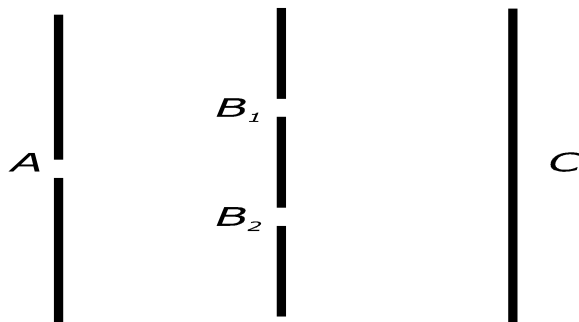


# FÍSICA QUÀNTICA 7

## L'EXPERIMENT DE LES DUES ESCLETXES



Un feix d'electrons provinents d'A "passa a través de les esclertes  $B_1$  i  $B_2$ " i incideix en C. A continuació podem fer les experiències següents:

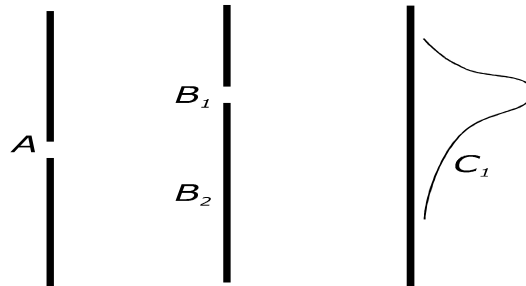
1-Tapem l'esclerta  $B_2$  i obrim la  $B_1$ : els electrons incideixen en C amb una distribució  $C_1$ .

2-Tapem l'esclerta  $B_1$  i obrim la  $B_2$ : els electrons incideixen en C amb una distribució  $C_2$ .

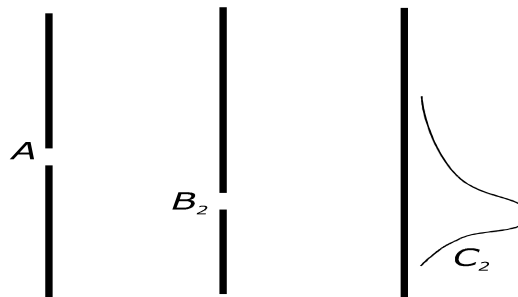
3-Obrim les dues esclertes: els electrons incideixen en C amb una distribució  $D$  que no coincideix amb  $C_1+C_2$ .

Tot l'anterior, que ocorre malgrat que els electrons estiguin prou separats entre ells, s'observa a les tres figures que podem veure a continuació.

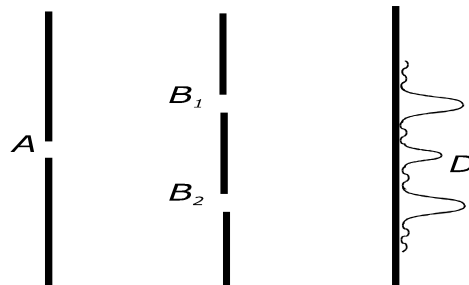
1-Tapem l'esclletxa  $B_2$ :



2-Tapem l'esclletxa  $B_1$ :



3-Obrim les dues esclletxes:



El resultat és sorprenent davant del raonament següent:

- Cada electró passa per  $B_1$  o  $B_2$  alternativament.
- Si l'electró passa per  $B_1$ , tenim la distribució  $C_1$ .
- Si l'electró passa per  $B_2$ , tenim la distribució  $C_2$ .
- Per tant, la distribució final serà  $D=C_1+C_2$ .

Si a), b) i c) són certes, hom dedueix d). Sabem, però, que d) és falsa i, per tant, a), b) o c) són falses. Com que b) i c) són experimentalment certes, hom conclou que l'expressió a) és falsa.

Naturalment, per obtenir aquesta conclusió hem emprat la lògica convencional. La conclusió, però, és paradoxal. En tota paradoxa hi ha implícita una fal·làcia, quelcom que se'ns escapa al nostre raonament.

Una possible solució l'obtenim renunciant a la lògica clàssica. La conclusió final serà la correcta i no caldrà canviar cap premissa. Hi ha, però, un altre camí més adient que sense canviar la lògica ens força a *canviar la nostra manera de pensar*. En efecte:

- Acceptar a) implica acceptar l'assignació a l'electró de propietats objectives, en aquest cas les de passar per una esclatxa concreta i única, *prescindint de la seva manifestació*.

- En lloc de l'anterior, diem que l'estat de l'electró és *una mescla coherent* de diferents possibilitats i únicament quan l'electró se'ns *manifesti* de determinada manera, podem fer afirmacions concretes.

- Quan obrim les dues esclatxes, l'electró no se'ns manifesta passant per una esclatxa única, no podem utilitzar el connectiu "O" per dir que l'electró passa per una esclatxa O l'altra, no tenim una incertesa estadística i, per tant, la paradoxa es fon.<sup>38</sup>

L'única cosa que podem afirmar és que l'electró es troba en un *ESTAT* que fa que la seva *manifestació observable* esdevingui possible en un determinat sentit amb una *probabilitat* concreta (Bell emprà el terme "*beable*", en lloc d'observable, per expressar el fet de la *capacitat* per a una manifestació concreta). Això és equivalent, sovint, a l'assignació a l'electró de propietats *ondulatòries*, com sembla deduir-se de les distribucions anteriors.

La interferència de  $C_1$  i  $C_2$  per obtenir D es pot explicar mitjançant la suma de *les amplituds de probabilitat* que l'electró passi per  $B_1$  o  $B_2$ , en lloc de la suma de les probabilitats corresponents (vegeu l'apèndix 2).

Naturalment sorgeix espontània la qüestió de si l'electró és una partícula (com sembla deduir-se de *l'efecte fotoelèctric*) o una ona (com sembla indicar l'experiment de les dues esclatxes). Segons de *Broglie* l'electró és una partícula *i* una ona (*l'ona pilot real* que cavalca amb la partícula). Aquesta concepció fou rebutjada i oblidada ràpidament degut a l'*elecció* d'una altra opció teòrica (la interpretació de *Bohr* de *Copenhaguen*). Més endavant *Bohm* la

recuperà i Bell l'acceptà, en part, com a ajuda a la reflexió sobre el significat de la física quàntica. En la interpretació de Bohm no apareixen les separacions entre sistemes quàntics o clàssics (és la *totalitat* del món la que intervé en els processos), l'indeterminisme (la nostra ignorància ens impedeix conèixer-ho tot), ni els problemes del col·lapse i de l'observador (perquè no hi són).

El *principi de complementarietat de Bohr* ens expressa aclaridorament la *contradicció aparent* deguda a la impossibilitat de manifestacions corpusculars i ondulatories simultàniament: els sistemes quàntics no són ni partícules ni ones. És *la unió entre el sistema i el seu entorn* la que provoca la manifestació corpuscular o ondulatoria. Ambdues no representen propietats objectives del sistema quàntic corresponents al "nostre món de cada dia", sinó propietats manifestades de la totalitat del sistema i el seu entorn.

*És amb l'observació acurada dels fenòmens i amb l'assumpció que el seu absurd aparent apareix només a causa del "sentit comú" format pel conjunt de prejudicis acumulats fins arribar als divuit anys (en paraules d'Einstein) que podrem crear nous conceptes que ens transmetin una comprensió més subtil del món.*

Modificant l'experiment amb la col·locació de detectors davant de cada escletxa, *forcem la manifestació* i tenim una distribució  $D=C_1+C_2$ . Això ens indica que quan l'electró es *manifesta*, el seu *ESTAT pot canviar*.

Per resumir un xic tot l'anterior, podem reflexionar així:

- Els sistemes quàntics pertanyen al nostre món, amb propietats, tanmateix, diferents de les convencionals i quotidianes.

- Tot sistema quàntic es troba en un *ESTAT* que ens és inabastable. Només en l'acte de la *manifestació* podem "conèixer-lo" lleugerament.

- *L'ESTAT* del sistema fixa les *probabilitats de les diferents manifestacions possibles a partir del seu pla d'existència*.

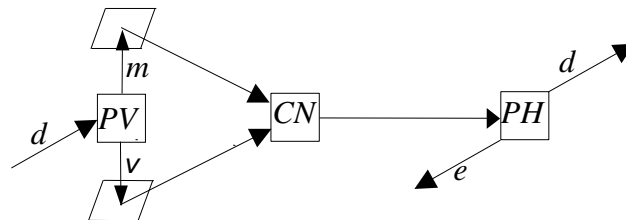
- Quan el sistema es manifesta el seu *ESTAT* canvia *generalment*.

- És, per altra banda, intuïtiu que *l'ESTAT* d'un sistema evolucioni degut a la seva pròpia dinàmica, tot variant el seu mode concret de manifestar-se.

- En principi, no podem assignar al sistema quàntic propietats objectives; *res no ens és donat, però molt es pot manifestar*.

L'experiment de les dues esclatxes ens aboca plenament dins de les paradoxes dels sistemes quàntics. En realitat, d'una manera o d'una altra acabem sempre aterrant en ell quan hem de parlar de l'estranyesa quàntica: és el que passa amb l'experiència que exposem a continuació, equivalent lògicament a l'anterior, i que resulta tan o més sorprenent.

Més endavant veurem que una partícula pot tenir un moment angular intrínsec, anomenat *espín*. Quan un conjunt d'electrons amb l'espín horitzontal, cap a la dreta ( $d$ ) o cap a l'esquerra ( $e$ ), entra dins d'un polaritzador vertical ( $PV$ ) el 50% d'ells surt amb l'espín cap amunt ( $m$ ) i un altre 50% amb l'espín cap avall ( $v$ ). Tenim resultats anàlegs intercanviant tots els papers horitzontal/vertical.



A la figura anterior podem visualitzar l'experiment.

Un grup d'electrons amb espín horitzontal  $d$  entra al polaritzador vertical  $PV$ . Els electrons amb espíns  $m$  i  $v$  se separen, passen després per la caixa negra  $CN$  i més tard ho fan per un polaritzador horitzontal  $PH$ . Realitzem aquestes experiències:

1-No deixem que els electrons  $m$  passin a través de  $CN$ . A la sortida de  $PH$  hi ha un 50% d'electrons  $e$  i un 50% d'electrons  $d$ .

2-No es deixa que els electrons  $v$  passin a través de  $CN$ . A la sortida de  $PH$  hi ha també un 50% d'electrons  $e$  i un 50% d'electrons  $d$ .

3-Es deixa que els electrons  $m$  i  $v$  passin a través de  $CN$ . Hi haurà a la sortida de  $PH$  un 50% d'electrons  $e$  i un 50% d'electrons  $d$ , com semblaria "lògic"? No! El 100% dels electrons a la sortida de  $PH$  són  $d$ !

L'anterior ens demostra que els resultats obtinguts no són fruit de la nostra ignorància sobre el camí que segueix un sistema quàntic quan no se'ns ha manifestat. Si així fos, la probabilitat final de tenir una partícula  $d$  s'hauria de trobar, d'acord amb el

càlcul de probabilitats, com a suma de les probabilitats degudes als diferents camins,  $0.5 \times 0.5 + 0.5 \times 0.5 = 0.5$ , la qual cosa és experimentalment falsa. Això ens ve a dir que les probabilitats que apareixen no ho fan com a causa d'una ignorància de tipus estadístic, sinó que són intrínseques a la *unió coherent* de les diferents *potencialitats* en què es troba el sistema quàntic.

## EL FORMULISME QUÀNTIC

El formulisme matemàtic de la *física quàntica* es recolza en els punts següents:

1-L'*ESTAT* d'un sistema quàntic ve representat per un vector (ket) d'un espai de *Hilbert*.

2-Cada magnitud física observable ve representada per un operador hermític (*OBSERVABLE*).

3-Els valors possibles d'una magnitud en el pla de la manifestació són els valors propis de l'operador corresponent.

4-A partir de l'expansió del ket en funció dels vectors propis (*coherència*) podem conèixer la probabilitat de trobar un valor propi en la manifestació (vegeu l'apèndix 2).

5-Després de la manifestació amb el valor propi  $\lambda_k$  l'estat del sistema es comporta "*com si*" esdevingués  $|e_k\rangle$ , vector propi corresponent a  $\lambda_k$ , quant al càlcul de les probabilitats successives. Aquest fet s'anomena *col·lapse* de l'estat.

*La separació conceptual entre l'evolució d'un estat quàntic i el seu col·lapse, real o no, quan interacciona amb un sistema macroscòpic resulta, però, poc satisfactòria conceptualment.*

Determinades proposicions de la lògica estàndard ja no es verificaran experimentalment. Així, la fórmula lògica  $A \Rightarrow B \vee A$  no resultarà vàlida, perquè la manifestació d'*A* no implica l'aparició posterior successiva de *B* o *A*, degut al col·lapse quàntic paral·lel a cada manifestació. No és necessària una nova "*lògica quàntica*": el que cal és reconèixer que *les propietats quàntiques no tenen la disponibilitat permanent que demana la lògica aristotèlica*.

6-Els operadors que commutïn podran ésser diagonalitzats simultàniament i les seves magnituds es manifestaran a la vegada, *sense dispersió a partir del seu estat propi comú*.

7-Experimentalment hom comprova que l'anterior no és aplicable a les coordenades espacials i als impulsos. Podem parlar de les coordenades o dels impulsos amb dispersió nul·la per separat, però no pas d'ambdós alhora.

Fixem-nos que els principis quàntics, altrament al que passa amb la relativitat general, no poden ser deduïts per un raonament lògic fet pas a pas. Ens són donats. Segons *Feynman*, ningú entén el que la física quàntica significa realment: cal acceptar-la. I *Bohr* afegeix que si algú no s'escandalitza pels principis i les conclusions de la física quàntica és que no l'ha entès realment.

Un sistema pot perdre la seva *coherència quàntica* per diferents motius. Això ocorre en el col·lapse i en la majoria dels sistemes macroscòpics: es tracta de la *incoherència quàntica*.

En un sistema macroscòpic format per un gran nombre de subsistemes idèntics no ens serà possible en general conèixer l'estat quàntic precís de cadascun d'aquells. Aleshores, tenim una *mescla* de subsistemes dels quals només sabem les probabilitats  $P_s$  dels estats *purs*  $|\varphi_s\rangle$  en què es troben. Les probabilitats d'un estat pur són probabilitats *essencials* i no un subproducte de la nostra ignorància, altrament al que ocorre amb les noves probabilitats  $P_s$  que tindrien un rerefons estadístic en el sentit convencional.

