

TEXTOS DOCENTS

321

MECÀNICA QUÀNTICA

Lluís Garrido
Josep M. Pons

Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria



UNIVERSITAT DE BARCELONA



TEXTOS DOCENTS

321

MECÀNICA QUÀNTICA

Lluís Garrido
Josep M. Pons

Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria

Publicacions i Edicions



UNIVERSITAT DE BARCELONA

U

B

Prefaci

Aquestes notes corresponen al curs de Mecànica Quàntica del grau de Física. Els alumnes que fan aquesta assignatura ja han tingut un primer i important contacte amb els fenòmens quàntics en l'assignatura de Física Quàntica, on també han manejat l'equació de Schrödinger, bé sigui en casos unidimensionals o per al potencial de Coulomb. Les notes consten de tres parts. En la primera s'introdueix de manera motivada el formalisme matemàtic estàndard de la mecànica quàntica, els seus postulats i unes aplicacions i resultats bàsics. La segona part gira al voltant del concepte de simetria en els sistemes quàntics, i desenvolupa la teoria del moment angular –incloent-hi l'spin– i la composició de moments angulars. Finalment, en la tercera part, es fa una introducció als mètodes aproximats. Aquestes notes no estan fetes amb el propòsit de substituir cap dels excel·lents llibres que hi ha de MQ, la lectura dels quals, en les parts que correspongui, és molt aconsellable tant per eixamplar molts detalls com per tenir altres perspectives introductòries. Al final de les notes trobareu una breu informació bibliogràfica. Típicament, els llibres a què fem referència abasten molts més temes que no pas els tres capítols introductoris que formen aquestes notes. Els podeu trobar tots a la biblioteca.

Per acabar, volem agrair als nostres companys Joaquim Gomis, Josep Ignasi Latorre, Joan Martorell, Josep Taron i Hugo Ruiz les observacions i els suggeriments sobre aquest text. A Hugo Ruiz també li agraïm l'acurada detecció d'errors, que han estat corregits en aquesta tercera edició, així com les valuoses propostes de millora del text.

Autors:

Lluís Garrido (garrido@ub.edu) i Josep M. Pons (jmpons@ub.edu)

Departament d'Estructura i Constituents de la Matèria

Facultat de Física

Universitat de Barcelona

Índex

1	Formalisme i postulats de la mecànica quàntica	1
1.1	Introducció. Sistemes clàssics i sistemes quàntics	1
1.2	L'experiment de Stern-Gerlach	4
1.2.1	Descripció de l'experiment	4
1.2.2	Equacions clàssiques del moviment d'un dipol magnètic en un camp B	5
1.2.3	Resultats experimentals	7
1.2.4	Analogia amb la llum polaritzada	10
1.3	El formalisme matemàtic de la MQ	14
1.3.1	Espais vectorials	14
1.3.2	Operadors lineals	18
1.4	Postulats de la mecànica quàntica	27
1.4.1	Postulat 1: La representació de l'estat d'un sistema físic	27
1.4.2	Postulat 2: La representació de les magnituds mesurables	30
1.4.3	Postulat 3: El resultat de la mesura	35
1.4.4	Postulat 4: La projecció (o reducció, o col·lapse)	39
1.4.5	Postulat 5: L'evolució temporal	44
1.4.6	Postulat 6: Els operadors de posició i de moment	50
1.5	Exemples	58
1.5.1	Dispersió espacial d'una partícula lliure	58
1.5.2	Estats que saturen les relacions d'incertesa posició-moment: el paquet d'ones gaussià	59
1.5.3	Evolució temporal lliure de $ p\rangle$	61
1.5.4	Evolució temporal lliure d'un paquet d'ones gaussià	61
1.5.5	Evolució lliure d'un paquet d'ones qualsevol	64
1.5.6	Difracció per una escletxa	65
1.6	L'oscil·lador harmònic	68
1.6.1	Alguns estats particulars de l'oscil·lador harmònic	71
1.6.2	Els estats coherents	72
1.7	Descripcions equivalents	75
1.7.1	Evolució temporal dels estats i operadors transformats	76
1.7.2	Imatges d'evolució temporal de Schrödinger, Heisenberg i Dirac	77

2	Simetries i lleis de conservació	81
2.1	Introducció	81
2.2	Simetries en mecànica quàntica	84
2.2.1	Condicions de simetria sobre H	85
2.2.2	Teorema de Noether	86
2.2.3	Principi de relativitat de Galileu	88
2.2.4	La partícula lliure sense spin	89
2.2.5	Partícules en interacció	92
2.3	Obtenció dels generadors del grup de Galileu en MQ	92
2.3.1	Translacions	92
2.3.2	Rotacions	94
2.3.3	Boosts	97
2.4	Representacions del grup de rotacions	99
2.4.1	Autovalors i autovectors per als operadors de moment angular	99
2.4.2	El grup de rotacions en espais de Hilbert de dimensió infinita. El moment angular orbital	102
2.4.3	El grup de rotacions en espais de Hilbert de dimensió finita: representacions matricials del grup de rotacions	109
2.4.4	El grup de rotacions en general. Moment angular total. Camps spinorials	119
2.4.5	Addició de moments angulars	122
3	Mètodes aproximats	129
3.1	Pertorbacions independents del temps	129
3.1.1	El cas no degenerat	129
3.1.2	El cas degenerat	132
3.1.3	Aproximació pràctica per a nivells quasi degenerats	133
3.1.4	Exemples	137
3.2	Mètode variacional	142
3.2.1	El mètode de Rayleigh-Ritz	142
3.2.2	Fites superiors per a un espectre d'energies discret	144
3.2.3	Exemples	146
3.3	Pertorbacions dependents del temps	148
3.3.1	Pertorbació sinusoidal	150
	Apèndixs	155
	A Probabilitat i estadística. Mesures experimentals	157
	B Desigualtats de Bell	161
	C Estats barreja. Matriu densitat	165
	D Interferència en l'experiment de la doble esclletxa	167

E	La impossibilitat de clonació en mecànica quàntica	171
F	La mesura en mecànica quàntica	173
G		181
	Bibliografia	183

Capítol 1

Formalisme i postulats de la mecànica quàntica

1.1 Introducció. Sistemes clàssics i sistemes quàntics

La física clàssica està dominada per un paradigma que anomenem determinisme, i que es correspon matemàticament amb la formulació de les equacions de la dinàmica com a equacions diferencials, de tal manera que un cop fixades les condicions inicials, les lleis de la dinàmica (lleis de Newton en mecànica clàssica) dicten una evolució temporal determinista. Si bé podem reconèixer que no és possible determinar experimentalment les condicions inicials amb una precisió infinita, com demanaria la identificació d'un nombre real, aquesta limitació pràctica només afectaria la nostra capacitat predictiva però de cap manera posaria en dubte el determinisme intrínsec subjacent a la teoria.

Considerem per exemple el formalisme canònic de la mecànica clàssica. El temps és l'única variable independent, i la resta en depèn: $x(t)$ i $p(t)$. Un cop s'ha donat la funció de Hamilton H del sistema, l'evolució de les variables x i p es descriu mitjançant les equacions de Hamilton

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \{x, H\} \\ \dot{p} &= \{p, H\}\end{aligned}\tag{1.1}$$

on $H(x, p, t) = E_C + V$, p són els moments canònics conjugats de les variables x i $\{-, -\}$ són els parèntesis de Poisson. Fixades les condicions inicials, la solució d'aquestes equacions diferencials per a l'evolució temporal és única.

