SOBRE UN PUNTO DE VISTA HEURÍSTICO CONCERNIENTE A LA NATURALEZA DEL ESPACIO EN MECÁNICA CUÁNTICA.

Sebastian Fortin[1] - *Martín Narvaja* [2]- *Mariano Lastiri*[3]

1. Introducción

David Bohm, en el capítulo octavo de su libro *Quantum theory* reflexiona sobre la continuidad del movimiento. Observa allí que nuestras ideas más elementales sobre la posición parecen implicar que si un objeto posee una posición bien definida en un determinado instante, no es posible que esté en movimiento (Bohm, 1951). Retomaba con ello una antigua discusión: la de la infinita divisibilidad del espacio y el tiempo y sus paradojas.

El objeto del presente ensayo es contribuir a la elucidación del problema de la naturaleza del espacio en el contexto de la mecánica cuántica. Defenderemos la tesis de que resulta heurísticamente ventajoso considerar que el espacio propio de las entidades cuánticas es de carácter discreto. Argumentaremos que la *hipótesis del discreto* (la llamaremos así por contraposición a la *hipótesis del continuo*) no implica cambios sustanciales en la mecánica cuántica y ofrece un marco conceptual adecuado para comprender el éxito obtenido con el empleo de ciertas herramientas matemáticas utilizadas *de hecho* en la aplicación de la teoría.

El trabajo se estructura del siguiente modo. En primer lugar, señalaremos algunos de los antecedentes de la hipótesis del discreto, propuesta originalmente en el marco de la teoría por Heisenberg. En segundo lugar, presentaremos un ejemplo de cómo al trazar el límite de la teoría con la mecánica clásica, se presentan ciertas dificultades con la función de Wigner cuya solución habitual implica incorporar herramientas matemáticas aparentemente *ad hoc*. Argumentaremos que la adopción de la hipótesis del discreto puede resultar allí heurísticamente beneficiosa: con ella la utilización de dichas herramientas resulta tanto comprensible como justificada.

[1] Universidad de Buenos Aires (UBA) , Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (Conicet).

[2] Universidad de Buenos Aires (UBA), Universidad del Centro Educativo Latinoamericano (UCEL). Universidad del Centro Educativo Latinoamericano (UCEL). Este artículo forma parte de la investigación sobre *Fundamentación de la mecánica cuántica y de su relación con el mundo químico*, subvencionada por la UCEL.

[3] Universidad Nacional de Quilmes (UNQ), Universidad Nacional Tres de Febrero (UNTref).

Finalmente, señalaremos a algunas de las consecuencias ulteriores que podrían extraerse de la hipótesis y sus posibles desarrollos.

2. El espacio y la hipótesis del discreto

La física moderna, casi sin excepciones, califica al espacio como 'continuo'. Esta idea de continuidad surge de la consideración de la existencia continua de una partícula material en el tiempo y el espacio. Tal partícula, no podría pasar de una posición a otra sin describir una línea continua en el espacio (Maxwell, 1954, Pág. 6). En otro contexto y a partir de reflexiones similares, los griegos arribaron a las conocidas paradojas eleáticas como las de Aquiles y la tortuga o la de la flecha (Borges, 1998) . Sería, sin embargo, una labor extensa e injustificada el trazar aquí, siquiera esquemáticamente, la evolución del concepto de espacio desde la antigüedad hasta nuestros días. En consecuencia, nos limitaremos mencionar la aparición de la *hipótesis del discreto* y su parcial adopción en el contexto actual de la teoría cuántica (para referencias sobre el desarrollo del concepto de espacio remitimos al lector a Jammer 1993).

Desde el punto de vista histórico, la idea de una geometría discreta del espacio fue concebida en el ámbito de las matemáticas por Riemann a fines del siglo XIX. Roger Penrose (2004, Cap. 33) señala la existencia actual de un gran número de geometrías que incorporan elementos discretos. Se destacan particularmente los desarrollos del matemático Ahmavaara quien sugirió reemplazar el sistema de los números reales, fundamental en las matemáticas de la física convencional, por algún campo finito F, y de Raphael Sorkin, de acuerdo con quien el espacio tiempo podría concebirse en términos de un conjunto discreto, y posiblemente finito, de puntos en los cuales la noción de *conexión causal* entre puntos sería la noción fundamental (Penrose 2004, Págs. 958-9).