Un estat  $|\varphi\rangle$  definit en la base  $|e_k\rangle$  direm que és un estat *pur coherent* d'estats  $|e_k\rangle$  amb les probabilitats essencials  $|\langle e_k|\varphi\rangle|^2$ .

L'estudi d'una *mescla d'estats purs*  $|\varphi_s\rangle = \langle e_k|\varphi_s\rangle \cdot |e_k\rangle$  amb probabilitats  $P_s$  es facilita mitjançant l'*operador densitat*

$$\rho = \sum_s |\varphi_s\rangle \langle \varphi_s| P_s$$

que té per matriu  $\rho_{mn} = \langle e_m|\sum_s |\varphi_s\rangle \langle \varphi_s| P_s|e_n\rangle = \sum_s P_s \langle e_m|\varphi_s\rangle \langle \varphi_s|e_n\rangle$ .

És fàcil veure que  $\rho_{nn}$  ens dóna la probabilitat que un subsistema es manifesti amb el valor propi  $\lambda_n$  corresponent a  $|e_n\rangle$  i que, per tant,  $\text{traça}(\rho) = 1$ . També es comprova que, en general,  $\text{Tr}(\rho^2) < 1$ , excepte si tenim un estat pur en què  $\text{Tr}(\rho^2) = 1$ .

Amb un observable  $T$  amb matriu  $T_{nk} = \langle e_n|T|e_k\rangle$  podem calcular el seu valor esperat

$$\bar{T} = \sum_s P_s \langle \varphi_s|T|\varphi_s\rangle = \text{Traça}(\rho T)$$

La matriu densitat recull sintèticament tota la informació disponible i pot ser la mateixa per a situacions reals ben diferents.

Donada una base vectorial, a partir del conjunt de vectors propis d'un operador, podrem expressar els observables i els estats en aquesta representació.

**La novetat essencial de la física quàntica, davant de la clàssica, està en l'evolució d'un estat pur coherent, format per un conjunt d'estats propis ontològicament preexistents: hi ha una unió total entre l'estat d'un sistema i el conjunt de les manifestacions potencials que ell pot tenir.**

Si elegim una representació de coordenades i generalitzem el que s'afirma a l'apèndix 2, tindrem una funció complexa  $\varphi(x, y, z, t)$  (la funció d'ona) que normalitzarem així:

$$\int_{V \text{ total}} |\varphi(x, y, z, t)|^2 \cdot dV = 1$$

El producte escalar l'obtidrem mitjançant

$$(f, g) = \langle f | g \rangle = \int_{V \text{ total}} f^* \cdot g \cdot dV$$

El significat de

$$\int_V |\varphi(x, y, z, t)|^2 \cdot dV$$

serà el de la probabilitat de manifestació dins d'un volum  $V$ .

Cada observable tindrà assignat un operador *expressable* en la representació de què parlem.

Amb la representació d'impulsos  $\varphi(p_x, p_y, p_z, t)$  parlaríem de la probabilitat que la manifestació de l'impuls estigués en tal domini, etc. Cada operador tindria una expressió diferent de l'obtinguda a la representació de coordenades.

*Cal insistir en el fet que hi ha moltes possibles representacions. Els vectors i operadors no varien, però sí la seva expressió.*

Les paradoxes dels dos experiments que hem vist anteriorment es resoldrien fàcilment així:

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= (A, \varphi) \cdot A(x) + (B, \varphi) \cdot B(x) \Rightarrow \varphi^2(x) = [(A, \varphi) \cdot A(x) + (B, \varphi) \cdot B(x)]^2 = \\ &= [(A, \varphi) \cdot A(x)]^2 + [(B, \varphi) \cdot B(x)]^2 + 2 \cdot [(A, \varphi) \cdot A(x) \cdot (B, \varphi) \cdot B(x)] \neq \\ &\neq [(A, \varphi) \cdot A(x)]^2 + [(B, \varphi) \cdot B(x)]^2 ! \end{aligned}$$



Això ens indica que la probabilitat de trobar una partícula en un punt final  $x$  no és igual a la suma de les probabilitats corresponent als dos camins  $A$  i  $B$ , degut al terme d'*interferència de probabilitats*

$$2.[(A, \varphi) \cdot A(x) \cdot (B, \varphi) \cdot B(x)]$$

A partir d'ara treballarem, al marc del que s'anomena la *me-cànica ondulatòria*, amb la representació de coordenades i ens plantejarem aquestes importants qüestions:

Quina és l'expressió dels diferents operadors?

Com evolucionen els estats i operadors representats?

## L'EVOLUCIÓ

El col·lapse quàntic és quelcom que esdevé al pla de la nostra experiència. L'evolució quàntica d'un sistema, però, ocorre fora d'aquest pla. Per al seu estudi podem utilitzar tres camins diferents o, el que és el mateix, tres *imatges*:

a) *Imatge de Schrödinger*: els estats canvien i els operadors romanen constants.

b) *Imatge de Heisenberg*: només canvien els operadors.

c) *Imatge de Dirac, de Tomonaga o de la interacció*: els operadors i estats canvien.

Una *transformació unitària* farà el pas d'una a una altra imatge. Aquesta transformació deixarà invariants les propietats físiques (vegeu l'apèndix 2).

Si representem per  $\delta$  el canvi dinàmic de les variables, obtindrem finalment:

a) *Imatge de Schrödinger*:

\* Evolució dels estats:  $i\hbar \delta|\varphi\rangle / \delta t = H|\varphi\rangle$  (vegeu l'apartat següent sobre *dinàmica quàntica*).

\* Evolució dels operadors:  $\delta T / \delta t = 0$

b) *Imatge de Heisenberg*:

\* Evolució dels estats:  $\delta|\varphi\rangle / \delta t = 0$ .

\* Evolució dels operadors: amb la no-dependència explícita del temps i mitjançant una transformació unitària obtenim  $\delta T / \delta t = (1 / i\hbar) \cdot [T, H]$ .

c) *Imatge de Tomonaga:*

Descomponem l'operador  $H=H_0+H_1$  i, a través d'una transformació unitària, trobem finalment el següent:

\*  $H_0$  no canvia els estats, però sí, els operadors, com a la imatge de Heisenberg; en particular  $H_1$  canvia així:  $\delta H_1 / \delta t = (1 / i\hbar) \cdot [H_1, H_0]$ .

\*  $H_1$  a partir de la seva evolució canvia els estats segons  $i\hbar \delta |\varphi\rangle / \delta t = H_1 |\varphi\rangle$ .

Recordem que a les diferents representacions tenim els mateixos vectors i operadors i només varien les seves expressions. A les imatges evolutives, altrament, tenim diferents vectors i operadors, però les propietats mètriques (i per tant les físiques) no canvien: així, per a un observable físic concret no variaran els seus valors propis, valors mitjans ni dispersions.

A partir d'ara treballarem generalment amb la imatge de *Schrödinger*. Quan estudiem la interacció de partícules emprarem la imatge de *Tomonaga*. No tindrem en compte el càlcul matricial alternatiu de *Heisenberg*, de gran importància en la història de la física quàntica i equivalent matemàticament a l'anterior.

## DINÀMICA QUÀNTICA

Si tenim un estat caracteritzat per la funció d'ona  $\varphi_k$  representativa d'un vector propi d'un cert operador amb valor propi  $\lambda_k$ , ell es manifestarà amb tota seguretat amb el valor  $\lambda_k$  corresponent a l'observable. Podem dir el mateix amb el vector propi  $\varphi_h$  i el seu valor propi  $\lambda_h$ . Tota combinació lineal  $a \cdot \varphi_k + b \cdot \varphi_h$  representarà un estat que es manifestarà amb els valors  $\lambda_k$  i  $\lambda_h$ , segons les probabilitats marcades per  $a^2$  i  $b^2$ , si el vector està normalitzat. Generalitzant l'anterior, si  $|\varphi\rangle$  i  $|\mu\rangle$  representen dos possibles estats, també ho serà una combinació lineal d'ambdós. Això és el *principi de superposició*.

El principi de superposició ens indica que l'evolució de la funció d'ona vindrà fixada per la relació  $i\hbar \partial \varphi / \partial t = T \varphi$ , on  $T$  és un operador lineal que cal determinar.

L'estudi que realitzarem a continuació ens permetrà identificar l'operador  $T$  amb el hamiltonià  $H$ .

Expressem ara la funció d'ona a partir de la relació deduïda per a les ones electromagnètiques en l'aproximació feta a l'apartat del capítol 5 sobre *la propagació dels raigs de llum*:

$$\varphi = \varphi_0 \cdot \exp(iS / \hbar)$$

, on  $S$  és l'acció i  $\varphi_0$  és *lentament variable*. D'aquí deduïm

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial S}{\partial t} \cdot \varphi$$

i, per tant,  $T = -\partial S / \partial t = H$ .

L'evolució vindrà donada, doncs, per l'equació

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = H\varphi$$

, on  $H$  és l'operador hamiltonià, que haurem de deduir de la funció de *Hamilton* del sistema.

Si  $\delta t \rightarrow 0$ ,  $\varphi(t + \delta t) \cong (1 + (1 / i\hbar) \cdot H\delta t) \cdot \varphi(t) = \bar{U}\varphi(t)$ . Si  $H$  és hermitic,  $\bar{U}$  serà unitari. Amb la composició d'operadors unitaris infinitesimals ***l'estat evolucionarà segons***  $\varphi = U\varphi_0$ , ***amb U unitari i***  $\langle \varphi | \varphi \rangle$  ***invariable*** (vegeu l'apèndix 2).

Anem ara a esbrinar la forma de l'operador corresponent a l'impuls, com a pas previ per obtenir  $H$ , raonant per *analogia*.

1-La invariància temporal d'un hamiltonià clàssic ens condueix a la conservació de l'energia i l'operador hamiltonià està directament relacionat amb la variació temporal de la funció d'ona.

2-La invariància per translació espacial del hamiltonià clàssic és causa de la conservació de l'impuls. Aquest estarà directament relacionat amb la variació espacial de la funció d'ona per analogia.

Amb l'aproximació feta anteriorment i tenint en compte que  $\partial S / \partial x_j = \mathbf{P}^j$ , impuls generalitzat, obtenim

$$\bar{\mathbf{P}} = -i \cdot \hbar \cdot \nabla$$

En el que segueix identificarem l'impuls generalitzat amb l'impuls. Més endavant, quan deduïm l'equació de *Dirac*, farem la distinció entre ambdós conceptes.

A través del *principi de correspondència*, podrem trobar l'operador hamiltonià a partir de la hamiltoniana mitjançant el canvi

$$\bar{p}^2 / 2m \rightarrow (-i\hbar \cdot \nabla)^2 / 2m = -(\hbar^2 / 2m)\Delta$$

Si la partícula es mou dins d'un potencial  $V(x,y,z)$  amb l'energia potencial adscrita  $U(x,y,z)$ , tindrem finalment

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = H\varphi \text{ amb } H = -(\hbar^2 / 2m)\Delta + U$$

, que és l'equació de Schrödinger corresponent a un sistema quàntic d'una partícula no relativista.

Quan treballem amb sistemes amb diferents partícules, obtindrem l'equació de Schrödinger  $i\hbar \partial \varphi / \partial t = H\varphi$ , on  $H$  serà l'operador hamiltonià trobat a partir de la hamiltoniana clàssica pel principi de correspondència i  $\varphi$  serà funció de les coordenades de totes les partícules  $i$ , en el cas que aquestes siguin independents, dependrà de les expressions factorials de les funcions d'ona individuals<sup>13</sup>.

Podem fer aquests comentaris a l'equació de Schrödinger:

a) A partir de la densitat de probabilitat  $P(\vec{r}, t) = \varphi^* \cdot \varphi$  i amb la definició de  $\vec{S}(\vec{r}, t) = (\hbar / 2im)(\varphi^* \cdot \nabla \varphi - \varphi \cdot \nabla \varphi^*)$  com a densitat del corrent de probabilitat, hom arriba a l'equació de continuïtat i a la seva expressió integral equivalent

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \text{div} \vec{S} = 0 \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} \int_V P(\vec{r}, t) \cdot dV = - \int_{\sigma} \vec{S} \cdot d\vec{\sigma}$$

, que ens dóna la variació de la probabilitat de trobar la partícula en un cert volum a partir del flux del vector  $\vec{S}$  a través de la superfície que l'envolta. Si la funció d'ona tendeix a zero a grans distàncies, l'esmentada probabilitat no varia per al volum total i la normalització de la funció d'ona es conserva durant l'evolució.

b) El teorema d'Ehrenfest ens indica que la variació del valor mitjà de l'impuls d'una partícula està relacionada amb el valor mitjà del gradient d' $U$ , segons l'expressió coneguda clàssicament. A partir de l'anterior, comprovem que les lleis clàssiques apareixen en el límit d'algunes lleis quàntiques quan  $\hbar \rightarrow 0$  i la funció d'ona està condensada puntualment.

L'anterior, però, no ocorre amb totes les lleis quàntiques, perquè hi ha fenòmens que són específicament quàntics.

c) Dirac i Jordan han demostrat l'equivalència entre els càlculs matricial de Heisenberg i ondulatori de Schrödinger, semblantment al que passa entre els formulismes de Hamilton i de Hamilton-Jacobi, límits clàssics dels dos anteriors.

## EL PRINCIPI D'INCERTESA

En representació de coordenades tenim els operadors *posició* i *impuls*

$$\hat{x}_1 = x \quad \hat{x}_2 = y \quad \hat{x}_3 = z \quad (\text{actuen multiplicativament})$$

$$\hat{p}_1 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad \hat{p}_2 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \quad \hat{p}_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

D'aquí obtenim fàcilment les relacions de commutació

$$[\hat{x}_i, \hat{x}_k] = 0 \quad [\hat{p}_i, \hat{p}_k] = 0 \quad [\hat{x}_i, \hat{p}_k] = \delta_{ik} \cdot i\hbar$$

Aquestes relacions són equivalents a les clàssiques amb la substitució

$$\{A, B\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [A, B]$$

D'acord amb el resultat de l'apèndix 2 tindrem les relacions *d'incertesa*

$$\Delta x_j \cdot \Delta p_j \geq \hbar / 2$$

*El principi d'incertesa de Heisenberg* afirma senzillament que la manifestació *a partir d'un mateix estat del sistema* de la posició i de l'impuls ve determinada estadísticament amb desviacions que tenen la limitació esmentada i, en aquest sentit, està d'acord amb l'afirmació *d'Einstein* que les teories físiques, lluny de contenir només quantitats observables, en indiquen què és el que es pot observar realment. Així, per exemple, si l'impuls en la direcció de  $x$  és sempre el mateix, aleshores la coordenada  $x$  té dispersió infinita.