La física clàssica considera que les mesures que podem fer d'un sistema físic són completament passives respecte a aquest i no constitueixen cap interacció amb ell. En aquest sentit, la física clàssica, a causa de les idealitzacions que la fonamenten, no inclou la descripció del procés de mesura ni els seus efectes.

Aquesta situació tan idealitzada entra en crisi quan les energies pròpies d'un sistema són de l'ordre de les involucrades en el procés de mesura. Aleshores la física clàssica esdevé inservible i ha de ser substituïda per un paradigma nou: la física quàntica. El preu que hem de pagar, però, és l'abandó radical del determinisme com a ingredient consubstancial de la teoria.

Ja hem dit que en la física clàssica, la nostra capacitat predictiva està limitada en moltes circumstàncies perquè no podem fixar amb absoluta precisió les condicions inicials, però ara es tracta d'una altra cosa ben diferent: el formalisme mateix serà probabilista. La mecànica quàntica (MQ a partir d'ara) especifica sense ambigüïtat quins poden ser els possibles resultats d'un experiment, però només pot donar-nos les probabilitats d'aquests possibles resultats, no pas quin d'aquests resultats es produirà –excepte en circumstàncies que el formalisme ja preveu.

La MQ és una teoria amb una formulació matemàtica molt precisa. Els estats físics estan representats per vectors en un espai vectorial sobre els complexos, i els possibles observables associats a la mesura de magnituds físiques, per operadors lineals. En aquest marc queda totalment especificat quins són els possibles resultats d'un experiment sobre un estat físic determinat, i com es determinen les probabilitats d'ocurrència d'aquests resultats. I és precisament aquesta aleatorietat de la MQ en el marc de la seva formulació la que també ens porta a les conegudes relacions d'incertesa, que posen límits a la possibilitat de tenir estats que permetin de fer-hi prediccions acurades de certs observables a la vegada.

Aquest factor d'aleatorietat present en la MQ, i la impossibilitat de determinar les condicions inicials (tots els valors dels observables) de qualsevol sistema físic, pot induir a pensar que aquesta probabilitat està associada amb una manca d'informació sobre el sistema, és a dir, amb una incompletesa de la MQ per a descriure la realitat. Això porta directament a considerar l'existència de les anomenades *variables amagades*, que serien etiquetes que determinarien unívocament els valors de les magnituds físiques associades al sistema, la seva evolució i el resultat de qualsevol experiment fet sobre aquest, però que anomenem *amagades* perquè no les coneixem. En aquest context, els resultats probabilístics en fer les mesures estarien lligats al fet de no conèixer els valors concrets d'aquestes etiquetes. La probabilitat, per tant, hauria de ser entesa com en la mecànica estadística, o sigui, com una pèrdua d'informació. En aquesta interpretació, el vector d'estat descriuria un conjunt estadístic de sistemes, no un sol sistema.

No obstant això, el 1964 John Bell va demostrar un resultat, conegut com el teorema de les *desigualtats de Bell*, del qual avui hi ha diverses variants, que ha tingut un fort impacte en el debat de tipus filosòfic que ha acompanyat sempre la MQ. Aquestes desigualtats mostren la incompatibilitat entre les prediccions fetes per la MQ i les de qualsevol teoria de variables amagades que no admetés l'acció instantània a distància. Com que els resultats experimentals observats són compatibles amb els predits per la MQ, hem de concloure que la hipòtesi sobre l'existència de variables amagades –del tipus esmentat– ha estat refutada, i que el fet de manejar conceptes probabilístics a l'hora de predir un determinat valor en una mesura sobre un sistema físic no està associat a una incompletesa de la informació que posseïm del sistema, sinó que és inherent al mateix sistema quàntic. La probabilitat està associada amb un sol estat quàntic, no amb una col·lecció estadística.

En els fenòmens quàntics apareix de manera natural la constant de Plank \hbar , que té dimensions d'acció ($[\hbar] = ML^2T^{-1}$, es a dir, energia per temps). Direm que un sistema és clàssic quan l'acció associada amb aquest sistema és tal que $S \gg \hbar$, i direm que és quàntic si S és de l'ordre d' \hbar . Aquesta definició està d'acord amb el principi de correspondència, segons el qual la descripció quàntica es redueix a la clàssica en el límit de nombres quàntics grans.

Exemples. Considerem una partícula lliure que quan $t = 0$ està en l'origen i quan $t = t_0$, en x_0 . El camí clàssic és $x(t) = x_0 t/t_0$, i l'acció ve donada per

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{2}m \int_0^{t_0} v^2 dt = \frac{1}{2}m \int_0^{t_0} \left(\frac{x_0}{t_0}\right)^2 dt = \frac{1}{2}m \frac{x_0^2}{t_0} \\ &\approx 10^{-3} \text{ kg} \frac{10^{-4} \text{ m}^2}{1 \text{ s}} \approx 10^{-7} \text{ Js} \frac{\hbar}{10^{-34} \text{ Js}} = 10^{27} \hbar \end{aligned} \quad (1.2)$$

si $x_0 = 1 \text{ cm}$, $t_0 = 1 \text{ s}$ i $m = 1 \text{ g}$; mentre que, si agafem un electró ($m = 10^{-27} \text{ g}$), tindrem S de l'ordre d' \hbar .

Un altre exemple el tenim en l'oscil·lador harmònic quàntic, que recordem que $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$, aleshores $S \approx ET = E \frac{2\pi}{\omega} \approx \hbar n$. Veiem doncs que, quan n és petit, és necessària una descripció quàntica; però, quan n és gran, veurem que per al cas particular de l'oscil·lador harmònic es poden construir estats que tenen un comportament clàssic.

Per fer-nos més la idea de les escales implicades en els fenòmens quàntics, considerem per exemple la llum visible, que fonamenta la nostra experiència quotidiana del color, i triem-ne una longitud d'ona representativa, com $5 \times 10^{-7} \text{ m}$ (encara que tot l'espectre electromagnètic és igualment quàntic). La freqüència que li correspon ($\nu = c/\lambda$) és aproximadament 10^{15} s^{-1} , o un període $T = \frac{1}{\nu} \approx 10^{-15} \text{ s}$. L'energia d'un únic fotó d'aquesta freqüència serà ($E = h\nu = \hbar\omega$) de l'ordre de l'electró-Volt ($1 \text{ eV} \approx 1.6 \times 10^{-19} \text{ J}$). Fixem-nos en els *molts* ordres de magnitud que separen aquestes quantitats de les de l'experiència ordinària, pel que fa a lapses de temps, energies, etc. Una altra magnitud que cal tenir present és el nombre d'Avogadro, $\approx 6 \times 10^{23}$, que compta el nombre de molècules en un mol de substància. Si considerem una substància monoatòmica de la qual en condicions de sòlid, un mol ocupi 1 cm^3 , tindrem, en aquest volum, de l'ordre de $(10^8)^3$ àtoms, la qual cosa vol dir que en una línia d'un centímetre en tindrem 10^8 . La distància interatòmica és, doncs, en aquest cas, $\frac{10^{-2}}{10^8} \text{ m} = 10^{-1} \text{ nm}$.

