.
- [12] P.S. Laplace: *Ensayo filosófico sobre las probabilidades*. Alianza Editorial, Madrid, 1985.
- [13] Lichtenberg: *Unitary symmetry and elementary particles*. Academic Press, Nueva York, 1978.
- [14] J. Martínez Salas: *Mecánica Analítica*. Paraninfo, Madrid, 1985.
- [15] R. Moore: *Niels Bohr*. Knopf, New York, 1966.
- [16] H. Poincaré: *Ciencia e Hipótesis*. Espasa Calpe, Madrid, 2ª Edición, 2002.
- [17] A. Fernández-Rañada: *Dinámica Clásica*. Alianza Editorial, Madrid, 1990.
- [18] A. Fernández-Rañada: *Heisenberg. Ciencia, incertidumbre y conciencia*. Nivola, Tres Cantos, 2004.
- [19] P.A. Schilpp: *Albert Einstein: Philosopher-Scientist*. Harper and Row, New York, 1949.
- [20] E. Schrodinger: *¿Qué es la vida?* Tusquets Editores, Barcelona, 1983
- [21] L. Sciascia: *La desaparición de Majorana* Tusquets Editores, Barcelona, 2007
- [22] Franco Selleri: *El debate de la teoría cuántica* Alianza Universidad, Madrid, 1986
- [23] Danah Zohar: *La conciencia cuántica* Plaza & Janés, Barcelona, 1990