La incertesa corresponent a l'energia i al temps té un significat completament diferent, ja que aquí apareix una variació temporal de la qual està mancat el principi d'incertesa ans esmentat, que tracta de dispersions corresponents a un instant concret. Per altra banda, el principi d'incertesa que implica l'espai/impuls no ha estat deduït de principis dinàmics, mentre que el principi relatiu al temps/energia, altrament, precisa del coneixement de la dinàmica i, en concret, del que seguirà.

## CONSTANTS DE MOVIMENT

En l'evolució d'un estat quàntic el seu valor mitjà  $\langle T \rangle$  corresponent a un operador  $T$  variarà i definim  $\dot{T}$  com l'operador que verifica

$$\langle \dot{T} \rangle = \frac{d\langle T \rangle}{dt}$$

A partir de l'evolució en la imatge de *Heisenberg* trobem

$$\dot{T} = \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[T, H]$$

, on l'operador  $T$  pot dependre explícitament del temps. Comparant aquesta expressió amb la clàssica

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \{f, H\}$$

, tornem a trobar la substitució per correspondència

$$\{A, B\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar}[A, B]$$

*Formalment deduirem expressions quàntiques a partir de les clàssiques mitjançant la substitució per correspondència*

$$\{A, B\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar}[A, B]$$

En conseqüència, la teoria dels *grups simplèctics* tindrà la seva aplicabilitat a l'estudi de la dinàmica quàntica (vegeu els "Parèntesis de *Poisson*" del capítol 1).

Si un operador no depèn explícitament del temps i commuta amb  $H$ , tindrem que

$$\dot{T} = 0 \Rightarrow \langle T \rangle = \text{constant}$$

i, per tant, el seu valor mitjà per a un estat en evolució no canviarà al llarg del temps. L'observable  $T$  s'anomena *constant de moviment*. En particular, si  $H$  no depèn explícitament del temps, el valor mitjà de l'energia no variarà i el sistema romandrà en un estat propi de  $H$  (*estat estacionari*), si es troba inicialment en ell.

## EL PRINCIPI D'INCERTESA DE L'ENERGIA

Suposem un operador  $T$  que no depengui explícitament del temps. L'operador  $\dot{T}$ , definit abans, verificarà

$$\langle \dot{T} \rangle = \frac{d\langle T \rangle}{dt} \quad \dot{T} = \frac{1}{i\hbar}[T, H]$$

Es demostra que el producte de les dispersions de  $T$  i  $H$  per a un sistema físic complex

$$\Delta T \cdot \Delta H \geq \frac{1}{2} |\langle [T, H] \rangle|$$

i d'aquí obtenim

$$\Delta T \cdot \Delta H \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{d\langle T \rangle}{dt} \right|$$

Si suposem que el sistema està aïllat ( $\Delta H = \Delta E$ ) i  $\Delta t$  és el temps necessari perquè la variació de  $\langle T \rangle$  coincideixi en valor absolut amb el valor de la dispersió  $\Delta T$ , arribem a l'expressió que segueix (on la substitució de la derivada pel quocient incremental és evident)

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

Què significa realment aquesta desigualtat que expressa el *principi d'incertesa de l'energia*? El problema rau en aclarir el significat de  $\Delta t$ .  $\Delta t$  és el temps *aproximat* perquè  $\langle T \rangle$  variï en la quantitat  $\Delta T$  i aquest temps dependrà de cada operador  $T$ . Si elegim l'operador que faci mínim aquell temps, aleshores  $\Delta t$  serà un temps *característic del sistema* en el qual aquest *tindrà canvis apreciables*, amb tota l'ambigüitat que això comporta.

El principi d'incertesa de l'energia relaciona *la dispersió de l'energia d'un sistema amb el temps durant el qual ell pugui tenir canvis apreciables*.<sup>16</sup>

En el cas d'una partícula podem interpretar  $\Delta t$  com el seu temps de vida. En conseqüència, la mesura d'una dispersió petita en el valor de la seva energia (corresponent a la massa en repòs) ens donarà un temps gran de vida, i un temps petit de vida ens abocarà a una gran dispersió energètica.<sup>16</sup>

L'afirmació que no es pot mesurar l'energia en un temps curt sense introduir incertesa en el seu valor *sembla* pel que hem

comentat, i d'acord amb *Aharonov-Bohm*, una conclusió incorrecta del principi d'incertesa de l'energia, en fer una interpretació esbiaixada sobre el significat de  $\Delta t$ , el qual és un de ben diferent al del temps de mesura de l'energia. En efecte: en cap cas hem parlat del temps que dura la mesura de l'energia, sinó del temps en què el sistema en la seva dinàmica varia apreciablement en les seves característiques pròpies.

El principi d'incertesa de l'energia no precisa de la presència de cap observador conscient, podria fonamentar l'aparició de la irreversibilitat termodinàmica i aplicat a l'univers en el seu conjunt ens permetria la "creació" d'un univers des del "no-res" amb una energia global (la de la gravitació+la de les partícules) molt propera a zero i un temps de vida gran. Ell també faria possible la violació de la conservació de l'energia durant un temps petit. El *préstec* energètic podria originar la creació de partícules *virtuals* des del buit i una posterior aportació energètica externa faria que elles esdevinguessin reals.

## SIMETRIES I DEGENERACIÓ

En el que segueix la variable  $x$  representarà el conjunt de coordenades i considerarem la transformació  $x \rightarrow Rx$ , on  $R$  genera l'operador  $O_R$  definit per la propietat  $O_R f(Rx) = f(x)$ . Suposem a continuació un operador  $T(x)$  que compleixi  $T(Rx) = T(x)$  (direm que té la *simetria* corresponent a  $R$ ). A partir d'aquí podem realitzar aquest raonament:

$$\begin{aligned} O_R(T(Rx)f(Rx)) &= T(x)f(x) \Rightarrow \\ \Rightarrow O_R(T(x)O_R^{-1}f(x)) &= T(x)f(x) \Rightarrow \\ \Rightarrow O_R T O_R^{-1} &= T \Rightarrow O_R T O_R^{-1} O_R = T O_R \Rightarrow \\ \Rightarrow O_R T &= T O_R \Rightarrow O_R T - T O_R = 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow [O_R, T] &= 0 \end{aligned}$$

D'aquí podem concloure que, si l'operador hamiltonià  $H(x)$  verifica  $H(Rx) = H(x)$ , l'operador  $O_R$  commutarà amb  $H$  i, si és independent del temps, esdevindrà una constant de moviment tot mantenint-se invariable el valor mitjà de l'observable adjunt.



La simetria de  $H$  davant de

- \* translacions temporals,
  - \* translacions espacials i
  - \* rotacions espacials
- (vegeu més endavant l'apèndix 3)

conduïx respectivament a les constants de moviment conegudes:

- \* L'energia  $H$ .
- \* L'impuls  $\vec{p}$ .
- \* El moment cinètic  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ .

La invariància de  $H$  amb la transformació  $(x,y,z) \rightarrow (-x,-y,-z)$  s'anomena invariància per *inversió espacial*. La constant de moviment adjunta és la *paritat*.

La invariància pel canvi  $t \rightarrow -t$  és la invariància per *inversió temporal*.

Vegem ara finalment una altra conseqüència de les simetries de  $H$ : la *degeneració*.

Un conjunt *complet d'observables compatibles* està format per tots els observables que commutïn entre ells. En podem tenir més d'un conjunt i cadascun d'ells ens donarà la màxima informació sobre el sistema. Si en un conjunt tenim el hamiltonià, el conjunt d'observables que l'acompanyen seran constants de moviment.  $H$  i el conjunt d'observables  $T_k$  compatibles amb ell compartiran un conjunt complet de vectors propis.

Si tenim ara un observable  $T$  que commuti amb  $H$ , però no amb els  $T_k$ , un estat propi  $|\varphi\rangle$  dels  $H-T_k$  amb energia  $E$  no serà estat propi de  $T$  i podrem escriure

$$HT|\varphi\rangle = TH|\varphi\rangle = TE|\varphi\rangle = ET|\varphi\rangle$$

En conseqüència,  $T|\varphi\rangle$  serà un vector propi de  $H$  amb la mateixa energia  $E$ . Direm aleshores que l'energia  $E$  està *degenerada*.

La degeneració ocorre quan el nombre de constants de moviment és més gran que el nombre d'observables compatibles. Podem dir també que hi ha degeneració, si tenim dues constants de moviment que no commutïn entre elles. Això succeeix quan les transformacions associades amb les simetries de  $H$  no commuten entre si. Per tant, un sistema podrà tenir degeneració a causa de les seves simetries: aquesta és una degeneració *essencial*, per distingir-la de l'*accidental* que pot ocórrer per altres motius.

## EL MOMENT ANGULAR

Mitjançant el *principi de correspondència* podem definir l'operador *moment angular orbital* d'una partícula

$$\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$$

, on  $\vec{R}$  actua multiplicativament i  $\vec{P} = -i\hbar\nabla$ . D'aquí és immediat trobar les relacions de commutació

$$[L_2, L_3] = i\hbar L_1 \quad [L_3, L_1] = i\hbar L_2 \quad [L_1, L_2] = i\hbar L_3$$

, que escriurem  $\vec{L} \times \vec{L} = i\hbar \vec{L}$ , simbòlicament. La relació entre  $\vec{L}$  i les transformacions per rotació espacial es tracta a l'apèndix 3.

És  $\vec{L}$  l'únic operador que verifica les relacions anteriors de commutació? La resposta és *no*. Això ens permetrà més endavant definir l'*espín* d'una partícula, concepte que no té l'equivalent amb cap magnitud clàssica.

En general, anomenarem *moment angular* tot operador que verifiqui les relacions de commutació  $\vec{J} \times \vec{J} = i\hbar \vec{J}$ .

Quan estudiem l'*equació de Dirac* definirem l'espín i la seva relació amb el moment angular total i la composició dels moments angulars de diferents partícules.

A partir de les relacions de commutació trobem quins són els possibles valors propis de cada component  $J_i$ . Fixem-nos que la no-commutativitat entre els diferents components  $J_i$  impedeix la seva diagonalització simultània. Podem resumir-ne així el procés:

1-Definim l'operador  $J^2$  que commuta amb cada component  $J_i$  i que val

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$$

2-L'espectre de valors propis de  $J^2$  i  $J_i$  és el següent:

->Els valors propis de  $J^2$  són

$$j(j+1)\hbar^2 \quad \text{amb } j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$$

->Per a cada valor  $j$  els valors propis de  $J_i$  són

$$m\hbar \quad \text{amb } m = j, j-1, \dots, 0, \dots, 1-j, -j$$

3-En particular, els valors propis de  $L^2$  són

$$l(l+1)\hbar^2$$

, on  $l = 0, 1, 2, 3, 4, \dots$  rep els noms successius d'orbital  $s, p, d, f, g, \dots$

4-La *paritat orbital* (vegeu l'apartat anterior "Simetries i degeneració") corresponent a l'estat d'un sistema amb moment orbital  $l$ .  $\hbar$  val  $(-1)^l$ .

## APLICACIONS DE L'EQUACIÓ DE SCHRÖDINGER

L'equació de *Schrödinger* és una equació diferencial i per a la seva resolució tindrem en compte el que segueix:

a) Les solucions estacionàries trobades a partir de  $H\varphi = E\varphi$  sense tenir en consideració ni l'evolució ni les probabilitats de manifestació d'un sistema físic.

b) L'evolució del sistema amb el coneixement probabilístic de les seves manifestacions.

c) Les condicions de contorn que ens limitaran tot l'anterior.

La resolució de l'equació diferencial és un problema matemàtic sense gaire interès per a nosaltres i per aquesta raó únicament donarem les conclusions finals de cada aplicació.

### 1) Partícula lliure

A partir de les expressions

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \quad i\hbar\frac{\partial\varphi}{\partial t} = H\varphi \quad H\varphi = E\varphi$$

obtenim les funcions d'ona dels estats estacionaris

$$\varphi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = C \cdot \exp((-i/\hbar) \cdot Et + (i/\hbar) \cdot \vec{p} \cdot \vec{r})$$

, on cada nivell d'energia  $E$  està infinitament degenerat, segons la direcció de  $\vec{p}$ , i es verificarà

$$E = |\vec{p}|^2 / 2m$$

L'espectre energètic serà continu i contindrà infinits valors.

Les funcions d'ona podran ésser normalitzades amb la delta de Dirac, si el volum d'integració és infinit, o amb la delta de Kronecker, si l'anterior volum és finit, i la constant C valdrà, respectivament,

$$1 / \sqrt{h^3} \quad \text{o} \quad 1 / \sqrt{V}$$

Les anteriors funcions d'ona són ones planes amb freqüència  $\nu = E/h$  i longitud d'ona  $\lambda = h/p$  (longitud d'ona de Broglie). Veiem, doncs, que a una partícula d'energia  $E$  i impuls  $p$  li associem una ona amb els valors de la freqüència i de la longitud d'ona que hem vist. La difracció causada per la interacció de la llum amb objectes més petits que la seva longitud d'ona impedeix la correcta observació d'aquells; això ho evitarem amb un *microscopi electrònic* que treballi amb electrons de longitud d'ona inferior.

A partir de les expressions conegudes  $\lambda = h/p$ ,  $E = h \cdot f = mc^2$ ,  $\lambda = u/f$  i  $E^2 = p^2 \cdot c^2 + m_0^2 \cdot c^4$  podem obtenir fàcilment les igualtats

$$c^2 = u \cdot v \quad u = \sqrt{1 + \frac{m_0^2 \cdot c^2 h}{h^2} \cdot \lambda^2}$$

, on  $v$  és la velocitat de la partícula i  $u$  la *velocitat de fase*.