Si disposem de la constant de Plank (utilitzarem molt sovint $\hbar \equiv \frac{h}{2\pi}$) i una càrrega elèctrica elemental $q^2 \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ (on ϵ_0 és la permitivitat elèctrica del buit), la llei de Coulomb ens diu que les dimensions de q^2 són $[q^2] = ML^3T^{-2}$, i, per tant, la quantitat $\frac{q^2}{\hbar c}$ és adimensional. El seu valor aproximat és $\frac{1}{137}$. El fet que aquest paràmetre tingui un valor molt menor que la unitat és la causa que es puguin fer desenvolupaments pertorbatius exitosos en la teoria de l'electrodinàmica quàntica. Si tenim un paràmetre de massa a disposició –la massa d'una partícula–, podem definir una longitud, la longitud d'ona Compton:

$$\lambda = \frac{h}{mc},$$

que dóna una idea de la màxima localització possible d'una partícula puntual de massa m en MQ. En aquesta fórmula intervé la velocitat de la llum, que no és una constant que aparegui en el formalisme que desenvoluparem de la MQ, perquè el nostre formalisme està d'acord amb la relativitat galileana, i no amb la d'Einstein¹, per això de vegades se'n diu *MQ no relativista*.

¹La teoria quàntica de camps és el marc on la MQ i la teoria de la relativitat restringida d'Einstein es posen d'acord.

Si, a més de massa, tenim càrrega elèctrica, podem definir una unitat de longitud que no faci ús de c :

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{m q^2}.$$

Si ara prenem $m = m_e$ la massa de l'electró, aquest paràmetre r_0 és l'anomenat radi de Bohr i amb molt bona aproximació és el valor esperat de la distància de l'electró al protó en l'àtom d'hidrogen en l'estat fonamental (el d'energia més baixa).

D'altra banda, com que $\frac{q^2}{\hbar}$ té dimensions de velocitat, $\frac{m q^4}{\hbar^2}$ tindrà dimensions d'energia. De fet, ens proporciona l'ordre de magnitud –en valor absolut– de l'energia de l'àtom d'hidrogen en l'estat fonamental $E = -\frac{1}{2} \frac{m_e q^4}{\hbar^2} \approx -13.6 eV$. Per tant, veiem que quantitats construïdes per pures raons dimensionals ja són de l'ordre d'algunes magnituds importants que apareixen en la física quàntica per l'estat fonamental o per estats a prop del fonamental. Un altre exemple és l'oscil·lador harmònic de freqüència ω . La quantitat $\hbar\omega$ té dimensions d'energia i és de l'ordre de l'energia de l'estat fonamental de l'oscil·lador harmònic en MQ, que és $\frac{1}{2}\hbar\omega$.

En l'apèndix G trobareu les principals constants fonamentals.

1.2 L'experiment de Stern-Gerlach

1.2.1 Descripció de l'experiment

Els experiments de Stern-Gerlach mesuren el moment magnètic de determinats àtoms (no ionitzats, i per tant neutres elèctricament) en passar a través d'un camp magnètic inhomogeni, com es mostra en la figura 1.1.

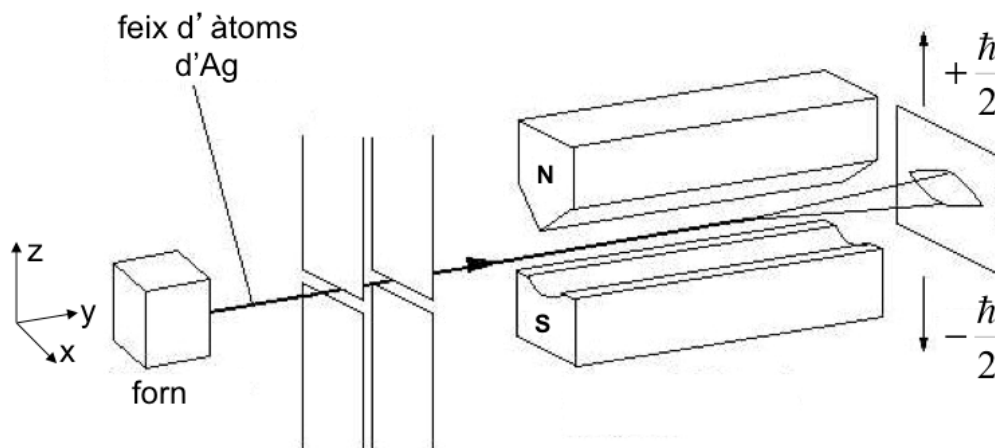


Figura 1.1: Experiment de Stern-Gerlach

Agafant l'eix z en la direcció NS i y en la direcció del feix d'àtoms, el camp magnètic creat és vertical en la direcció z i, a més a més, $\frac{\partial B_z}{\partial z} \neq 0$ –i negatiu en el cas de la figura 1.1. Aquesta última propietat ($\frac{\partial B_z}{\partial z} \neq 0$) veurem que és necessària per tal que l'experiment sigui sensible al valor del moment magnètic.

D'altra part, es demana també que no tingui component en la direcció de l'eix y , $\frac{\partial B_z}{\partial x} = 0$ i $\frac{\partial B_z}{\partial y} = 0$, però aleshores $\frac{\partial B_x}{\partial x} \neq 0$, per complir que la divergència de B ha de ser nul·la.

1.2.2 Equacions clàssiques del moviment d'un dipol magnètic en un camp B

Recordem que un corrent circular s'associa amb un moment magnètic $\vec{\mu}$ perpendicular i de mòdul $\mu = iA$ (i és la intensitat i A , l'àrea). En el cas d'un electró que dóna voltes, aquest moment magnètic estarà relacionat amb el moment angular

$$\mu = iA = \frac{e}{2\pi R/v} \pi R^2 = e \frac{Rv}{2} = e \frac{L}{2m_e} = \mu_B \frac{L}{\hbar} \Rightarrow \vec{\mu} = -\mu_B \frac{\vec{L}}{\hbar} \quad (1.3)$$

(el signe és degut al fet que l'electró té càrrega negativa: $-e$) on μ_B és l'anomenat magnetó de Bohr i val

$$\begin{aligned} \mu_B &\equiv \frac{e\hbar}{2m_e} = 9,27 \times 10^{-24} \text{ J/T}, & \hbar &= 1,054\,59 \times 10^{-34} \text{ Js} \\ e &= 1,602\,19 \times 10^{-19} \text{ C}, & m_e &= 9,109\,53 \times 10^{-31} \text{ kg} \end{aligned} \quad (1.4)$$

Recordeu que l'electró també té un moment magnètic intrínsec que està associat amb el moment angular intrínsec o spin (\vec{S}), i que en aquest cas

$$\vec{\mu}_e = -g\mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar} \equiv -\gamma\vec{S} \quad (1.5)$$

on g és la raó giromagnètica de l'electró², i hem definit $\gamma = g\mu_B/\hbar$.

En l'experiment original de Stern-Gerlach (el 1922, tres anys abans de la descripció teòrica de l'spin), es van utilitzar àtoms d'argent, perquè són neutres i tenen un moment magnètic permanent pràcticament igual al de l'electró.

