Introducción a la mecánica cuántica

Resumen

En este apartado recordamos los conceptos fundamentales de la mecánica cuántica: los postulados que definen su marco teórico y la interpretación de los observables físicos como operadores lineales en un espacio de Hilbert. Esta síntesis sirve como punto de partida para el estudio de modelos cuánticos canónicos y para el desarrollo de métodos numéricos como los empleados en este proyecto.

1. Postulados básicos

1.1. Postulado I: Estado cuántico

El estado de un sistema físico se describe completamente mediante una función de onda (o vector de estado)

$$\psi(\mathbf{r}, t) \in \mathcal{H},$$

donde $\mathcal{H}$ es un espacio de Hilbert complejo. La probabilidad de encontrar la partícula en una región V del espacio está dada por

$$P(V) = \int_V |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \mathrm{d}^3 r,$$

y la normalización impone

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi|^2 \mathrm{d}^3 r = 1.$$

1.2. Postulado II: Observables y operadores

A cada magnitud física medible le corresponde un **operador hermítico** $\hat{A}$ que actúa sobre los estados del sistema. Las posibles medidas de A son los **autovalores** de $\hat{A}$, obtenidos de la ecuación

$$\hat{A}\psi_a = a\psi_a,$$

donde ψ_a son los autovectores ortogonales del operador.

1.3. Postulado III: Medición y colapso

Una medición de A sobre un sistema en el estado ψ produce con probabilidad

$$P(a) = |\langle \psi_a | \psi \rangle|^2$$

el valor a, tras lo cual el estado del sistema colapsa en ψ_a.

1.4. Postulado IV: Evolución temporal

La evolución temporal de un sistema aislado está gobernada por la ecuación de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\mathbf{r}, t),$$

donde $\hat{H}$ es el operador Hamiltoniano que representa la energía total del sistema.

2. Operadores y valores esperados

Dado un observable $\hat{A}$ y un estado normalizado ψ, el **valor esperado** de A es

$$\langle A\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \int \psi^*(\mathbf{r})\,\hat{A}\psi(\mathbf{r})\,\mathrm{d}^3r.$$

Este valor representa el promedio de muchas mediciones idénticas sobre sistemas preparados en el mismo estado.

2.1. Ejemplos comunes

- Operador de posición: $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}$
- Operador de momento: $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$
- Operador de energía (Hamiltoniano): $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$

Estos operadores obedecen la relación de conmutación fundamental:

$$[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\,\delta_{ij}.$$

De ella se deriva el principio de incertidumbre de Heisenberg:

$$\Delta x_i\,\Delta p_i \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Resumen (Recordar)

- Los estados cuánticos son vectores en un espacio de Hilbert y su módulo cuadrado da una probabilidad.
- Los observables son operadores hermíticos con autovalores reales.
- El valor esperado de un observable se calcula como $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$.
- La evolución temporal está regida por la ecuación de Schrödinger.