Quan la partícula està associada a un *paquet d'ones* definides en un interval molt estret de freqüències, l'ona resultant és una pulsació on els màxims i mínims es propaguen a una velocitat de fase mitjana  $u$  diferent de la velocitat de l'ona que l'embolcalla (*velocitat de grup*  $v_g$ ). Amb  $k = 2\pi/\lambda$  tenim que

$$u = w / k \quad \text{i} \quad v_g = dw / dk \Rightarrow v_g = u - \lambda \frac{du}{d\lambda}$$

D'aquí resulta immediatament que  $v_g = v$ . En conseqüència, la *velocitat de grup de les ones de la matèria coincideix amb la velocitat de la partícula*.

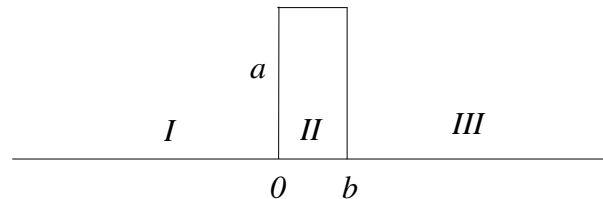
Suposem ara que el moviment de la partícula està restringit en un volum finit igual al d'un cub d'aresta  $L$  i que es compleixen les condicions següents de contorn a l'exterior i a la superfície del cub:

- >Fora del cub la funció d'ona s'anul·la.
  - >A les cares del cub ocorre el mateix per continuïtat.
- En aquest cas es verifica que

$$p_i = \frac{n_i h}{2L} \quad E = \frac{h^2}{8mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad n_i \in Z$$

Per tant, si la partícula té un moviment finit, el seu espectre energètic serà discret.

## 2) Moviment unidimensional en un potencial



Tenim una partícula que ve des de l'esquerra de la figura anterior i a la zona II es troba dins d'un pou de potencial  $V$  equivalent a una energia potencial  $U=a$ , que en una formulació clàssica caldria superar a partir d'una energia  $E \geq a$  per continuar cap a la dreta (a les zones I i III  $U=0$ ).

A partir de funcions d'ona que representin una mescla de moviments en ambdós sentits a I i II i d'un moviment cap a la dreta a III i imposant condicions de continuïtat i derivació a les funcions d'ona, podem resoldre l'equació de Schrödinger.

El resultat sorprenent consisteix que la partícula és en part reflectida i en part transmesa a través de la zona III, encara que la seva energia sigui inferior a la potencial de la barrera! Aquest fenomen, incomprendible en física clàssica, és l'efecte túnel. La probabilitat de superar la barrera disminueix quan ho fa l'energia de la partícula. Tanmateix, sempre hi ha una probabilitat de superar la barrera. La modulació d'aquesta probabilitat és el principi en què es basen els microscopis i transistors d'efecte túnel.

Com pot, però, la partícula superar la barrera? Molt fàcilment: si la partícula topa amb la barrera, en aquest instant el valor de la coordenada  $x$  tindrà dispersió nul·la i el seu impuls dispersió infinita, amb una probabilitat de tenir el valor suficient per superar la barrera, en el sentit clàssic del terme.

## 3) L'oscil·lador harmònic

Sabem per la mecànica clàssica que l'energia potencial de l'oscil·lador harmònic val

$$U = \frac{1}{2}mw^2x^2$$

A partir d'aquí podem plantejar i resoldre l'equació d'ones de *Schrödinger* amb les conclusions que seguiran.

Als estats estacionaris  $\varphi_n$  els correspon el conjunt de valors propis de l'energia  $E_n = (n + 1/2) \cdot \hbar\omega$  amb  $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ . Els estats estacionaris es defineixen a partir dels *polinomis d'Hermite*. El valor mínim de l'energia val  $1/2 \cdot \hbar\omega \neq 0$ , la qual cosa és un resultat típicament quàntic, ja que en una teoria clàssica aquell valor hauria de ser zero.

Definim els operadors  $\Phi, \Phi^+, N$ :

$$\begin{aligned}\Phi &= (2m\hbar\omega)^{-1/2} \cdot (p - im\omega x) \\ \Phi^+ &= (2m\hbar\omega)^{-1/2} \cdot (p + im\omega x) \\ [\Phi, \Phi^+] &= 1 \text{ i amb } N = \Phi^+\Phi \Rightarrow H = \hbar\omega N + \hbar\omega/2\end{aligned}$$

Els operadors  $\Phi, \Phi^+$  i  $N$  compleixen les propietats que especifiquem a continuació:

- a)  $\Phi^+\varphi_n = \varphi_{n+1}$
- b)  $\Phi\varphi_n = \varphi_{n-1}$  per a  $n \in \mathbb{N}$  i  $\Phi\varphi_0 = 0$   
(anotem que  $\varphi_0 \neq 0$ )
- c)  $N\varphi_n = n \cdot \varphi_n$

Si definim *l'estat buit* com l'estat propi corresponent a  $E_0$  i considerem l'energia  $\hbar\omega$  com a una partícula anomenada *fonó*, podem fer aquesta interpretació de tot l'anterior:

- > L'estat buit  $\varphi_0 = |0\rangle$  té zero fonons.
- > L'estat  $\varphi_n = |n\rangle$  té  $n$  fonons.
- > L'operador  $\Phi^+$  actuant sobre els vectors de l'espai de *Fock* crea un fonó (*operador de creació*).
- > L'operador  $\Phi$  actuant sobre els vectors de l'espai de *Fock* destrueix un fonó (*operador de destrucció*;  $\Phi|0\rangle = 0$ ).
- >  $N|n\rangle = n \cdot |n\rangle$  ( $N$  és l'operador nombre de partícules).
- > Podem trobar els estats estacionaris esbrinant prèviament  $|0\rangle$  de la relació  $\Phi|0\rangle = 0$ . D'aquí per aplicació successiva de  $\Phi^+$  anem calculant els estats  $|n\rangle$ .
- > L'espai que defineix el nombre de fonons s'anomena *espai de Fock*.
- > L'espai de *Fock* és un subconjunt del nostre espai de *Hilbert* original, elegit per a l'estudi exclusiu dels estats es-

tacionaris. Aquest subconjunt és la base vectorial estacionària que fem en la representació d'energies.  
 ->Tot l'anterior, convenientment generalitzat, serà essencial a la *física quàntica de camps*.

#### 4) L'àtom d'hidrogen

Si realitzem l'estudi d'una partícula de massa  $\bar{m}$  amb una energia potencial  $U(r)$  esfèrica i treballem en coordenades esfèriques, obtindrem aquests resultats:

a) Les funcions estacionàries són de la forma

$$R(r) \cdot Y_m^l(\theta, \phi), \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

, on  $Y_m^l$  són les funcions pròpies dels operadors  $L^2$  i  $L_3$ .

b) Per a  $U(r)$ , en general, tenim que els valors propis de l'energia depenen del número quàntic  $l$ , però no pas de  $m$ . Per a cada nivell energètic tenim una degeneració d'ordre  $2l+1$  per causa de la *simetria*.

c) Si ara substituïm  $U(r)$  per l'energia potencial de *Coulomb*

$$U = -Ze^2 / r$$

, on  $Z$  és el *número atòmic* ( $Z=1$  per a l'àtom d'hidrogen i en els nuclis atòmics més complexos el nombre de neutrons supera el de protons a causa de la repulsió electrostàtica entre aquests), i suposem que el nucli atòmic no té moviment, obtenim els nivells energètics

$$E_n = -\frac{\bar{m}Z^2e^4}{2\hbar^2n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Per a cada valor de  $n$  tenim que  $l=0, 1, \dots, n-1$  i apareix una degeneració *accidental* afegida deguda únicament a la forma especial del potencial de *Coulomb*. L'ordre de degeneració valdrà, doncs,  $1+3+\dots+[2(n-1)+1]=n^2$ .

Els polinomis de *Legendre* i els de *Laguerre* apareixen en estudiar les funcions estacionàries.

d) Sabent els possibles nivells energètics de l'electró, podem conèixer la freqüència de la radiació emesa per un salt entre dos nivells que crearà un fotó d'energia

$$E = h \cdot f = E_n - E_m$$

Mentre no hi hagi la transició anterior, no apareixerà cap radiació degut *als principis quàntics de conservació de les constants de moviment*, que substitueixen les lleis clàssiques de la radiació electromagnètica per causa de l'acceleració centrípeta. El temps d'excitació/desexcitació d'un àtom en interacció amb un fotó origina la minva aparent de la velocitat de la llum en la refracció.

Per què els electrons es troben en estats purs incoherents? Una possible explicació seria aquesta: un conjunt d'àtoms és un sistema macroscòpic i els col·lapses individuals amb el conjunt total haurien portat els electrons cap als estats propis incoherents amb una energia total atòmica mínima.

e) A partir de *l'equació de Dirac* veurem les correccions dels nivells energètics degudes a la relativitat i a l'espín, que apareix com a conseqüència d'ella.

## 5) Estudis pertorbatius

En totes les aplicacions anteriors l'equació de *Schrödinger* s'ha pogut resoldre exactament. A la majoria de casos pràctics, però, cal que acudim a mètodes basats en el càlcul d'aproximacions. Aquests són els mètodes *pertorbatius*, anomenats així perquè es basen en l'addició d'un terme (pertorbació) a un operador hamiltonià per al qual coneixem la solució exacta de l'equació de *Schrödinger* corresponent. A partir d'aquesta podem, per iteració, trobar la solució aproximada afegint la correcció pertorbativa.

Així, la degeneració de nivells energètics d'un àtom podrà desaparèixer totalment o parcial amb la formació d'una estructura més fina. Això és el que ocorre mitjançant la pertorbació provocada per l'addició d'un camp elèctric addicional (*efecte Stark*) o per la presència d'un camp magnètic (*efecte Zeeman*).

Anàlogament, un sistema en un estat propi d'un hamiltonià concret podrà acabar convertint-se en una mescla coherent a causa d'elements pertorbatius posteriors.

En el mateix sentit, la pertorbació interactiva del gas electrònic d'un superconductor amb la seva xarxa, degut a l'aparició dels *parells de Cooper*, serà la causa fonamental de la presència d'una *banda prohibida d'energia* (vegeu més endavant i l'apèndix 5).

Els mètodes pertorbatius són essencials per a la investigació i a l'estudi de les interaccions tornarem sobre tot l'anterior.



## LA SUMA SOBRE HISTÒRIES DE FEYNMAN

A l'experiment de les dues esclatxes ens hem acostumat a fugir de la idea que l'electró passa per una esclatxa "o" una altra. Sembla, altrament, que mentre l'electró no es manifesti en aquest "pas" cal considerar-lo com si ho fes per ambdues esclatxes a la vegada en un símil totalment ondulatori.

Físicament l'electró té una amplitud de probabilitat d'anar des d'un punt a un altre igual a la suma de les *amplituds de probabilitat assignades a cada camí* ("path") o *història* clàssica.

L'amplitud  $A(q(t))$  de probabilitat assignada a la història de "trajectòria"  $q(t)$  val

$$A(q(t)) = C \cdot \exp(i \cdot \frac{S(q(t))}{\hbar})$$

, on  $S$  és l'acció corresponent a la trajectòria  $q(t)$  i  $C$  és independent de  $q(t)$  per tal d'obtenir idèntica probabilitat  $|A|^2$  per a cada història.

*L'amplitud de probabilitat per propagar la partícula des de la posició  $(q_i, t_i)$  a la  $(q_f, t_f)$  val  $K(q_f, t_f; q_i, t_i)$  = la suma de les amplituds de probabilitat anteriors sobre totes les històries o camins.  $K$  s'anomena propagador. A la pràctica, el càlcul del propagador es realitza dividint el temps  $t_f - t_i$  en  $N$  intervals iguals i fent que cada coordenada  $q$  intermèdia prengui tots els valors possibles. Aleshores, el propagador final s'obté a partir de la integració múltiple de la multiplicació d'operadors intermedis amb el pas al límit quan  $N \rightarrow \infty$ : es tracta de la integral d'històries o camins.*

La funció d'ona s'obtindria així:

$$\varphi(q_f, t_f) = \int_{-\infty}^{+\infty} k(q_f, t_f; q_i, t_i) \cdot \varphi(q_i, t_i) \cdot dq_i$$

La bondat de tot l'anterior es recolza en el següent:

a) La funció de *Lagrange* del sistema pot interpretar-se de forma clàssica o quàntica. Si calculem el propagador en el límit clàssic fent  $\hbar \rightarrow 0$ , les amplituds de la majoria de les històries oscil·len ràpidament i es cancel·len entre si, restant només les històries per a les quals  $S$  sigui quasiextremal, la qual cosa ens dona la trajectòria clàssica.

b) Comprovem que la funció d'ona construïda amb el propagador coincideix amb la que trobaríem a partir de l'equació de *Schrödinger*, deduïda pel principi de correspondència des de  $L$ .

c) La integral de camins ens permetrà endinsar-nos a les interaccions quàntiques i a l'estudi quàntic de sistemes clàssics coneguts. Si la integral de camins *completa* ho permet, realitzarem un estudi *pertorbatiu*. Altrament, *si podem prescindir-ne de part de les històries o obtenir-ne una acció aproximada*, ens mourem dins del camp de les *teories efectives* no pertorbatives.

d) Podem construir històries que incloguin al seu si una munió d'històries sobre situacions que serien alternatives. Aquestes històries síntesi prescindiran d'aquests detalls i seran no detallades amb la propietat addicional d'incoherència i d'assignació de probabilitats sense interferència, la qual cosa no ocorre amb les històries detallades. *Les històries no detallades podran identificar-se de forma clàssica i els principis clàssics es derivaran així, en definitiva, dels principis quàntics*. L'enigma del gat de *Schrödinger*, que està tancat en una caixa on el despreniment aleatori de cianur pot o no matar-lo, és fictici. *El gat no pot estar en un estat intermedi entre viu i mort*, perquè la història en què el gat viu i aquella en què ell mor són clarament no detallades i incoherents sense cap interferència probabilística entre elles. A més, *és molt probable que les coses occorrin amb independència de la nostra consciència d'elles*: la manifestació real no té res a veure amb la manifestació a la nostra consciència que és la manifestació dins nostre d'una manifestació que ocorre al pla fenomenològic.