L'energia potencial d'un dipol magnètic (si és neutre elèctricament) en presència d'un camp magnètic B ve donada per $U = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$, i per tant el hamiltonià és

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} - \vec{\mu} \cdot \vec{B} \quad (1.6)$$

(noteu que, com que la partícula és neutra, no hi ha els termes que donarien lloc a la força de Lorentz) i les seves equacions del moviment són

$$\begin{aligned} \dot{\vec{r}} &= \{\vec{r}, H\} = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial \vec{r}}{\partial x_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \vec{r}}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial x_i} \right) = \frac{\vec{p}}{m} \\ \dot{\vec{p}} &= \{\vec{p}, H\} = \vec{\nabla}(\vec{\mu} \cdot \vec{B}) \end{aligned} \quad (1.7)$$

D'altra banda, l'equació per l'evolució temporal de $\vec{\mu}$, és

$$\dot{\vec{\mu}} = -\gamma \vec{L} = -\gamma \vec{\tau} = -\gamma \vec{\mu} \times \vec{B} = -\vec{\mu} \times (\gamma \vec{B}) \quad (1.8)$$

(En la darrera expressió hem fet servir que el moment $\vec{\tau}$ de la força deguda al camp magnètic és $\vec{\mu} \times \vec{B}$.) Si B fos constant, aquesta última equació ens indicaria que el moment magnètic tindria

²El valor que s'obté de l'equació de Dirac és $g = 2$, però el valor experimental no és exactament 2. El càlcul teòric d'aquesta petita diferència va representar un dels primers grans èxits de l'electrodinàmica quàntica, a finals dels anys 40.

un moviment de precessió –precessió de Larmor– al voltant del camp magnètic amb un període de

$$T = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi}{\gamma B} \quad (1.9)$$

En cas que B no fos constant, tindríem un moviment de precessió no constant. Les altres dues equacions (1.7) expliquen com serà la trajectòria del dipol.

En el cas particular dels experiments de Stern-Gerlach efectuats sobre àtoms d'argent, resulta que el temps de pas a través dels imants és molt més gran que el període de precessió. Efectivament, com que les velocitats dels àtoms són d'uns 100-1000 m/s, i la secció de l'imant és d'uns 10 cm, el temps de pas serà d'uns 10^{-4} s, mentre que el període de precessió per a camps habituals de l'ordre del tesla serà

$$T = \frac{2\pi}{\gamma B} = \frac{2\pi\hbar}{g\mu_B B} \approx \frac{6 \cdot 10^{-34} \text{ Js}}{2 \cdot 10^{-23} \text{ J/T} \cdot 1 \text{ T}} \approx 3 \cdot 10^{-11} \text{ s} \quad (1.10)$$

Això fa que només sigui rellevant el component del dipol magnètic en la direcció del camp B , perquè el valor mitjà en les altres direccions és nul. Per tant, l'equació del moviment és

$$\dot{\vec{p}} = \vec{\nabla}(\mu_z B_z) = \mu_z \vec{\nabla}(B_z) = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \vec{k} = \mu_z B' \vec{k} \quad (1.11)$$

que ens dona un moviment accelerat en la direcció z . Aleshores, el desplaçament vertical dels àtoms dins l'electroimant serà

$$\Delta z_1 = \frac{1}{2} a_z t^2 = \frac{1}{2} \frac{\mu_z B'}{M} \left(\frac{d}{V} \right)^2 \quad (1.12)$$

on d és la longitud de l'electroimant, i M i V , la massa i la velocitat –en direcció horitzontal– dels àtoms, respectivament. Tenint en compte que B' és de l'ordre de 10^3 T/m, $d = 10$ cm i $M = 2 \times 10^{-25}$ kg, resulta que el desplaçament màxim dins l'electroimant és de l'ordre del mil·límetre:

$$(\Delta z_1)_{\max.} = \frac{1}{2} \frac{\mu_B |B'|}{M} \left(\frac{d}{V} \right)^2 \approx \frac{10^{-23} \text{ J/T} \cdot 10^3 \text{ T/m}}{10^{-25} \text{ kg}} \left(\frac{0,1 \text{ m}}{10^3 \text{ m/s}} \right)^2 \approx 10^{-3} \text{ m} \quad (1.13)$$

Com que els àtoms encara han de viatjar una distància $D = 50$ cm abans de l'impacte en la placa fotogràfica, el desplaçament total serà major a causa de l'angle de deflexió no nul amb què surten de l'electroimant:

$$\tan \theta \sim \theta \sim \frac{v_z}{V} = \frac{a_z t}{V} = \Delta z_1 \frac{2}{d} \quad (1.14)$$

i per tant el desplaçament addicional fora de l'electroimant serà $\Delta z_2 \approx \theta D = \Delta z_1 \frac{2D}{d}$, i el desplaçament total

$$\Delta z = \Delta z_1 + \Delta z_2 = \Delta z_1 \left(1 + \frac{2D}{d} \right) \propto \mu_z B' \quad (1.15)$$

que, com veiem, és proporcional al component del moment magnètic en direcció z , està dominat per Δz_2 i determina un desplaçament total màxim de l'ordre d'alguns centímetres. Observem que si el component z del moment angular intrínsec de l'electró és positiu ($S_z > 0$), i per tant μ_z de l'àtom d'Ag és negatiu, aleshores el desplaçament serà positiu ($\Delta z > 0$), ja que, recordem-ho, B' és negatiu. En el cas contrari, si el component z del moment angular intrínsec de l'electró és negatiu, el desplaçament serà negatiu.

1.2.3 Resultats experimentals

Continuant amb l'experiment original de Stern-Gerlach, quan no hi ha camp magnètic hauríem d'esperar un punt en la pantalla, ja que el feix no ha d'experimentar cap desviació. En lloc d'això, observem una línia, amb $z = 0$, deguda a la dispersió dels àtoms en la direcció x .

Quan fem B suficientment gran, apareixen les dues línies de la figura 1.1, en lloc d'una superfície totalment poblada com caldria esperar segons la teoria clàssica. Si ens centrem en els punts de la pantalla amb $x = 0$ (on arribarien els àtoms que no tenen component de la velocitat en direcció x), esperaríem veure una línia vertical de densitat uniforme, perquè, com que el desplaçament és proporcional al moment magnètic en la direcció z i no hi ha cap direcció privilegiada en la producció dels àtoms en el forn, la projecció de $\vec{\mu}$ en l'eix z ha de seguir un continu. Ben al contrari, apareixen les dues línies esmentades (és a dir, dos punts si mirem únicament la zona amb $x = 0$) que corresponen a dos valors concrets del moment angular, $\pm\hbar/2$.

Interpretació dels resultats

Si mirem la taula periòdica, veurem que la configuració electrònica de l'àtom d'argent és $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 4d^{10} 5s$, és a dir que només hi ha un electró $5s$ fora de les capes completes. Recordem que les capes completes tenen un moment angular total nul i, per tant, si ignorem el moment magnètic del nucli (recordem que $\mu_p = 1,41 \times 10^{-26}$ J/T, $\mu_n = -0,98 \times 10^{-26}$ J/T, $\mu_e = -9,28 \times 10^{-24}$ J/T), que en aquest cas és alguns ordres de magnitud més petit que el de l'electró. A la pràctica, l'electró $5s$ és l'únic que contribueix al moment magnètic total de l'àtom d'argent. Com que és un electró en l'òrbita s no té moment angular orbital i, per tant, el moment angular total de l'àtom d'argent és simplement l'spin d'aquest electró,

$$\vec{\mu}_{Ag} \approx \vec{\mu}_e = -g\mu_B \frac{\vec{S}}{\hbar} \quad (1.16)$$

Clàssicament, esperaríem un continu, però, com ja hem dit, observem solament dos valors de $S_z = \pm\hbar/2$.

Estem davant un exemple típic de mesura en la MQ: els possibles resultats de la mesura estan determinats pel mateix aparell de mesura. De fet, diferents preparacions del feix d'àtoms, com veurem més endavant, només canviaran la proporció d'aquells que deixen senyal en la línia de dalt respecte de la de baix, però no la posició de les línies. A més a més, girant el camp magnètic, les línies sobre la placa giraran igualment i es mantindran els dos valors observats.