En el ámbito de la mecánica cuántica, la incorporación de la idea de un espacio de carácter discreto con una "distancia mínima", $\boldsymbol{l_o}$, fue propuesta por Heisenberg en el año 1938 en un intento por obtener una representación simplificada de la mecánica cuántica a fin de tratar algunos problemas en electrodinámica cuántica. En la década siguiente la idea gozó de cierta popularidad siendo adoptada por diversos físicos entre los que se cuenta Arthur March (Jammer, 1993).

De Broglie (1949) señala, adhiriendo a ideas expresadas por Niels Bohr, que dadas las restricciones cuánticas, la idea de espacio continuo de la física clásica no puede ser aceptada en el terreno de la mecánica cuántica. Bohr y De Broglie sostienen, sin embargo, que incluso siendo aquel un marco inadecuado, el espacio y tiempo continuos de la física clásica constituyen las únicas categorías que poseemos. Bohm (1951) observa correctamente, que son nuestra metafísica del sentido común o la teoría matemática, y no la física clásica, las que deben *y pueden* proveernos de nociones más adecuadas. En cualquier caso, tales ideas recalcan la inadecuación conceptual de la idea de espacio continuo en mecánica cuántica.

Sin embargo, parece necesario reconocer que la aceptación de la hipótesis del discreto implicaría un cambio drástico en las matemáticas de la física teórica. Por sólo mencionar un ejemplo, las ecuaciones diferenciales debieran ser reemplazadas, lo que supondría grandes dificultades prácticas. Volveremos sobre estas cuestiones en la sección quinta.

3. Límite clásico y Función de Wigner: algunos problemas

La sección anterior tuvo la intención de señalar la posibilidad de concebir un espacio de naturaleza discreta en el ámbito de la mecánica cuántica mencionando algunas de las dificultades matemáticas que de ello resultarían. El objeto de la presente sección es plantear el problema de la función de Wigner y algunas de las estrategias empleadas en su tratamiento. Para ello comenzaremos esbozando brevemente algunos de los rasgos de las mecánicas cuántica y clásica. Luego no referiremos al límite entre ambas mecánicas. En tal contexto podremos presentar el mencionado problema con mayor detalle.

3.1 Mecánica cuántica y mecánica clásica

La mecánica cuántica puede desarrollarse a partir de diversos formalismos matemáticos. De acuerdo con la versión más usual, el estado de un sistema, la evolución de dicho estado y las magnitudes físicas a él asociadas son definidas en un espacio vectorial particular denominado *espacio de Hilbert* (acerca del espacio de Hilbert y el formalismo de la mecánica cuántica ver Von Neumann 1949)

Cada propiedad física que el sistema puede poseer tiene asociado un observable especifico $\hat{O}$ que pertenece al espacio de Hilbert dual de H, H'. Para calcular las magnitudes de interés físico se realizan operaciones algebraicas a partir de los mencionados operadores. Así, por ejemplo, el valor medio de la magnitud física representada por $\hat{O}$ para un sistema en el estado $\hat{\rho}$, se calcula como la traza del producto de ambos operadores de estado: $\left\langle \hat{O} \right\rangle_{\hat{\rho}} = Tr\left(\hat{\rho}\hat{O}\right)$. Del mismo modo, puede calcularse probabilidad de que la propiedad física representada por el observable $\hat{O}$ adopte un valor particular.

El estado de un sistema cuántico dado tiene asociado una clase especial de vector (u operador) $\hat{\rho}$ que pertenece al espacio de Hilbert H y cumple ciertas condiciones: es un operador auto-adjunto, unitario y de traza 1 (Ballentine 1990). En tal vector se encuentra consignada toda la información que es posible tener sobre el sistema en cuestión. Para desglosarla, es menester hacer utilizar otra clase de operadores llamados observables que también son operadores auto-adjuntos.

La evolución del estado del sistema viene dada por la ecuación de Von Neumann-Schrödinger: $\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[\hat{H}, \hat{\rho}\right]$, siendo $\hat{H}$ un observable particular llamado Hamiltoniano del sistema (Omnes 2002). De este modo, la mecánica cuántica ofrece para el sistema un álgebra asociada a su espacio de Hilbert respondiendo a la ecuación de Von Neumann-Schrödinger.