## **SOBRE LES PARADOXES QUÀNTIQUES**

1-Com és el món quàntic? Hem d'acostumar-nos a pensar que l'univers s'estructura en molts nivells. Cada nivell és conegut pels altres a través de les seves manifestacions dins del pla fenomenològic, restant el noümen amagat. Sempre que volem parlar d'elles amb els nostres conceptes apareixeran expressions estranyes. Així, seguint *Bohr*, la causalitat convencional i la descripció espaciotemporal són aspectes complementaris! Caldrà parlar, doncs, planerament de la manifestació dels sistemes

quàntics amb propietats no sempre predictives i acostumar-nos que el seu absurd aparent apareix només per les nostres habituds.

2-Caldrà, doncs, canviar la nostra lògica? Ningú no ho sap. A l'estadi actual, però, resulta més "pràctic" conservar la lògica clàssica i canviar els nostres vells conceptes. Aquí, i no en l'acceptació de nous, és on rau la veritable dificultat, segons *Heisenberg*.

3-Quins conceptes caldrà rebutjar? Fonamentalment haurem de canviar-ne un: la *possessió* de propietats objectives per part dels sistemes allunyats de la nostra experiència biològica tradicional i que *ara* se'ns manifesten. Tanmateix, l'anterior no afirma que el passat no existeixi fins que se'ns manifesti en el present, sinó que la seva realitat no té els "nostres" atributs físics. De fet, el col·lapse no ens revela cap propietat oculta d'un sistema, perquè, un cop esdevingut, el passat d'aquest sistema queda esborrat. Aquesta irreversibilitat, però, podria ser només local i és molt probable que la reversibilitat implícita en la transformació unitària de l'estat d'un sistema només es pugui aplicar amb rigor a un sistema tancat, com l'univers.

4-Impeix el principi d'incertesa el coneixement de forma simultània de la posició i de la velocitat d'una partícula? Suposem tres instants  $t_1 < t_2 < t_3$ . El coneixement exacte de les seves posicions a  $P_1$  i  $P_2$  als instants  $t_1$  i  $t_2$  ens permet calcular la velocitat exacta entre ells. La velocitat, però, entre  $t_2$  i  $t_3$  restarà totalment indeterminada i el concepte tradicional de trajectòria, d'acord amb el que acabem de dir, és inaplicable.

5-Es pot mesurar l'energia exactament en un temps petit? El principi d'incertesa de l'energia no ho impedeix, ja que el temps que hi figura no és un temps de mesura.

6-Suposem ara que a la sortida d'un aparell  $A$  una partícula pugui seguir dos camins alternatius  $S_1$  o  $S_2$ . Un detector  $D$  situat en  $S_1$  pot detectar-la o no. La no-detecció (*mesura nul·la*)<sup>37</sup> permet afirmar que la partícula ha seguit el camí  $S_2$  *sense fer-ne cap observació directa*. La *sola presència de  $D$  ha eliminat la coherència original i "ha obligat la partícula a decidir per on anar"*! L'anterior ens demostra que la mesura és important i cal per avalar o no les nostres teories, però més enllà ens endinsa en un nivell molt antropocèntric amb l'absurd que res no ocorre fins que no penetri a la nostra consciència i amb la càrrega feixuga que ens impedeix

parlar sobre el que no veiem, d'acord amb el positivisme. Hi haurà algú que ens digui que l'univers primigeni continua en un estat de mescla quàntica coherent com el pobre gat de *Schrödinger*, perquè no podem "obrir la caixa" que ens impedeix de veure'!

La importància real de l'experiència dels fenòmens, d'acord amb l'esperit de *Goethe*, està en el fet que la seva observació atenta ens condueix a noves idees, a una nova teoria i, en definitiva, a una visió més profunda d'aquells. Tanmateix, seguint *Popper*, afirmem que allò que és radicalment diferent no apareix inductivament per generalització del concret, sinó creadorament. L'experiment (i, en aquest sentit, la mesura) ens posa en situació per a l'acte creador d'una nova teoria que, mitjançant l'experiència posterior, ens portarà a la seva contrastació o refutació.

7-Describeu la mateixa lagrangiana un sistema quàntic i un de clàssic? Efectivament. La diferència rau en la seva interpretació:

a) Un sistema clàssic té la seva trajectòria determinada pel principi d'acció extrema. Aquesta trajectòria es pot deduir també del principi de suma sobre històries en el seu límit amb  $\hbar \rightarrow 0$ .

Recordem les successives aproximacions clàssiques:

-> Física de Newton = límit amb  $v \ll c$  de la física relativista.

-> Relativitat restringida = límit amb  $G \rightarrow 0$  de la relativitat general.

-> Física clàssica = límit amb  $\hbar \rightarrow 0$  d'algunes lleis quàntiques.

b) En un sistema quàntic la seva lagrangiana es pot interpretar en un context clàssic amb la suma sobre històries de *Feynman* o en un de quàntic amb els operadors que hi conté i que condueixen a l'equació de *Schrödinger* (o l'equivalent) a través del principi quàntic de correspondència.

## L'EQUACIÓ DE KLEIN-GORDON

Aquesta equació apareix com a una primera temptativa d'unificació de la relativitat i la física quàntica. A partir de la relació relativista  $H^2 = p^2 \cdot c^2 + m^2 \cdot c^4$  i amb el principi de correspondència quàntica, arribem a l'equació diferencial de *Klein-Gordon* per a la funció d'ona, on hem definit  $\mu = mc / \hbar$  i  $\square = \partial^\alpha \partial_\alpha$  és l'operador d'Alembert:

$$\left[ \square + \mu^2 \right] \Phi = 0$$

L'aparició del quadrat  $H^2$  ens ha introduït una *estranya* energia negativa

$$H = -\sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$$

Les solucions de l'equació de *Klein-Gordon* són

$$\Phi_{\vec{k}}^+ = C \cdot \exp(-ik^\alpha x_\alpha) \quad \Phi_{\vec{k}}^- = C \cdot \exp(ik^\alpha x_\alpha)$$

, amb els valors d'energia/impuls iguals, respectivament, a

$$E_{\vec{k}} / \bar{p} \quad -E_{\vec{k}} / -\bar{p}$$

, on hem definit (vegeu les ones electromagnètiques al capítol 5)

$$k^\alpha = (k^0, \vec{k}) \quad k^0 = +(\mu^2 + \vec{k}^2)^{1/2} = \frac{\hbar \omega_{\vec{k}}}{c} \quad k^\alpha k_\alpha = 0$$

$$\bar{p} = \hbar \vec{k} \quad E_{\vec{k}} = \hbar \omega_{\vec{k}} = +(m^2 c^4 + c^2 (\hbar \vec{k})^2)^{1/2}$$

L'equació de *Klein-Gordon* és una equació diferencial de segon ordre, la qual cosa dificulta la seva interpretació.

Amb les definicions de  $P$  i  $\vec{S}$  que segueixen obtindrem una equació de continuïtat:

$$P = \frac{i\hbar}{2mc^2} \left( \Phi^* \frac{\partial \Phi}{\partial t} - \Phi \frac{\partial \Phi^*}{\partial t} \right) \quad \vec{S} = \frac{\hbar}{2im} (\Phi^* \nabla \Phi - \Phi \nabla \Phi^*)$$

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \text{div} \vec{S} = 0$$

La interpretació de  $P$  com a probabilitat no és possible, perquè ella no és definida positiva (tanmateix, la presència de *probabilitats condicionades negatives no detectables* és correcta teòricament i permetria, segons *Bell*, minimitzar moltes divergències indesitjables). A més, roman la qüestió de les energies negatives.

L'anterior se solucionarà només en part amb l'equació de *Dirac*. Tanmateix, el veritable valor d'ambdues equacions estarà en la seva reinterpretació dins de la física quàntica de camps.

Aquesta reinterpretació es farà també amb les equacions de *Maxwell*. A partir, doncs, de tres equacions inicials dubtoses (recordem les limitacions de l'electromagnetisme clàssic) n'arribarem finalment a una nova interpretació enriquidora.

Així és *d'humil* el camí del coneixement, on a partir d'errades i tempteigs s'avança tot respectant els encerts del passat.

## L'EQUACIÓ DE DIRAC

Volem trobar una equació amb aquesta estructura:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi = (-i\hbar c \cdot \vec{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2) \Psi$$

L'equació haurà de tenir una expressió simètrica en relació a les derivades espacials i temporals que sigui acceptable en un formulisme relativista i que romangui invariant a través de les transformacions del grup de *Lorentz-Poincaré*; és a dir: haurà de tenir una forma *covariant*. Això implica que  $\alpha_i, \beta$  siguin matrius  $4 \times 4$  i  $\Psi$  una matriu  $4 \times 1$  anomenada *espinor*:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi^0 \\ \Psi^1 \\ \Psi^2 \\ \Psi^3 \end{pmatrix}$$

A més, qualsevol solució de l'equació de *Dirac* caldrà que preservi la relació relativista  $E^2 = p^2 \cdot c^2 + m^2 \cdot c^4$  i, per tant, cada component de l'espinor haurà de complir l'equació de *Klein-Gordon*. Tot l'anterior (no es tractarà a bastament la covariància fins més endavant) ens condueix al coneixement de les condicions que han de complir les matrius  $\alpha_i, \beta$ . L'equació de *Dirac* admet diverses formes o *representacions*. Nosaltres emprarem la *representació de Pauli* (altres representacions alternatives són les de *Majorana* i *Weyl*) on les matrius  $\alpha_i, \beta$  valen

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Les  $\sigma^i = \sigma_i$  són les matrius de *Pauli* d'ordre  $2 \times 2$ :

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

De l'equació de Dirac hom troba l'equació de continuïtat

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{J} = 0$$

, on  $\rho = \Psi^+ \cdot \Psi$  és definida positiva i  $J^i = c \cdot \Psi^+ \cdot \alpha^i \cdot \Psi$ , tenint en compte que  $\Psi^+ = \tilde{\Psi}^*$ . D'aquesta manera la interpretació probabilística de l'equació de Dirac és correcta, altrament al que passava amb l'equació de Klein-Gordon.

Fins ara hem treballat amb la correspondència  $\vec{p} \rightarrow -i\hbar \nabla$ . Rigorosament sabem que la correspondència hauria de realitzar-se a través de l'impuls generalitzat  $\vec{p} \rightarrow -i\hbar \nabla$ . Si introduïm ara un camp electromagnètic  $A^\alpha = (\Phi, \vec{A})$ , el nou hamiltonià es trobarà mitjançant la substitució  $\vec{p} \rightarrow \vec{p} - (e/c) \cdot \vec{A}$  i l'addició de  $\Phi$  (vegeu el capítol 5), amb la qual cosa l'equació de Dirac ens quedarà així:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (c \cdot \vec{\alpha} \cdot (\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}) + \beta mc^2 + e\Phi) \Psi$$

, on cal interpretar  $\vec{p} \rightarrow -i\hbar \nabla$ , com hem dit abans.

Amb l'aproximació semiclàssica podem negligir els dos darrers components de la funció d'ona, restant únicament els seus dos primers que defineixen la matriu  $\varphi$  2x1. Aquesta evoluciona, en presència d'un camp magnètic  $\vec{H}$ , d'acord amb l'equació de Pauli:

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left( \frac{p^2}{2m} - \frac{e}{2mc} (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot \vec{H} \right) \varphi$$

amb  $\vec{S} = \frac{1}{2} \hbar \cdot \vec{\sigma}$  i  $\vec{\sigma} = (\sigma^1, \sigma^2, \sigma^3)$

El moment orbital  $\vec{L}$  permet definir el moment magnètic orbital (vegeu l'apartat del *moment magnètic* al capítol 5)

$$\frac{e}{2mc} \cdot \vec{L}$$

, on  $e/2mc$  és el magnetó de Bohr. A partir del moment angular intrínsec o espín  $\vec{S}$ , trobem el corresponent moment magnètic

$$\frac{e}{2mc} \cdot \vec{S}$$

, que interacciona amb el camp magnètic  $\vec{H}$  amb el factor  $g=2$ . Aquest factor s'anomena *raó giromagnètica*.

És immediat comprovar que els valors propis de  $\vec{S}^2$  i  $S_3$  són, respectivament,

$$s(s+1)\cdot\hbar^2 \text{ i } \pm s\hbar \text{ amb } s = 1/2$$

i que  $\vec{S}$  verifica totes les relacions de commutació, pròpies d'un moment angular.

$\vec{L}$  és l'operador que actua sobre les coordenades de cada component de  $\varphi$  i  $\vec{S}$  actua, mitjançant el producte matricial, sobre els seus components.

El moment angular total de l'electró és

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Amb la composició *general* de moments angulars

$$\vec{J} = \sum_i \vec{J}_i$$

, si tenim un sistema amb dos moments angulars  $\vec{j}_1, j_1^2$  i  $\vec{j}_2, j_2^2$  i els números quàntics  $j_{1z}, j_1$  i  $j_{2z}, j_2$ , respectivament, el sistema compost amb  $\vec{J} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2$  tindrà aquests possibles números quàntics:

$$j_z = j_{1z} + j_{2z} \text{ i } j = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \dots, |j_1 - j_2| \text{ amb } |j_z| \leq j$$

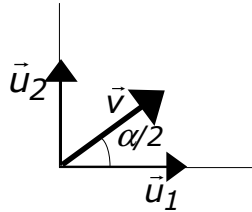
En el cas de l'electró, amb el número quàntic orbital  $l$ , tindrem que  $j = l \pm 1/2$ , si  $l > 0$ , i  $j = 1/2$ , si  $l = 0$ .