Aquests dos possibles estats de sortida com a resultat de la mesura amb un Stern-Gerlach, amb el camp en direcció de l'eix z , els anomenarem $|S_z, +\rangle$ i $|S_z, -\rangle$, per indicar que tenen un moment angular en la direcció z ben definit: $\pm\hbar/2$. De la mateixa manera, podem definir els dos estats en una direcció \vec{n} arbitrària com $|S_{\vec{n}}, +\rangle$ i $|S_{\vec{n}}, -\rangle$.

Amb aquesta notació només volem descriure la part de spin, ja que la part espacial té un comportament totalment clàssic. En efecte, aplicant les relacions d'incertesa de Heisenberg – que veurem més endavant –, $\sigma_z \sigma_{p_z} \approx \hbar$, a la dispersió en velocitats dels àtoms d'argent, tenim ($p_z = M_{Ag} v_z$)

$$\sigma_z \sigma_{v_z} \approx \frac{\hbar}{M_{Ag}} \approx 10^{-9} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1} \quad (1.17)$$

Per tant, com que en el nostre dispositiu experimental tenim una incertesa en la posició de $\sigma_z = 10^{-4}$ m, la dispersió en les velocitats serà d'uns 10^{-5} m/s, que és negligible en comparació de l'escala de velocitats dels àtoms d'argent, $v = 50$ m/s. Així doncs, podem considerar que les variables de posició i de moment són puntuals i que obeeixen a les equacions del moviment clàssiques. Això ens permet analitzar aquest experiment des del punt de vista quàntic, només atenent als graus de llibertat de spin. La descripció sencera de l'experiment de Stern-Gerlach, utilitzant el formalisme de la MQ, la trobareu a l'Apèndix F.

Seqüències d'experiments

L'experiment original de Stern-Gerlach (vegeu la figura 1.1 o la seva representació simplificada en la figura 1.2) és un experiment destructiu, perquè la mateixa mesura en la placa destrueix els dos estats de sortida possibles.

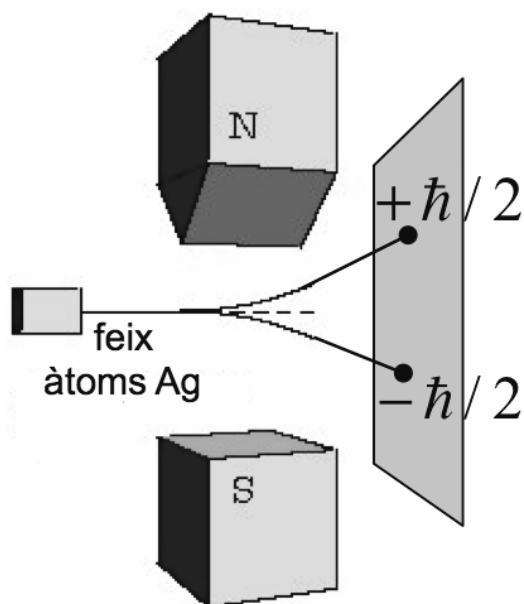


Figura 1.2: Experiment destructiu de Stern-Gerlach

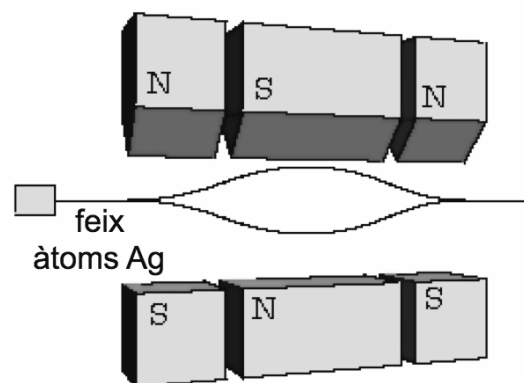


Figura 1.3: Experiment de Stern-Gerlach sense cap efecte

Considerem ara la situació més complicada de la figura 1.3. Els camps magnètics són de la mateixa intensitat, però la polaritat de l'imant central està invertida i és el doble de llarg. D'aquesta manera, els objectes tenen la mateixa direcció en sortir que en entrar, com es pot veure en la figura 1.4, on es dibuixa el component z de l'acceleració, la velocitat i la posició en funció d' y ($\Delta y = 1$ correspon a la longitud del primer imant), de la trajectòria clàssica esperada per a un determinat valor del moment magnètic de la partícula. Sorprenentment —és a dir, de manera contrària a la nostra intuïció clàssica—, quan es fa l'experiment de la figura 1.3, s'observa que l'estat de sortida té les mateixes característiques de spin que el d'entrada, en lloc de $|S_z, +\rangle$ o $|S_z, -\rangle$, com hauríem d'esperar segons l'experiment destructiu de la figura 1.2. En aquest cas, és com si no s'hagués produït cap mesura o que la partícula hagués passat per les dues trajectòries possibles simultàniament i de manera coherent.

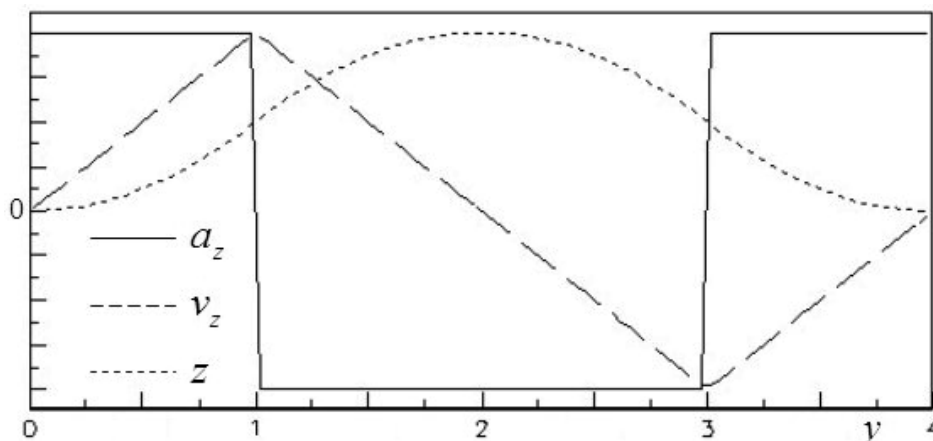


Figura 1.4: Trajectòria possible

Si ara posem, però, un petit bloc de plom en la trajectòria inferior (figura 1.5), resultarà que en sortir tindrem partícules amb la mateixa direcció original, però només amb l'spin cap amunt (això es pot comprovar fent després l'experiment original de la figura 1.2 i veurem que només tenim la línia de dalt). Això és el que s'anomena *mesura filtrant*: en fer la mesura només es destrueix un dels dos possibles resultats i, per tant, les partícules que sobreviuen han d'estar forçosament en l'altre estat possible. La mesura filtrant constitueix doncs una *preparació*, perquè el sistema físic resultant apareix en un determinat estat quàntic.