Análogamente, la mecánica clásica puede representarse de acuerdo al formalismo Hamiltoniano, de acuerdo con el cual un sistema físico tiene asociado un espacio que no es vectorial, sino un espacio simpléctico de dimensión par, llamado *espacio de las fases*. Las variables de este espacio son las posiciones y los momentos de los sistemas bajo estudio. El estado de un sistema se representa por un punto en dicho espacio con cual su posición (q) y momento (p) quedan determinados. Este punto puede ser representado mediante una distribución matemática $\rho(q, p)$ en donde las variables simplemente indican las coordenadas del punto en el espacio de las fases.

De acuerdo con esta representación, la evolución del sistema viene dada por las leyes de Newton que, en el lenguaje de los corchetes de Poisson, se reducen a la ecuación $\frac{d\rho}{dt} = -\{H, \rho\}$, siendo H una función particular llamada Hamiltoniano del sistema.

Las propiedades del sistema se asocian a operadores definidos en el espacio de las fases y sus valores se calculan realizando operaciones matemáticas sobre el estado del sistema y los operadores. De este modo, la mecánica clásica tiene un álgebra asociada al espacio de las fases y responde a la ecuación de Hamilton.

Esta representación de ambas mecánicas tiene la virtud de que presenta de forma análoga las ecuaciones de las mecánicas cuántica y clásica, lo cual es ideal para establecer el límite entre ambas.

3.2 El Límite clásico de la mecánica cuántica

De acuerdo con el llamado principio de correspondencia y aceptando que la mecánica cuántica es una teoría más fundamental que la clásica, debería ser posible recuperar las leyes de esta última a partir de las de la primera. El contacto entre ambas teorías se realiza a través de la *teoría de deformaciones algebraicas* según la cual es posible deformar un álgebra hasta convertirla en otra a través de algún operador. Esto es justamente lo que se pretende en el caso del límite clásico (sobre el problema del límite clásico ver

El operador utilizado en el caso del límite en cuestión es el denominado operador de Weyl: $\hat{D}(q, p, \hat{q}, \hat{p})$, que es una función de las variables clásicas posición (q) y momento (p), y los operadores cuánticos de posición ($\hat{q}$) y momento ($\hat{p}$). Este operador se define en el espacio de Hilbert y su función es asociar objetos del espacio de Hilbert con objetos del espacio de las fases. El mismo esta construido de modo tal que aplicado a la ecuación de Von Neumann-Schrödinger arroja como resultado la ecuación de Hamilton. Esto es:

$$\hat{D}(q, p, \hat{q}, \hat{p}) \bullet \left(\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{H}, \hat{\rho} \right] \right) \rightarrow \frac{d\rho}{dt} = -\{H, \rho\}$$

Si se aplica este operador a un estado cuántico $\hat{\rho}$ resulta una distribución $\rho(q, p)$ que habita el espacio de las fases y se denomina función de Wigner (Campos 2005). La distribución no es ya una distribución puntual, como ocurría en el caso clásico antes mencionado, sino de una distribución con volumen que se interpreta idealmente como una distribución de probabilidad. Es decir, dado un estado cuántico $\hat{\rho}$, que según la cuántica no tiene posición ni momento definidos, se pretende obtener una distribución de probabilidad en el espacio de las fases que de cuenta de cuál es la probabilidad de que el sistema tenga definido un dado par de posición y momento clásicos. Siguiendo este esquema se puede obtener el limite clásico recuperando las leyes de la mecánica clásica.

3.3 el problema de la función de Wigner

Aunque el procedimiento para obtener la función de Wigner fue considerado exitoso durante algún tiempo, cuando el formalismo se aplico a ciertos sistemas de interés y se observo que en algunas regiones la función adopta valores negativos. Este resultado dificulta interpretar la distribución obtenida en términos de una densidad de probabilidad por motivos obvios: toda probabilidad debe ser positiva.

El modo usual de salvar esta dificultad se basa en la simple observación de que las regiones de probabilidad negativa son acotadas y de volumen casi nulo. Es decir: las distribuciones obtenidas son funciones positivas excepto en las cercanías de algunos puntos donde aparecen picos negativos muy agudos. La región que ocupa uno de estos picos es realmente muy pequeña, de hecho tiene una extensión del orden de la constante de Planck ($h \approx 10^{-23}$ cm.).