Es pot comprovar que els valors propis de  $\vec{S}_{\vec{n}}$ , on  $\vec{n}$  és un vector unitari, continuen essent  $\pm\hbar/2$ , amb la qual cosa veiem que la direcció en què projectem  $\vec{S}$  és irrellevant per al càlcul dels valors propis. Quina relació hi ha, però, entre les bases ortonormals de vectors propis corresponents a les direccions  $\vec{z}$  i  $\vec{n}$ ? La base pròpia de  $S_3$  amb valors propis  $\pm\hbar/2$ , projeccions de  $\vec{S}$  sobre els sentits positiu i negatiu de  $z$ , la representarem per  $\vec{u}_1$  i  $\vec{u}_2$ . L'estat propi del vector  $\vec{v}$  amb la projecció  $\hbar/2$  de  $\vec{S}$  sobre  $\vec{n} = (0, \sin\alpha, \cos\alpha)$  que forma un angle  $\alpha$  amb  $z^+$  resulta ser

$$\vec{v} = \cos(\alpha/2)\cdot\vec{u}_1 + \sin(\alpha/2)\cdot\vec{u}_2$$



, que podem interpretar d'acord amb la figura següent:



En particular, comprovem que

$$\rightarrow \alpha = 0 \Rightarrow \vec{v} = \vec{u}_1$$

$$\rightarrow \alpha = \pi \Rightarrow \vec{v} = \vec{u}_2$$

$$\rightarrow \alpha = \pi/2 \Rightarrow \vec{v} = (\sqrt{2}/2) \cdot \vec{u}_1 + (\sqrt{2}/2) \cdot \vec{u}_2$$

Sembla, doncs, com si l'electró tingués un espai interior o *fibra* que es recolzés damunt d'una *base* espaciotemporal i en el qual es realitzés la composició vectorial esmentada i s'induís la conversió  $\alpha \rightarrow \alpha/2$ , contràriament al que la intuïció ens dicta.

La millor prova de la bondat de l'equació de *Dirac* està en la predicció correcta de l'espín, del moment magnètic intrínsec i de la seva interacció amb el camp magnètic.

Un altre èxit de l'equació de *Dirac* està en l'estudi de l'àtom d'hidrogen amb l'energia potencial de *Coulomb*. Els nivells d'energia resulten ésser funció dels números quàntics  $n$  i  $j$  ( $j$  és el número quàntic corresponent al  $J^2$ , amb  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$  per a l'electró) i apareix la degeneració deguda a  $l$  ( $0 \leq l \leq n-1$ ), ja que, a cada nivell energètic determinat per la parella  $n, j$ , podem tenir dos valors del número quàntic  $l$  corresponents a  $l = j \pm 1/2$ . El trencament de la degeneració deguda als diferents valors de  $l$  per a cada parella  $n, j$  és l'efecte *Lamb* i serà tractat lleugerament al capítol 8 on s'estudien els *campes quàntics*. Un tractament més acurat tenint en compte el camp magnètic creat pel nucli dona lloc a una estructura *hiperfina* de cada nivell. Ambdós efectes (l'efecte *Lamb* i l'estructura hiperfina) són de tipus *pertorbatiu* i estan en excel·lent acord amb l'experiència.

Els nivells energètics depenen de la *constant d'estructura fina* (vegeu el capítol 8). En conseqüència, la variació de les línies d'absorció procedents d'una llum llunyana seria una prova de la variabilitat de les constants universals amb el temps.

A continuació mostrem un conjunt de nivells possibles per a l'àtom d'hidrogen:

Nivells	$n$	$l$	$j$
$1s^{1/2}$	1	0	1/2
$2s^{1/2}$	2	0	1/2
$2p^{1/2}$	2	1	1/2
$2p^{3/2}$	2	1	3/2
$3s^{1/2}$	3	0	1/2
$3p^{1/2}$	3	1	1/2
$3p^{3/2}$	3	1	3/2
$3d^{3/2}$	3	2	3/2
$3d^{5/2}$	3	2	5/2

Els nivells  $2s^{1/2}-2p^{1/2}$ ,  $3s^{1/2}-3p^{1/2}$  i  $3p^{3/2}-3d^{3/2}$  seran separats per l'efecte *Lamb*.

La composició del  $j$  electrònic amb l'espín  $1/2$  del protó donarà lloc a una estructura hiperfina del nivell  $1s^{1/2}$ .

Moment total= $0$ ->singlet.

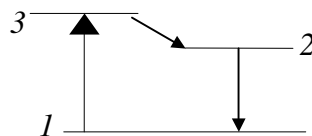
Moment total= $1$ ->triplet (components  $1, 0, -1$ ).

## ELS NIVELLS ENERGÈTICS ATÒMICS: APLICACIONS

### a) El làser

Un àtom excitat pot tornar l'energia sobrant *espontàniament* o per *estimulació*. Ambdós fenòmens hi són presents per obtenir el raig làser.

Suposem ara que tenim un àtom amb els nivells energètics 1, 2 i 3 de la figura.



Realitzem un *bombeig* energètic des del nivell 1 al nivell 3. Si existeix una transició *espontània* entre els nivells 3 i 2 i, a més, la probabilitat de transició entre els nivells 2 i 1 és petita, la població corresponent al nivell 2 podrà arribar a ser més gran que la del nivell 1 (*inversió de la població*).

Si a continuació introduïm una radiació de freqüència

$$\nu = \frac{E_2 - E_1}{h}$$

, es produirà una *emissió estimulada* per la transició des de 2 a 1. La nova ona estarà en fase amb la primera i amb la mateixa direcció (*sinergia*). Dins d'una cavitat làser el procés es repetirà i resultarà finalment un feix altament energètic i coherent, on *el no-equilibri portarà a l'autoorganització fotònica*. El temps de vida a 2 fixa la petita dispersió inevitable de freqüència (vegeu el principi d'incertesa de l'energia). El làser (LÀSER=Light Amplification by the Stimulated Emission of Radiation), amb la paternitat de Townes i Schawlow, té com a precursor el MÀSER (Microwave Amplification by the Stimulated Emission of Radiation).

Si anomenem  $N_1$  i  $N_2$  el nombre d'electrons en els nivells 1 i 2 amb energies  $E_1$  i  $E_2$  i  $W$  la densitat de fotons corresponent a la freqüència  $\nu$  que verifiqui  $E_2 - E_1 = h \cdot \nu$ , podem mostrar les passes amb què *Einstein* demostrà el fenomen d'emissió estimulada. Suposem una cavitat amb àtoms i radiació en equilibri a una certa temperatura. Poden aparèixer tres processos:

a) Un àtom de l'estat 2 pot tenir una emissió espontània, tot retornant a l'estat 1, i es verificarà (a).

b) Un àtom en l'estat 1 pot absorbir un fotó de freqüència  $\nu$  i anar al nivell 2, segons la llei (b).

c) Un àtom en l'estat 2 pot tenir una emissió estimulada i baixar al nivell 1, tot verificant-se (c).

$$(a) \frac{dN_2}{dt} = -A \cdot N_2 \quad (b) \frac{dN_1}{dt} = -B_1 \cdot N_1 \cdot W \quad (c) \frac{dN_2}{dt} = -B_2 \cdot N_2 \cdot W$$

En l'equilibri tèrmic  $B_1 \cdot N_1 \cdot W = A \cdot N_2 + B_2 \cdot N_2 \cdot W$  i, a més (vegeu l'apèndix 5),

$$\frac{N_2}{N_1} = \exp(-(E_2 - E_1) / kT) = \exp(-h\nu / kT)$$

Si aïllem  $W$ , obtenim

$$W = \frac{A}{B_1 \exp(h\nu / kT) - B_2}$$

Perquè l'expressió anterior coincideixi amb la distribució fotònica coneguda (vegeu novament l'apèndix 5),  $B_1=B_2$  i, per tant, l'emissió estimulada és una conseqüència necessària de tot el que hem dit i, en particular, de la distribució de *Planck*. A més, en la situació d'equilibri tèrmic  $N_1>N_2$ .

En el cas de producció del làser el sistema atòmic està molt lluny de l'equilibri amb  $N_2>N_1$ . La presència del raig inicial de llum afavoreix l'estimulació que acumulativament produeix una bifurcació pròpia dels sistemes molt allunyats de l'equilibri (vegeu una vegada més l'apèndix 5).

#### **b) Relotges atòmics**

Un feix d'àtoms travessa un camp magnètic que seleccionarà aquells que tinguin un nivell electrònic adient i els desviarà a una cavitat de microones sintonitzada a la seva freqüència d'emissió i recepció. Alguns àtoms saltaran a un nivell d'energia més alt i, després d'una altra selecció magnètica, cediran la seva energia a un detector que realimentarà la cavitat de microones. Finalment, aquesta emetrà un senyal que ens permetrà obtenir un generador d'impulsos molt precís. Per tal d'evitar la indefinició de la freqüència d'emissió per efecte *Doppler* es pot utilitzar una trampa d'àtoms a base de raigs làser que congelaran els moviments atòmics a partir de la seva absorció-emissió.

#### **c) Ressonància magnètica nuclear**

Cadascun dels àtoms té una estructura nuclear específica i, com a conseqüència, en presència d'un camp magnètic extern ens apareixeran nivells energètics sorgits de la seva interacció amb l'espín i el moment magnètic nuclears. Aquests nivells energètics i *les transicions corresponents són diferents en cada àtom*. Si ara superposem un petit camp magnètic variable, es produeix una absorció energètica per a freqüències concretes del camp que ens permetrà transicions entre els nivells específics de l'àtom. L'àtom tornarà a emetre l'energia absorbida mitjançant un fotó. L'aparició d'aquestes radiacions en llocs concrets permet una anàlisi molt acurada dels elements químics que hi són  *presents localment*.

#### **d) L'enllaç molecular**

A partir de les funcions d'ona d'electrons *atòmics* podem trobar en determinats casos senzills una primera aproximació a les solucions de l'equació de Schrödinger d'una *molècula*, la qual cosa

ens permetrà conèixer els seus nivells energètics. El nivell fonamental ens donarà l'energia d'enllaç (igual a la disminució energètica entre els àtoms aïllats i enllaçats) i l'estructura espacial molecular.

Mitjançant la *combinació lineal d'orbitals atòmics (CLOA)* anirem construint els *orbitals moleculars* que ens ajudaran a l'estudi de tot l'anterior.

En el cas d'una molècula diatòmica podem tenir, entre d'altres, aquestes combinacions:

Dos orbitals  $s$  del nivell  $n$  donen lloc als orbitals  $\sigma s$ .

Si els àtoms de la molècula estan alineats en la direcció  $x$ , la combinació d'orbitals  $p_x-p_x$  o  $p_y-p_y/p_z-p_z$  del nivell  $n$  originen els orbitals  $\sigma p$  o  $\pi p$ , respectivament.

Si es combinen orbitals de diferents característiques ( $s$  i  $p$ , per exemple), tenim *orbitals híbrids*.

### **e) Les bandes d'energia en els sòlids**

Els nivells energètics dels àtoms individuals donen lloc a bandes energètiques *quasi contínues* quan tenim molts d'àtoms propers. Sovint apareixen tres bandes a partir dels electrons de valència: *banda de valència, banda prohibida i banda de conducció*. A  $0K$  la banda de valència està completa i la de conducció buida. A mesura que augmentem la temperatura alguns electrons tindran una energia suficient per superar la banda prohibida i anar a la banda de conducció. En els *aïllants* la banda prohibida i la resistibilitat són grans. En els *semiconductors* la banda prohibida és més petita i la conductivitat augmenta amb la temperatura. En els *conductors* no hi ha banda prohibida i la resistibilitat és petita; tanmateix, en augmentar la temperatura creixen les col·lisions dels electrons amb la seva xarxa i la conductivitat disminueix.

En els semiconductors dopats P apareixen nivells electrònics buits dins de la banda prohibida i propers al seu extrem inferior (en els N els nivells addicionals estan plens i propers al nivell superior de la banda prohibida). Pel damunt dels  $0K$  apareixeran, doncs, molts d'electrons a la banda de conducció N i de buits (*forats*) a la de valència (P). Una unió PN estarà sotmesa, gràcies als gradients de concentració, a un corrent de *difusió* d'electrons des de N a P i de forats des de P a N i s'anirà polaritzant (N+ i P-). Al mateix temps apareixerà un corrent elèctric invers de portadors

minoritaris (d'electrons des de P a N i de forats des de N a P) gràcies a la diferència de potencial elèctric creat. La polarització final interna s'estabilitzarà quan tots dos corrents siguin iguals. Un potencial elèctric extern podrà afavorir-ne o no la polarització interna: aquest fet té la seva aplicació en els díodes i transistors.

En els *superconductors* de baixa temperatura l'intercanvi de fonons de la xarxa entre dos electrons dóna lloc a l'atracció d'aquests (*parells de Cooper*) d'acord amb la teoria *BCS* (*Bardeen, Cooper i Schrieffer*). Degut al caràcter bosònic dels electrons aparellats, aquests ocupen un únic nivell energètic (vegeu el capítol 8), que a  $0K$  constitueix el *nivell fonamental*. En general, el trencament d'un parell de *Cooper* precisa d'una energia mínima: això implica l'existència de la *banda prohibida* dels superconductors. L'anterior o l'augment de la temperatura permeten l'aparició d'*electrons desaparellats* en una banda superior contínua.

*Els parells de Cooper tenen funcions d'ona quàntiques amb la mateixa longitud d'ona que es conserva a llarga distància*, degut que la interacció amb la xarxa "s'ha esgotat" en la formació del parell, amb la qual cosa actuen sinèrgicament i la resistència que troben en el seu recorregut s'anul·la pràcticament: es tracta del corrent d'*electrons superconductors* aparellats. Els electrons desaparellats poden afegir-se, quan calgui, als electrons superconductors aparellats per contribuir al corrent elèctric total.

Degut que hi ha alguns superconductors sense banda prohibida, sembla que aquella propietat de conservació de la coherència quàntica a llarga distància dels electrons superconductors és la determinant en el fenomen de la superconductivitat. En créixer la temperatura la banda prohibida minva, en ser insuficient la influència de la xarxa per aparellar els electrons més energètics, i a la temperatura crítica s'anul·la i la superconductivitat desapareix. El mateix ocorre en augmentar el corrent elèctric: un corrent crític provoca el trencament dels parells de *Cooper* i fa desaparèixer la superconductivitat. En presència d'un camp magnètic un superconductor és totalment diamagnètic amb un camp magnètic global dins d'ell nul: és tracta de l'efecte *Meissner* (amb el rebuig del camp magnètic creat per un imant, aquest levitarà, si ell està pel damunt del superconductor, o bé ho farà el superconductor, si és aquest el que està pel damunt de l'imat). Si el camp magnètic

assoleix un valor crític, l'efecte *Meissner* desapareix: la superconductivitat també ho fa (superconductors *tipus I*) o bé ha d'esperar un segon valor crític superior del camp magnètic (superconductors *tipus II*). L'absència de resistència implica, també, que no es pugui crear un camp elèctric a l'interior d'un superconductor.

Hi ha superconductors a temperatures molt allunyades dels *0K*, amb una banda prohibida inferior a la dels superconductors a baixa temperatura i, per tant, el mecanisme de la seva superconductivitat ha de ser molt diferent de l'explicat fins aquí.