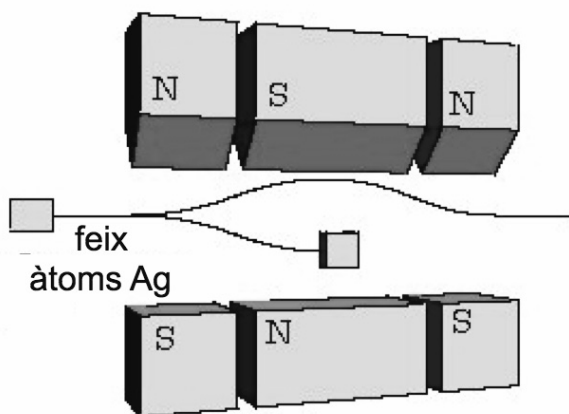


Figura 1.5: Experiment filtrant de Stern-Gerlach

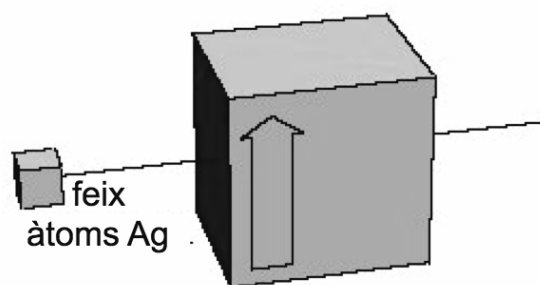
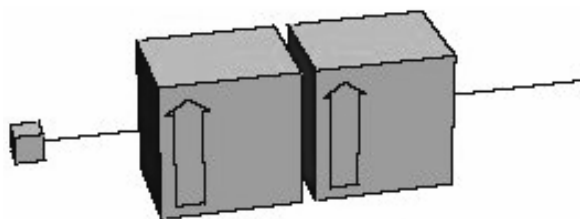
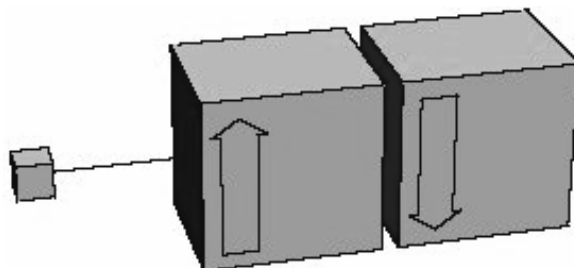


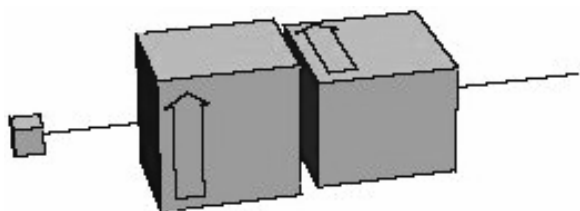
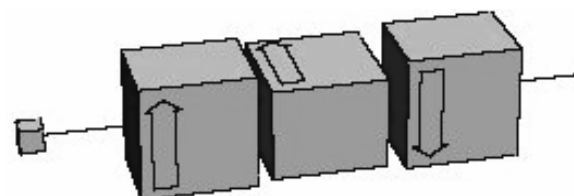
Figura 1.6: Representació de l'experiment de la figura 1.5

Per simplificar aquesta configuració de tres camps amb un bloc de plom per parar la trajectòria inferior, la representarem com una caixa amb una fletxa pintada en la direcció de l'spin que filtra (figura 1.6). Vegem ara la combinació de mesures filtrants.

Posem ara un segon filtre immediatament després del primer i amb la mateixa orientació (figura 1.7). Resultarà que el segon filtre no tindrà cap efecte. Del primer filtre, només en surten partícules amb spin cap amunt (seran la meitat de les partícules originals si aquestes

Figura 1.7: Seqüències *up up*Figura 1.8: Seqüències *up down*

s'han preparat sense cap direcció privilegiada de spin). Aleshores, el segon filtre, que només deixa passar partícules amb spin cap amunt, no produirà cap efecte.

Figura 1.9: Seqüències *up left*Figura 1.10: Seqüències *up left down*

Considerem el cas en què el segon filtre té l'orientació oposada (figura 1.8). Com que del primer filtre només surten partícules amb spin cap amunt, el segon no en deixarà passar cap.

Considerem el cas en què el segon filtre està girat 90° respecte al primer (figura 1.9). La meitat de les partícules surten del primer filtre, totes amb l'spin cap amunt, i s'observa que el segon filtre en deixa passar la meitat. Podem dir que, si tenim dues definicions de spin *up* per a dos filtres amb angles de 90° entre si, la meitat de les partícules satisfà les dues definicions. Si anem variant l'angle entre els dos filtres de 0 a 180° , veurem que la fracció de partícules que deixa passar el segon filtre varia del 100 al 0% . De fet, hom troba experimentalment, i és un resultat que sabrem deduir més endavant del nostre formalisme, que aquesta fracció val $\cos^2(\theta/2)$, on θ és l'angle entre les orientacions dels filtres.

Finalment, considerem l'experiment de la figura 1.10. Cada filtre deixarà passar la meitat de les partícules que hi arriben i, al final, en tindrem $1/8$ dels inicials. Observeu que, sense el segon filtre, no sortiria cap partícula. D'alguna manera aquest segon filtre canvia la definició *up* de les partícules. És un exemple clar de les relacions d'incertesa de Heisenberg, que ens diu que no podem conèixer simultàniament els components de spin en dues direccions perpendiculars. De fet, la segona mesura filtrant destrueix tota informació prèvia.

1.2.4 Analogia amb la llum polaritzada

Tot el que hem explicat fins ara de les mesures filtrants amb experiments de Stern-Gerlach té la seva analogia amb els filtres polaritzadors de llum. A la sortida d'un d'aquests polaritzadors, només tindrem la llum polaritzada en una direcció, com es mostra en la figura 1.11.

Si després d'aquest polaritzador en posem un altre en la mateixa direcció, aquest no tindrà

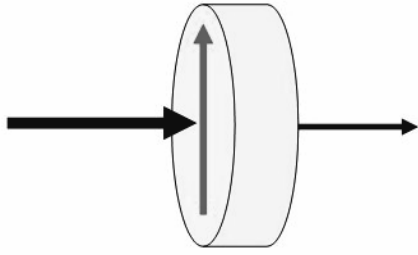


Figura 1.11: Obtenció de llum polaritzada

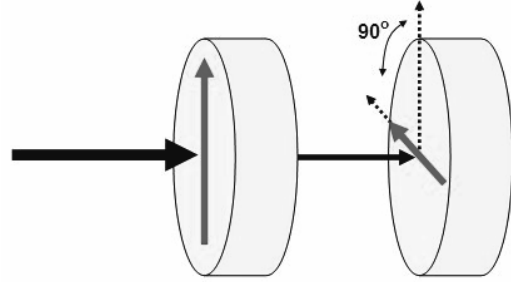


Figura 1.12: Seqüències de filtres polaritzadors

cap efecte en la llum. Si el posem a 90° no deixa passar res (figura 1.12), i si el posem a 45° en deixarà passar la meitat. Concloem que els efectes són similars entre els filtres consecutius per a partícules de spin $1/2$ i els polaritzadors de llum, si tenim en compte aquest factor 2 entre les seves orientacions relatives.

Tornem als experiments de Stern-Gerlach i avancem-nos una mica al que veurem quan enunciem els postulats de la MQ. Recordem que el resultat de l'experiment són dos possibles estats, que hem anomenat $|S_{\vec{n}}, +\rangle$ i $|S_{\vec{n}}, -\rangle$, quan mesurem en la direcció \vec{n} , i que corresponen a mesurar moments angulars $\pm\hbar/2$ en aquesta mateixa direcció. El que veurem és que aquests dos estats formen una base de tots els estats possibles en un espai vectorial de dimensió 2 i que els observables estaran representats com a operadors lineals sobre aquest espai (matrius de 2×2), amb la particularitat que la mesura feta en la direcció \vec{n} estarà representada per un operador $S_{\vec{n}}$ que té com a vectors propis precisament els vectors $|S_{\vec{n}}, +\rangle$ i $|S_{\vec{n}}, -\rangle$, amb valors propis $\pm\hbar/2$ (és a dir, $S_{\vec{n}}|S_{\vec{n}}, \pm\rangle = \pm\hbar/2|S_{\vec{n}}, \pm\rangle$), que representen els dos possibles resultats de l'experiment.