En este punto las reacciones de los investigadores que utilizan estas técnicas para estudiar sistemas de interés que tienen correlato experimental, se dividen en dos clases. Algunos optan por ignorar completamente estos picos negativos en la probabilidad, esto es, recortan los picos negativos y los reemplazan por cero. Dado lo agudo de los picos, las regiones en donde se anula artificialmente la probabilidad son despreciables y las predicciones que se obtienen corresponden con las mediciones dentro del margen experimental razonable. Otros investigadores, más preocupados por la prolijidad y consistencia conceptuales, observaron que es posible realizar un grano grueso sobre la función de Wigner. O sea, dividir el espacio de las fases en una cuadricula con celdas de tamaño del orden de h y promediando los resultados de la función de Wigner en cada celda. Dada la magnitud de este grano grueso, la función obtenida es casi igual a la función original. Sin embargo, la función resultante queda definida positiva permitiendo interpretar sus resultados como una probabilidad.

De este modo aplicando el operador de Weyl y luego realizando el grano grueso en el espacio de las fases se obtiene una densidad de probabilidad positiva (función de Husimi) que es adecuada para construir el límite clásico. En los artículos donde se utilizan estas técnicas se construye la función de Husimi del modo descrito en un espacio de las fases continuo y se piensa al grano grueso como un procedimiento matemático cuyo fin es eliminar los picos negativos de la función de Wigner sin atribuir un significado físico a dicho recurso matemático.

4. Valor heurístico de la hipótesis del discreto

En la sección anterior hemos planteado la dificultad que se presenta en el caso del límite clásico para interpretar la función de Wigner en términos de probabilidad. Señalamos allí que la utilización de la función de Husimi introduce un grano grueso que permite lidiar con tales dificultades. Sin embargo, el éxito en la utilización de esta última ante el fracaso de la primera no parece tener un fundamento físico sólido, con lo cual la implementación de la función de Husimi presenta el aspecto de no ser sino un recurso matemático tan *ad hoc*, si bien más elegante, como el recurso de la eliminación explícita de los picos negativos. Retomaremos ahora la cuestión de la hipótesis del discreto tratada en la sección segunda.

Considerando las dificultades matemáticas que implica la geometría de un espacio discreto, la mayor parte de los físicos ha continuado utilizando la geometría continua hasta la actualidad. Pero ello no supone que de este modo se haya resuelto el problema conceptual denunciado por de Broglie. Como señala de forma polémica Max Jammer, a quien hemos seguido en el desarrollo de estas cuestiones: “Así, el espacio continuo continúa prestando un valioso servicio, incluso en física nuclear, pero sólo como una ficción conveniente para la matematización estadística de la realidad física”.

Así, al parecer, nos encontraríamos ante un dilema. Por un lado, es posible conservar formalmente la idea de un espacio de naturaleza continua y seguir haciendo uso de los recursos matemáticos que tal espacio permite; el costo es una gran oscuridad conceptual. Por otro lado, es posible adoptar la hipótesis de un espacio discreto; el costo es un aumento considerable en la complejidad de la matemática a emplear. Esbozaremos ahora algunos motivos, vinculados al ejemplo desarrollado, para inclinarnos por la segunda de las opciones mencionadas.

Algunas de las dificultades conceptuales denunciadas por De broglie y Bohr, y la justificación de la utilización de la función de Husimi como algo más que un recurso *ad hoc* poseen una misma solución: la hipótesis del discreto.

Resulta curioso el papel que juega la constante de Planck en el grano grueso empleado en el límite con la mecánica clásica y es sugestivo que aparezca como tamaño fundamental del espacio. Más curioso aun resulta que lo mismo ocurra suceda en el procedimiento análogo que se realiza habitualmente para hallar el límite cuántico con la termodinámica. Y una extrañísima casualidad que "Dado que dos partículas cuya distancia es menor que $\boldsymbol{l_o}$ no pueden ser distinguidas por experimentos de difracción, $\boldsymbol{l_o}$ deviene en una distancia universal. La distancia entre partículas es, después de todo, siempre un múltiplo de $\boldsymbol{l_o}$... La aparición reiterada de en la física atómica de una distancia del orden de 10^{-13} cm, como en el radio clásico del electrón, el rango de las fuerzas nucleares, o la energía crítica de 10^8 electron-volts, correspondiendo a una amplitud de onda de 10^{-13} cm, lleva asumir que esta distancia puede ser identificada con $\boldsymbol{l_o}$." (Jammer, 1993, Pág. 188).