## COVARIÀNCIA DE L'EQUACIÓ DE DIRAC

Conserva l'equació de *Dirac* la seva forma amb les transformacions del grup de *Lorentz*?

Què entenem exactament amb la pregunta anterior?

El canvi de tots els termes que figuren a l'equació per una transformació de les coordenades espaciotemporals és molt clar, amb l'excepció del canvi de l'espinores o funció d'ona. L'espinores podrà canviar per dos motius:

a) Pel canvi de les coordenades espaciotemporals.

b) Pel canvi dels components, segons un operador  $O_\Lambda$  induït per la transformació  $\Lambda$  de *Lorentz*.

La inducció que passa del grup de transformacions  $\Lambda$  al grup d'operadors  $O_\Lambda$  serà un morfisme, ja que "lògicament" es verificarà que

$$O_{\Lambda_1 \Lambda_2} = O_{\Lambda_1} \cdot O_{\Lambda_2}$$

En conseqüència, davant de les transformacions de *Lorentz* els components de l'espinores varien, segons *una representació* d'aquell grup i, a més, amb el canvi de les coordenades (vegeu els *operadors lineals* de l'apèndix 2 i més endavant l'apèndix 3).

A partir de les transformacions de coordenades i de la transformació d'espinores, segons la representació de què hem parlat, l'equació de *Dirac* és invariant en la forma (*covariància*).

A la representació del grup de *Lorentz* juguen un paper important les matrius  $\gamma^\alpha = (\beta, \beta\alpha_i)$  que defineixen una àlgebra lorentziana de *Clifford* (àlgebra *L-C*)

$$\gamma^\mu \cdot \gamma^\nu + \gamma^\nu \cdot \gamma^\mu = 2g^{\mu\nu}$$

Aquestes matrius en la representació de *Pauli* valen

$$\gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad \gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

i ens permeten definir

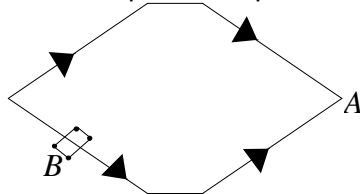
$$\sigma^{\mu\nu} = \frac{i}{2} [\gamma^\mu, \gamma^\nu] \quad \gamma^5 = i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \gamma_5$$

Totes les definicions anteriors i les que apareixeran en els apartats següents són essencials per a un estudi rigorós de l'equació de *Dirac* i de la transformació dels espinors i el lector que ho desitgi tindrà un punt de partida per aprofundir-hi.

Si escrivim  $B = \gamma^\mu B_\mu = \gamma_\mu B^\mu$ , l'equació de *Dirac* té la forma

$$\left( \not{p} - \frac{e}{c} A - mc \right) \Psi = 0$$

Si realitzem una rotació espacial, com canviarà la funció d'ona de l'electró? L'espinor es modificarà pel canvi de les coordenades i per l'acció de l'element del grup de la representació induït per la rotació espacial. Es comprova que amb una rotació de  $360^\circ$ , la nova funció d'ona no coincidirà amb la inicial, sinó que tindrà el seu valor oposat (a causa de  $\gamma^i \cdot \gamma^i = -1$  a l'àlgebra *L-C*) i caldrà una rotació de  $720^\circ$  per recuperar l'estat inicial! Aquest resultat paradoxal s'ha comprovat experimentalment.



A la figura anterior tenim l'esquema d'un interferòmetre de neutrons. Sense la presència del camp magnètic a *B*, tenim interferència constructiva a *A*. El camp magnètic, però, produeix una precessió de *Larmor* (vegeu el capítol 5) per interacció amb el seu moment magnètic intern (vegeu l'estructura hadrònica del capítol 9). Si la rotació és d'un número senar de voltes, es comprova que la interferència a *A* és destructiva, la qual cosa ens indica que la fase s'ha invertit en *B*.

El que acabem de dir ens serveix també per justificar la definició de les funcions quàntiques al camp complex, perquè la



fase és *essencial* i amb els nombres complexos la seva introducció apareix de forma molt més espontània i senzilla.

La funció d'ona en l'aproximació de l'equació de *Pauli* és una matriu  $2 \times 1$  i l'operador espín una matriu  $2 \times 2$ . Per a una partícula d'espín 1 tindriem funcions d'ona amb matrius  $3 \times 1$  i l'espín estaria representat per matrius  $3 \times 3$ . Si una partícula tingués espín  $s=0$ , la seva funció d'ona tindria un sol component. En aquest sentit, l'equació de *Klein-Gordon* és un ferm candidat per representar partícules d'espín zero.

Generalitzant l'anterior, hom veuria que la recuperació de la funció d'ona per a partícules amb diferents espins ocorreria al cap de les rotacions següents:

->  $s=1/2$ ->  $720^\circ$  (*l'electró*, per exemple).

->  $s=1$ ->  $360^\circ$  (*el fotó*, per exemple).

->  $s=2$ ->  $180^\circ$  (*el gravitó*, per exemple).

Quant a les transformacions de *Lorentz* impròpies (fins ara ens referíem al grup de *Lorentz* propi), podem dir el que segueix:

#### **a) Transformacions per inversió espacial**

Davant del canvi de coordenades  $(x,y,z,t) \rightarrow (-x,-y,-z,t)$ , tenim les transformacions dels objectes físics següents:

-> *Escalars*:  $A \rightarrow A$ .

-> *Pseudoescalars*:  $A \rightarrow -A$ .

-> *Vectors polars*:  $\vec{u} \rightarrow -\vec{u}$ .

-> *Pseudovectors (vectors axials, com el producte vectorial, moment angular, etc.)*:  $\vec{u} \rightarrow \vec{u}$ .

-> *La funció d'ona* tindrà la transformació corresponent (*paritat*) per obtenir la covariància de l'equació de *Dirac*.

La *paritat* és, doncs, l'operador  $P$  que actua sobre la funció d'ona, a partir de la transformació de coordenades per inversió espacial, per obtenir la covariància desitjada.

Un estat propi de l'operador *paritat*  $P$  diem que té com a valor propi una *paritat* concreta. Donat que  $P^2=1$  (degut que  $\gamma^0 \cdot \gamma^0 = 1$  a l'àlgebra *L-C*) es dedueix que l'operador *paritat* té com a valors propis les paritats  $+1$  i  $-1$ .

La *paritat* depèn, en general, de dos aspectes:

a) Degut a la transformació de les coordenades que figuren als espinors hi ha un primer canvi d'aquests per causa exclusiva de l'anterior transformació. En sistemes simples i propis de  $L^2$  la

paritat és  $(-1)^l$ . Si el sistema està compost per subsistemes amb orbitals corresponents a  $l_1, l_2, \dots$ , la seva paritat valdrà

$$(-1)^{l_1} \cdot (-1)^{l_2} \dots = (-1)^{\sum l_i}$$

La quantitat anterior s'anomena *paritat orbital*.

b) A més hi ha un canvi generat per l'operador *induit* per obtenir la covariància. Aquest canvi no actua sobre les coordenades, sinó sobre els components dels espinors a través d'una multiplicació matricial. El valor propi que hi apareix és la *paritat intrínseca*.

*La paritat total d'un sistema és igual al producte de les paritats orbitals i intrínseques de totes les partícules.*

Les paritats intrínseques de les partícules es defineixen de forma relativa a partir de l'assignació inicial d'una paritat concreta a una partícula. Amb la hipòtesi de la conservació de la paritat en determinades interaccions es van assignant les paritats d'altres partícules, per tal que la paritat total es conservi entre els estats inicial i final. Més endavant, amb les paritats assignades es comprova la hipòtesi de conservació o no de la paritat total per a diferents processos posteriors.

És evident que la transformació de les coordenades per inversió espacial és igual a la composició d'una rotació de  $180^\circ$  i d'una simetria especular. Per això, quan tinguem problemes derivats de la no-conservació de la paritat sovint només parlarem de la simetria especular, que és la font real dels conflictes.

### **b) Transformacions per inversió temporal**

Davant del canvi de coordenades  $(x, y, z, t) \rightarrow (x, y, z, -t)$  obtenim l'operador  $T$  que actua sobre la funció d'ona per obtenir la covariància de l'equació evolutiva.  $T$  no actua amb la funció d'ona com un operador lineal sinó com un operador *antilineal*:

$$T(a\Psi_1 + b\Psi_2) = a^*T\Psi_1 + b^*T\Psi_2$$

## SOLUCIONS DE L'EQUACIÓ DE DIRAC

Les solucions de l'equació de *Dirac* per a una partícula lliure tenen, per a cada energia  $E > 0$  i impuls  $\vec{p}$  amb  $p^\alpha = (E/c, \vec{p})$ , la forma

$$\Psi_r^+(x) = C \cdot u_r(\vec{p}) \cdot \exp(-ip_\alpha x^\alpha / \hbar)$$

$$\Psi_r^-(x) = C \cdot v_r(\vec{p}) \cdot \exp(+ip_\alpha x^\alpha / \hbar)$$

Ambdues funcions posseeixen els valors corresponents de l'energia/impuls  $E/\vec{p}$  i  $-E/-\vec{p}$  respectivament.

Les  $u_r$  i  $v_r$  són matrius  $4 \times 1$  anomenades *espinors de Dirac* i verifiquen

$$(\not{p} - mc)u_r(\vec{p}) = 0 \quad (\not{p} + mc)v_r(\vec{p}) = 0 \quad r = 1, 2$$

Amb els valors  $i, j, k$  cíclics tenim les matrius  $4 \times 4$   $\sigma^{ij}$ , corresponents a les  $\sigma^{\mu\nu}$  definides abans,

$$\sigma^{ij} = \begin{pmatrix} \sigma_k & 0 \\ 0 & \sigma_k \end{pmatrix}$$

A partir de tot l'anterior podem fer les definicions

$$\vec{\sigma} = (\sigma^{23}, \sigma^{31}, \sigma^{12}) \quad \vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma} \quad S_p = \frac{\vec{S} \cdot \vec{p}}{|\vec{p}|}$$

$\vec{S}$  i  $S_p$  són els operadors *espín* i *helicitat* respectivament i les funcions  $\Psi_r$  tenen helicitats  $(-1)^{r+1} \cdot \hbar / 2$ .

Les energies negatives, doncs, no desapareixen, com ocorria també amb l'equació de *Klein-Gordon*. Vegem la interpretació que realitzà *Dirac* de les solucions amb energia negativa. Ell féu la hipòtesi que els estats d'energia negativa estan inicialment ocupats (*mar de Dirac*). Quan subministrem una energia  $2E$  apareix un electró amb energia  $E$ ; el "forat" que ha aparegut al mar de *Dirac* (l'absència d'un electró amb energia negativa) s'interpreta com l'aparició d'un positró amb energia  $E$  positiva (a la realitat creem la parella electró-positró a partir de la destrucció de dos fotons). *El positró és l'antipartícula de l'electró amb càrrega -e*. En el procés contrari de l'anterior, la interacció entre un electró i un positró (entre la matèria i l'antimatèria) dóna lloc a la seva anihilació mútua amb un rendiment energètic del 100%.

La intuïció genial de *Dirac* va fixar només un camí per avançar. La resposta que ell donà no era, però, plenament satisfactòria i la unió de la relativitat i la física quàntica de la seva equació fou només parcial. Calia arribar a la física quàntica de camps per poder salvar l'escull de l'aparició de les energies negatives i poder unir millor les dues teories anteriors.

## EL NEUTRÍ I LES PARTÍCULES AMB M=0

Aplicarem ara l'equació de *Dirac* a una partícula amb massa nul·la o bé amb energia  $E \gg mc^2$ . En aquest cas resulta més senzill emprar la representació de *Weyl*:

$$\tilde{\sigma}_i = -\sigma_i \quad \tilde{\sigma}_0 = \sigma_0 = 1 \quad \gamma_\mu = \begin{pmatrix} 0 & \tilde{\sigma}_\mu \\ \sigma_\mu & 0 \end{pmatrix} \quad \gamma_5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

L'operador  $\gamma_5$  és l'operador *quiralitat* i permet definir a partir de  $\Psi$  les funcions  $\Psi_L, \Psi_R$  que també són solucions de l'equació de *Dirac*:

$$\Psi_L = \frac{1 - \gamma_5}{2} \Psi \quad \Psi_R = \frac{1 + \gamma_5}{2} \Psi$$

A les partícules representatives d'ambdues funcions se les anomena *d'esquerres* ("left handed") i *de dretes* ("right handed"), respectivament, i verifiquen

$$\begin{aligned} \gamma_5 \Psi_L &= -\Psi_L & \gamma_5 \Psi_R &= +\Psi_R \\ \Psi_L &= \begin{pmatrix} 0 \\ \Psi_L^W \end{pmatrix} & \Psi_R &= \begin{pmatrix} \Psi_R^W \\ 0 \end{pmatrix} \\ S_p \Psi_R &= \frac{\hbar}{2} \Psi_R & S_p \Psi_L &= -\frac{\hbar}{2} \Psi_L \quad \text{si } E > 0 \\ S_p \Psi_R &= -\frac{\hbar}{2} \Psi_R & S_p \Psi_L &= \frac{\hbar}{2} \Psi_L \quad \text{si } E < 0 \end{aligned}$$

Les funcions  $\Psi_L^W$  i  $\Psi_R^W$  són espinors d'ordre 2x1 i verifiquen per separat les dues equacions de *Weyl* deduïdes de la de *Dirac*. La descomposició de  $\Psi$  en funció de les  $\Psi_L^W$  i  $\Psi_R^W$  és invariant de *Lorentz* (excepte per paritat). El mateix ocorre amb les dues equacions de *Weyl*. Com a conseqüència de l'anterior, podem considerar com a diferents les partícules representatives de les  $\Psi_L$  i  $\Psi_R$  que

verifiquen equacions independents i fer-ne la interpretació que segueix:

*Les partícules d'esquerres  $\Psi_L (E>0)$  són els neutrins, amb helicitat negativa (la projecció de l'espín sobre la direcció de l'impuls té sentit contrari a aquest) i les antipartícules d'esquerres  $\Psi_L (E<0)$  són els antineutrins amb helicitat positiva (la projecció de l'espín sobre la direcció de l'impuls té el mateix sentit que aquest). Ambdós tenen quiralitat negativa. No s'han trobat experimentalment neutrins-antineutrins de dretes  $\Psi_R$  amb la quiralitat positiva.*

La conversió entre neutrins  $\Psi_L$  i  $\Psi_R$  els dotaria de massa, permetria les oscil·lacions neutríniques i explicaria la minva aparent del nombre de neutrins emesos pel Sol (vegeu els capítols 9 i 10).