Així podem agafar com a base, per exemple, els dos vectors

$$\begin{aligned} |S_z, +\rangle &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ |S_z, -\rangle &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (1.18)$$

que, per l'aparell de Stern-Gerlach en orientació z , estan associats amb els dos possibles resultats, $\pm\frac{\hbar}{2}$, de l'experiment. Noteu el fet matemàtic que la informació sobre els vectors i els seus resultats associats es pot condensar en una matriu (operador lineal expressat en una certa base), que anomenarem S_z , tal que tingui els vectors com a autovectors i els resultats com a autovalors. Hem realitzat una abstracció ben remarcable: fer que la descripció de tot l'aparellatge experimental estigui condensada en una matriu bidimensional!

En el cas que considerem la matriu, serà, evidentment:

$$S_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.19)$$

No tenim ni idea, de moment, de com aquests vectors i operadors es transformen sota rotacions, és a dir, no sabem relacionar els vectors $|S_{\vec{n}}, +\rangle$ i $|S_{\vec{n}}, -\rangle$ amb la base que acabem d'escollir.

No obstant això, per analogia amb la llum polaritzada, podem intuir els resultats per a $|S_x, +\rangle$, $|S_x, -\rangle$, $|S_y, +\rangle$ i $|S_y, -\rangle$.

Suposem llum incident en direcció y i polaritzada linealment en direcció z . El seu camp elèctric serà $\vec{E} = E_0 \vec{k} \cos(\kappa y - \omega t)$, i si fos polaritzada en direcció x serà $\vec{E} = E_0 \vec{i} \cos(\kappa y - \omega t)$. Un filtre polaritzador en la direcció z només deixarà passar l'ona on el camp elèctric està en aquesta direcció. Si després hi posem un filtre en direcció x , no tindrem llum. Aleshores, per analogia, podem relacionar

$$\begin{aligned}\vec{E} &= E_0 \vec{k} \cos(\kappa y - \omega t) \rightarrow |S_z, +\rangle \\ \vec{E} &= E_0 \vec{i} \cos(\kappa y - \omega t) \rightarrow |S_z, -\rangle\end{aligned}\quad (1.20)$$

D'altra banda, recordem que girar el filtre polaritzador de la llum 45° té els mateixos efectes que girar l'aparell de Stern-Gerlach 90° . Si anomenem \vec{k}' i \vec{i}' els vectors unitaris girats 45° respecte als \vec{k} i \vec{i} (en el mateix pla), tenim

$$\begin{aligned}\vec{E} &= E_0 \vec{k}' \cos(\kappa y - \omega t) = \frac{1}{\sqrt{2}} E_0 \vec{k} \cos(\kappa y - \omega t) + \frac{1}{\sqrt{2}} E_0 \vec{i} \cos(\kappa y - \omega t) \\ \vec{E} &= E_0 \vec{i}' \cos(\kappa y - \omega t) = -\frac{1}{\sqrt{2}} E_0 \vec{k} \cos(\kappa y - \omega t) + \frac{1}{\sqrt{2}} E_0 \vec{i} \cos(\kappa y - \omega t)\end{aligned}\quad (1.21)$$

i, per l'analogia esmentada,

$$\begin{aligned}|S_x, +\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z, +\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z, -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\ |S_x, -\rangle &= -\frac{1}{\sqrt{2}} |S_z, +\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |S_z, -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (1.22)$$

aleshores, l'operador S_x , que té com a vectors propis els dos anteriors, és

$$S_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\quad (1.23)$$

Fixem-nos que estem dient que un estat quàntic, per exemple $|S_x, +\rangle$, és una *superposició* d'altres estats quàntics, $|S_z, +\rangle$ i $|S_z, -\rangle$. Aquest fenomen de la superposició d'estats és peculiar de la MQ i es correspon matemàticament a la suma –combinació lineal– de vectors en un espai vectorial.

Com implementem $|S_y, +\rangle$ i $|S_y, -\rangle$? Per arguments de simetria, si tenim un feix $|S_z, +\rangle$ movent-se en direcció y i sotmès a una mesura S_x , la situació ha de ser molt similar a un feix $|S_z, +\rangle$ movent-se en direcció x i sotmès a una mesura S_y . Aleshores, $|S_y, +\rangle$ i $|S_y, -\rangle$ han de ser combinacions de $|S_z, +\rangle$ i $|S_z, -\rangle$, però diferents de les trobades per a $|S_x, +\rangle$ i $|S_x, -\rangle$.

L'analogia, la trobarem un altre cop en la llum polaritzada. L'experiment fet per a un polaritzador vertical, un polaritzador a la dreta i un altre polaritzador vertical, té el mateix comportament que l'experiment amb partícules de spin $1/2$ fet per a S_z , S_y i S_z .

La llum polaritzada circularment cap a la dreta és descrita per

$$\begin{aligned}\vec{E} &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}} E_0 \vec{k} \cos(\kappa y - \omega t) + \frac{1}{\sqrt{2}} E_0 \vec{i} \sin(\kappa y - \omega t) \right) \\ &= \text{Real} \left(E_0 \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \vec{k} e^{i(\kappa y - \omega t)} + \frac{i}{\sqrt{2}} \vec{i} e^{-i(\kappa y - \omega t)} \right) \right)\end{aligned}\quad (1.24)$$

Aleshores, comparant amb el que teníem a (1.21), se'ns fa plausible adoptar les definicions

$$|S_y, +\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z, +\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}}|S_z, -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix} \quad (1.25)$$

D'altra banda, la relació per a llum polaritzada circularment cap a l'esquerra seria amb $-i$ en lloc d' i . De totes maneres, i per coherència amb el que obtindrem en el capítol de rotacions, aquesta relació es multiplica per una fase addicional no observable (i), de manera que seguim descrivint el mateix estat quàntic i, per tant,

$$|S_y, -\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}|S_z, +\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|S_z, -\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix} \quad (1.26)$$

L'operador S_y , que té com a vectors propis els dos anteriors, és

$$S_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (1.27)$$

Volem fer notar que aquestes noves superposicions –combinacions lineals del punt de vista matemàtic– han estat possibles perquè hem admès en el nostre formalisme els nombres complexos. Si no fos així, no sabríem com construir els estats $|S_y, \pm\rangle$. Així doncs, els espais vectorials que manejarem en el formalisme de la MQ seran espais vectorials sobre el cos dels nombres complexos.

Les matrius

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (1.28)$$

són les anomenades *matrius de Pauli*.

L'operador associat amb un experiment de Stern-Gerlach en una direcció arbitrària $\vec{n} = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ ve donat per

$$S_{\vec{n}} \equiv \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{n} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\varphi} \\ \sin \theta e^{i\varphi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (1.29)$$

amb vectors propis

$$\begin{aligned} |S_{\vec{n}}, +\rangle &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\varphi} \end{pmatrix} \\ |S_{\vec{n}}, -\rangle &= \begin{pmatrix} -e^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \\ \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.30)$$

En alguns llibres, l'estat $|S_{\vec{n}}, -\rangle$ es multiplica per la fase addicional $-e^{i\varphi}$ no observable.