Adoptada la hipótesis del discreto, todo esto deja de resultar curioso, y aparece como una consecuencia natural. Asumiendo la hipótesis de que el espacio es discreto en tal escala, se comprende bien el éxito de la función de Husimi y el fracaso de la función de Wigner. La herramienta matemática encuentra así una justificación a partir de una hipótesis física sobre la naturaleza del espacio y se distingue de la eliminación arbitraria.

Conviene agregar dos consideraciones finales. En primer lugar, que la adopción de la hipótesis del discreto de por sí presenta algunos desafíos conceptuales. Es decir el abandono sugerido de al idea de que el espacio es continuo, si bien resulta ventajoso, no soluciona por sí solo los problemas conceptuales acerca de la naturaleza del espacio del mundo cuántico. En segundo lugar, que parte del dilema planteado más arriba es un tanto engañoso. Adoptar la hipótesis del discreto no implica necesariamente renunciar a la matemática del continuo. En al medida en que se recuerde el carácter heurístico de una concepción discreta del espacio cuántico, al matemática del continuo puede utilizarse como herramienta útil; sólo hay que tener presente que no es otra cosa que eso, una herramienta.

5. Conclusiones

Recapitulemos lo dicho hasta aquí. Comenzamos presentando la hipótesis del discreto, es decir, de una geometría discreta, en el contexto de la matemática. Observamos allí que la misma fue propuesta en el ámbito de la mecánica cuántica por Heisenberg y utilizada más recientemente en diversos contexto dentro de la teoría. Presentamos luego algunas cuestiones referidas al límite clásico de la mecánica cuántica con la clásica. Señalamos entonces el problema de los picos negativos de la función de

Wigner y cómo puede tratarse matemáticamente. Argumentamos entonces que tales procedimientos matemáticos, así como otros análogos utilizados en el límite con la termodinámica, podían encontrar justificación en la hipótesis del discreto.

Como perspectiva para ulteriores desarrollos, creemos que la asunción del carácter discreto del espacio con las características antes mencionadas permitiría interpretar de forma natural el principio de indeterminación de Heisenberg y recuperar, en algunos modelos como el del átomo de Bohr la idea de 'trayectoria'.

A modo de conclusión, entonces, una propuesta: adoptemos, más no sea como punto de vista heurístico, la hipótesis del discreto; veamos a dónde nos lleva.

6. Bibliografía.

Ballentine, L. E. (1990), *Quantum Mechanics*. New York: Prentice Hall.

Bohm, D. (1951) [1989], *Quantum Theory*, Dover Publications, New York.

Borges, J. L. (1998) "Avatares de la tortuga" en *Discusión*. Madrid, Alianza.

Campos, D. (2005) *Matemática aplicada, Un puente entre el universo cuántico y el mundo clásico*, Revista electrónica de difusión científica, Universidad Sergio Arboleda, Bogotá. www.usergioarboleda.edu.co/civilizar/**matematicas**/Pdfs/D**campos**.pdf

Cohen, D. (1989), *An introduction to Hilbert space and Quantum Logic*. New York: Springer-Verlag.

De Broglie, L. (1949) "L' espace et le temps dans la physique quantique". En, *Revue de Metaphysique et morale*. núm. 54, année nº 2,pp. 113-25. Paris.

Hughes, R. I. G. (1989), *The Structure and Interpretation of Quantum Mechanics*, Harvard University Press, Cambridge MA.

Jammer, M. (1993) *Concepts of space. The history of Theories of Space in Physics*. (3ª ed. aumentada), New York: Dover Publications.

Maxwell, J. C. (1954) *A Treatise on Electricity and Magnetism* (Vol. I). New York, Dover Publications.

Omnes, R. (2002) *Decoherence*, 'Irreversibility and the Selection by Decoherence of Quantum States with Definite Probabilities', *Physical Review A*, 65, 052119.

Penrose, R. (2004) *The road to reality*. London: Random House.

Von Neumann, J (1949) *Fundamentos matemáticos de la Mecánica Cuántica*, Madrid, Instituto de matemáticas "Jorge Juan".