Com hem vist abans, podem utilitzar l'aparell de Stern-Gerlach –en direcció \vec{n} – com un filtre per deixar passar només un dels estats, per exemple $|S_{\vec{n}}, +\rangle$. Diem en aquest cas que hem fet una *preparació*: l'estat de sortida queda identificat com un $|S_{\vec{n}}, +\rangle$ i a partir d'ara podem experimentar amb ell *sabent* de quin estat quàntic es tracta.

Hem de fer notar que hem parlat de rotacions en dos espais diferents. D'una banda, podem fer rotacions tridimensionals del nostre aparell de Stern-Gerlach; per exemple, podem girar l'aparell de manera que el camp magnètic passi de la direcció z a una direcció arbitrària \vec{n} . Aquestes rotacions s'expressen en termes de matrius reals de 3×3 . D'altra banda, hem considerat rotacions en l'espai bidimensional dels estats de spin. Aquestes es descriuen en termes de matrius complexes de 2×2 .

Més endavant –a la secció 2.4.3– veurem com aquests dos tipus de rotacions no són més que dues representacions diferents del concepte algebraic de grup de les rotacions.

Recordant l'analogia intuïtiva que hem desenvolupat amb la llum polaritzada, podríem tractar de generalitzar l'observació feta anteriorment sobre el fet que un gir de 45° del filtre polaritzador correspon a un gir de 90° en l'aparell de Stern-Gerlach. Vegem quines conseqüències podem extreure de suposar que un gir d'angle $\frac{\theta}{2}$ del filtre polaritzador correspon a un gir d'angle θ en l'aparell de Stern-Gerlach. Si tenim llum polaritzada verticalment i el filtre polaritzador fa un gir d'angle $\frac{\theta}{2}$ respecte a la vertical, la intensitat de la llum es reduirà en un factor $\cos^2 \frac{\theta}{2}$. Aquest, doncs, hauria de ser el factor de reducció de la intensitat d'un feix de partícules amb spin up , $|+\rangle$, que entren en un aparell de Stern-Gerlach en una direcció $\vec{n} = (\sin \theta, 0, \cos \theta)$ i que té bloquejada la sortida del component $|S_{\vec{n}}, -\rangle$. Com que l'estat de sortida és $|S_{\vec{n}}, +\rangle$, noteu que la reducció de la intensitat del feix es pot expressar, recordant (1.30), com $|\langle +|S_{\vec{n}}, +\rangle|^2$, on $\langle +|S_{\vec{n}}, +\rangle$ representa un producte escalar de dos vectors bidimensionals. Si la intensitat del feix entrant d'àtoms d'argent es redueix fins que es pot considerar que els àtoms entren a l'aparell de Stern-Gerlach separatament d'un en un, l'únic que podem fer serà una predicció probabilística p sobre si l'àtom sortirà com l'estat $|S_{\vec{n}}, +\rangle$ ($p = \cos^2 \frac{\theta}{2}$) o impactarà contra l'obstacle. Totes aquestes consideracions emergiran de manera natural dels postulats de la MQ que veurem més endavant.

1.3 El formalisme matemàtic de la MQ

L'experiment de Stern-Gerlach ens ha servit per introduir alguns dels conceptes clau de la MQ (per exemple, el principi de superposició) i la seva corresponent formalització matemàtica (combinacions lineals de vectors en espais vectorials). Ara dedicarem un apartat sencer a repassar les principals eines matemàtiques que necessitarem per al formalisme de la MQ.

1.3.1 Espais vectorials

Els espais vectorials que utilitzarem en MQ són, com ja hem avançat, sobre els complexos, de manera que els coeficients de les combinacions lineals seran en general nombres complexos. En la major part de l'exposició que en farem considerarem només el cas de dimensió finita. Cal dir, però, que el cas de dimensió infinita és molt freqüent en la MQ i també en direm algunes coses. Els resultats que presentarem es poden estendre en general a dimensió infinita, però de vegades amb importants matisacions, que ja seran comentades oportunament. A partir d'ara, doncs, considerarem espais vectorials \mathbf{H} de dimensió finita, n , sobre els complexos, és a dir, $\mathbf{H} = \mathbf{C}^n$.

Producte escalar

Aquests espais vectorials estaran dotats d'un producte escalar que generalitza al cas complex el producte escalar euclidià definit en espais vectorials sobre els nombres reals. El producte escalar (\vec{u}, \vec{v}) és una aplicació $\mathbf{H} \times \mathbf{H} \rightarrow \mathbf{C}$ que satisfà

1. $(\vec{u}, \alpha\vec{v} + \beta\vec{w}) = \alpha(\vec{u}, \vec{v}) + \beta(\vec{u}, \vec{w})$.
2. $(\vec{u}, \vec{v}) = (\vec{v}, \vec{u})^*$.
3. $(\vec{u}, \vec{u}) \geq 0$; $(\vec{u}, \vec{u}) = 0 \Rightarrow \vec{u} = \vec{0}$.

($\vec{u}, \vec{v}, \vec{w}$ són vectors qualssevol i α, β són nombres complexos; el nombre complex conjugat d' α s'escriu α^* .)

La segona propietat assegura que (\vec{u}, \vec{u}) (el producte escalar d'un vector per ell mateix) és un nombre real, cosa que, juntament amb la tercera propietat, ens permet definir la norma d'un vector,

$$\|\vec{u}\| = (\vec{u}, \vec{u})^{\frac{1}{2}},$$

que també es designa com $|\vec{u}|$ i que és estrictament positiva excepte per al zero, $\vec{0}$, de l'espai vectorial, $|\vec{0}| = 0$.

Volem fer notar també que la primera propietat, de linealitat, juntament amb la segona, impliquen que

$$(\alpha\vec{v} + \beta\vec{w}, \vec{u}) = \alpha^*(\vec{v}, \vec{u}) + \beta^*(\vec{w}, \vec{u}),$$

és a dir, que no hi ha linealitat –sinó el que se'n diu *antilinealitat*– respecte de la part dreta del producte escalar. És el preu que cal pagar per poder definir la norma d'un vector com a nombre real.

D'aquests espais vectorials sobre els complexos, dotats d'un producte escalar, en diem *espais de Hilbert*. En el cas de dimensió infinita cal assegurar, a més, una propietat de completesa que ja no detallem.

Bases ortonormals

Les bases ortonormals (b.o.) són bases formades per vectors de norma unitat i mútuament ortogonals, és a dir, tals que el producte escalar de dos vectors de la base és nul. Donada una base qualsevol $\{\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_n\}$ es pot construir una base ortonormal $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_n\}$ pel mètode de Gramm-Schmidt, que procedeix així. Definim

$$\vec{e}_1 = \frac{\vec{v}_1}{|\vec{v}_1|}$$

a continuació cerquem una combinació lineal de \vec{v}_1, \vec{v}_2 ortogonal a \vec{e}_1 . Ho és $\vec{v}_2 - (\vec{e}_1, \vec{v}_2)\vec{e}_1$, llavors definim

$$\vec{e}_2 = \frac{\vec{v}_2 - (\vec{e}_1, \vec{v}_2)\vec{e}_1}{|\vec{v}_2 - (\vec{e}_1, \vec{v}_2)\vec{e}_1|}.$$

El pas següent seria construir el vector $\vec{v}_3 - (\vec{e}_1, \vec{v}_3)\vec{e}_1 - (\vec{e}_2, \vec{v}_3)\vec{e}_2$, que és ortogonal a \vec{e}_1 i a \vec{e}_2 , i normalitzar-lo a la unitat (dividint per la seva norma) per definir \vec{e}_3 . El mètode continua d'aquesta manera.