La no-invariància per paritat no és un problema, sinó al contrari: experimentalment hom comprova que a les interaccions febles on intervenen els neutrins no es conserva la paritat.

Si tenim partícules amb massa no nul·la, els estats  $L$  o  $R$  no són estats propis de l'helicitat. Tanmateix, per a energies grans, els estats propis  $L$  o  $R$  ho són molt aproximadament de l'helicitat.

Podríem generalitzar convenientment l'equació de *Dirac* per representar partícules amb espín  $s \neq 1/2$  i obtindríem totes les possibles projeccions de l'espín sobre l'impuls (helicitat), que correspondrien als números quàntics  $s, s-1, \dots, -s$  (en total  $2s+1$ ). Al límit corresponent a  $m \rightarrow 0$  apareix una discontinuïtat i només són possibles les dues helicitats  $\pm s\hbar$ .

El fotó ( $s=1$ ) només té dues helicitats  $\pm\hbar$ . Es demostra que això està relacionat amb el fet que amb  $m \neq 0$  l'helicitat no és invariant de *Lorentz* (si trobem una helicitat de la partícula des del nostre repòs i a continuació ens movem amb velocitat més gran que ella i l'avancem, la seva helicitat canviarà de signe per a nosaltres), mentre que amb  $m=0$  i  $v=c$  la helicitat de la partícula sí que és invariant de *Lorentz* (no podem avançar el fotó).

## **LA PARADOXA EPR I LES DESIGUALTATS DE BELL**

*La paradoxa d'Einstein-Podolsky-Rosen (EPR) pot ésser expressada senzillament en aquests termes:*

1-La física quàntica fa la previsió teòrica de l'estat *singlet* de dues partícules, on la mesura de les projeccions dels seus espins, segons una direcció qualsevol, dóna valors oposats. Aquest sistema serà una mescla coherent dels dos estats

$$|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle + |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle$$

Diem que els dos sistemes individuals estan *entrellaçats* ("entangled", en anglès).<sup>34</sup>

2-Esperem un temps suficient perquè la separació d'ambdues partícules sigui tal que la mesura de la projecció esmentada d'una d'elles *no influeixi* en la mesura posterior corresponent de l'altra. Ambdues mesures ens donarien resultats oposats.

3-A partir de la primera mesura, nosaltres *podem saber* el resultat de la segona mesura sense necessitat de fer-la.

4-Per tant, la projecció de l'espín de la segona partícula conté *un element previ de realitat*.

5-Invertint el raonament, podem afirmar el mateix de la primera partícula.

6-Per tant, les projeccions de l'espín d'ambdues partícules són propietats objectives posseïdes per elles.

La paradoxa consisteix en el fet que les conclusions anteriors van en contra dels principis quàntics que afirmen que *l'element de realitat* ans esmentat d'un observable només pot ésser *conegut* per la mesura que origina la seva manifestació.

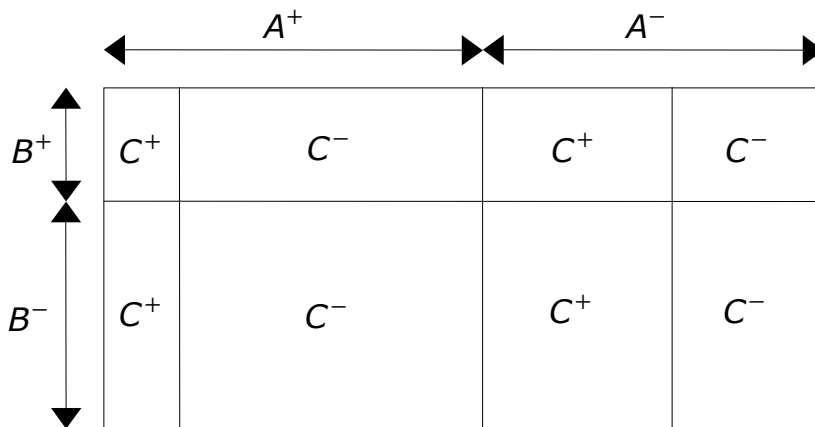
Per arribar a les anteriors conclusions paradoxals hem tingut en compte en essència els punts que esquemàticament exposem a continuació:

- a) Bondat del formulisme quàntic.
- b) Acceptació de la lògica clàssica.
- c) *Separabilitat* de les partícules, indicada per l'expressió "*no influeixi*".

Acceptant a priori a) i b) podem concloure la implicació

$$\text{separabilitat} \Rightarrow \text{propietats objectives}$$

Per obtenir *les desigualtats de Bell* podem raonar de la manera següent:



La figura anterior ens dóna esquemàticament els conjunts d'elements que posseeixen propietats objectives en relació a la dicotomia d'A-B i C. Si indiquem per  $N(XY)$  el nombre d'elements que tenen les propietats X i Y, podrem escriure les desigualtats que segueixen:

$$\begin{aligned}
 N(A^+B^-) &\leq N(A^+C^-) + N(B^-C^+) \\
 N(A^-B^+) &\leq N(A^-C^+) + N(B^+C^-) \Rightarrow \\
 N(A^+B^-) + N(A^-B^+) &\leq \\
 N(A^+C^-) + N(A^-C^+) + N(B^-C^+) + N(B^+C^-)
 \end{aligned}$$

Suposem ara que tenim un conjunt de singlets i que separem les partícules de cada singlet. Sobre un dels elements mesurarem la projecció de l'espín en *una* direcció i sobre l'altre ho fem en una *altra* direcció. Considerem, per exemple, que la primera mesura dóna el resultat  $A^+$  i la segona  $B^-$ . El valor  $n(A^+B^-)$  serà el nombre de vegades que la parella del singlet dóna els valors  $A^+$  i  $B^-$  mesurats, segons el mètode que hem explicat (el dispositiu de Stern-Gerlach permetria realitzar l'experiència anterior).

A continuació prenem les hipòtesis que segueixen:

a) Les projeccions de l'espín són objectives i contenen un element de realitat.

b) La inducció lògica ens permet, a partir dels resultats de correlació negativa observats en els singlets en mesurar la projecció de l'espín en una mateixa direcció, fer l'extrapolació que correspon a una altra mesura de la projecció en diferent direcció.

c) La separabilitat o no-influència en les mesures de cada element del singlet després de la separació.

A partir d'aquí podem raonar com fem a continuació. El valor real  $n(A^+B^+)$ , per exemple, seria  $[N(A^+B^-)+N(A^-B^+)]/2$ , ja que la coincidència  $(A^+B^+)$  només pot provenir del singlet corresponent a les partícules  $(A^+B^-)$  i  $(A^-B^+)$ . Per tant, sobre tot el conjunt es verificarà

$$n(A^+B^+) \leq n(A^+C^+) + n(B^+C^+)$$

Aquesta és una de les *desigualtats de Bell* (les altres es troben per permutació). Si realitzem les mesures sobre tres conjunts amb *un mateix nombre molt gran* de partícules, hi haurà una probabilitat elevada que aquestes desigualtats també es verifiquin.

Experiments, com els de *Aspect*, violen les desigualtats de *Bell*. D'aquí hem de concloure que a), b) o c) han de ser falses amb una elevada probabilitat.<sup>43</sup>

Acceptant el principi d'inducció, resulta la falsedat de

*separabilitat i propietats objectives*

o, dit d'una altra manera,

*separabilitat  $\Rightarrow$  propietats no objectives*

Podem reunir el que hem vist fins ara:

*Experiment de les dues esclatxes  $\Rightarrow$  no objectivitat*

*EPR: separabilitat  $\Rightarrow$  objectivitat*

*Experiment d' Aspect: separabilitat  $\Rightarrow$  no objectivitat*

***En conseqüència, és altament plausible que la realitat sigui no separable i sense propietats objectives.***

Ambdós aspectes eren implícits al caràcter *holístic* de la funció d'ona. En concret, la mesura d'una branca de l'estat singlet obliga al col·lapse de la funció d'ona global i, per tant, a la no-localitat. Les experiències anteriors semblen confirmar-los. *Allò que ha estat unit resta unit de forma incomprensible mitjançant una no-localitat, que probablement abrasi la totalitat del món...*

## LA SUPERACIÓ DE LA VELOCITAT C

L'experiència teòrica *EPR* aparentment sembla que impliqui una propagació instantània que origini una correlació negativa en-



tre partícules separades per un interval espacial. El col·lapse global de la funció d'ona conjunta és no local, però *la no-separabilitat no implica la propagació de cap senyal*. La majoria de malentesos que hi ha amb la paradoxa *EPR* provenen del fet de considerar separatament ambdues partícules, la qual cosa ens fa fer afirmacions com "la mesura de l'estat de la primera partícula ens condiciona la de la segona". Això és fruit d'una visió primitiva objectivada de la realitat: el que en realitat hauríem d'afirmar és que la mesura es realitza sobre el sistema binari total i que ella provoca el col·lapse en un dels dos sistemes quàntics globals

$$|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle \text{ o } |\downarrow\rangle|\uparrow\rangle$$

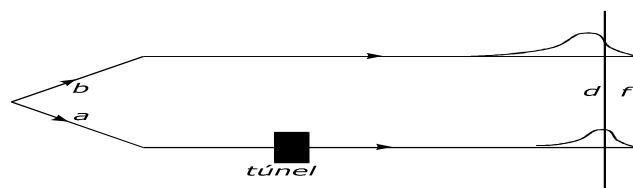
Això, com ja hem dit, ens obliga a acceptar la no-separabilitat de les dues partícules i el fet de la seva unitat.

L'aparent violació de la relativitat amb velocitats més grans que la de la llum ens apareix també a altres experiències. Podem ràpidament comentar-ne aquestes:

- > Velocitat de recessió galàctica.
- > Efecte túnel.
- > Propagació de la llum dins de la matèria.

L'expansió cosmològica fa que, aparentment, la llum es desplaci a través de distàncies més grans del que implicaria la velocitat  $c$ , basant-nos en l'edat de l'univers. La velocitat local de la llum mai ultrapassa, tanmateix, el límit relativista i la velocitat  $v$ , aparentment més gran que  $c$ , és només un efecte degut a l'expansió de l'espai còsmic.

A continuació mostrem que la velocitat de la partícula  $a$  que travessa el túnel, és aparentment més gran que  $c$  (l'efecte es pot comprovar amb un únic fotó en un estat de coherència quàntica).



La funció d'ona del fotó  $a$  és més petita que la del fotó  $b$ , degut a la seva probabilitat no gaire gran de travessar el túnel. Tanmateix, el màxim de l'ona  $a$  està avançat en relació al de  $b$ .

Quan els fotons incideixen sobre els detectors  $d$ , el col·lapse de la funció d'ona de  $a$  ocorrerà com a mitjana abans que la de  $b$ . Si els fotons  $b$  viatgen a la velocitat  $c$ , trobarem molts fotons  $a$  que es detectaran abans i tindran aparentment una velocitat  $v > c$ . El front  $f$  de les dues ones, però, avança a la mateixa velocitat  $c$  i la relativitat no és violada.

Vegem finalment la propagació de la llum dins de la matèria amb velocitat aparent més gran que al buit. La velocitat de propagació d'una ona monocromàtica a la matèria és més petita que  $c$ . Si tenim, però, una mescla de freqüències molt pròximes amb velocitats de propagació lleugerament diferents i el medi material provoca una *absorció elevada* de l'ona, la pulsació resultant pot tenir una *velocitat de grup* superior a  $c$  i fins i tot negativa (vegeu l'apartat de "La partícula lliure" d'aquest capítol). Tanmateix, semblantment al que ocorria amb l'efecte túnel, el moviment del front de l'ona lluminosa no viola la relativitat. La posició del màxim de l'ona que envolta la pulsació fixa l'instant més probable de la detecció del fotó a través del col·lapse quàntic. Altrament al que ocorre amb una partícula lliure, en aquestes condicions d'absorció extremes la velocitat de grup no correspon a la velocitat de transmissió de la informació i de l'energia continguda a l'ona lluminosa i, en conseqüència, no es viola la relativitat.

## LA COMPUTACIÓ QUÀNTICA

Els ordinadors s'han anat desenvolupant a través de successives generacions. En la primera i segona generació els elements electrònics bàsics de la computació eren les *vàlvules* i els *transistors* (els PNP o NPN que varen facilitar la utilització del *circuit imprès*), respectivament. El transistor, inventat per *Shockley*, *Bardeen* i *Brattain*, es basava en les propietats de les polaritzacions directa o inversa de les unions PN que el feien actuar com a amplificador o commutador electrònic. La *tècnica planar* de dopatge de semiconductors a través de la llum (*fotolitografia*) permeté a partir d'una única pastilla de semiconductor, que després es tallava a trossos (*xips*), la construcció de *circuits integrats*, ideats per *Noyce*. N'havia nascut la tercera generació. Amb

l'ús de memòries amb un tipus especial de *transistors de camp* (MOSFET = "Metal-Oxide-Semiconductor-Field-Effect-Transistor"), creats per *Kahng* i *Atalla*, i de la integració dels components de la UCP en un *xip* (*microprocessador*) n'aparegué la quarta generació. El corrent elèctric en el MOSFET és originat per un camp que actua sobre portadors de càrrega d'unions PN, la densitat dels quals és controlada mitjançant la polarització adequada de les unions. La cinquena generació intentarà emular la *Intel·ligència Artificial*. És possible que *els ordinadors quàntics*, que ara comentarem, constitueixin la futura sisena generació d'ordinadors.

En un ordinador convencional hi ha els bits que poden tenir només dos estats. Un sistema quàntic pot ser una mescla coherent d'una *munió* d'estats: en el cas que pugui tenir dos estats s'anomena un bit quàntic o un *qubit*, segons *Schumacher*. Si amb un conjunt de qubits realitzem un càlcul, aquest s'efectuarà sobre tots els nombres representatius dels estats de la mescla. Es tracta molt més que d'una computació paral·lela realitzada amb un sol ordinador, ja que el que en realitat tenim no són operacions paral·leles, sinó una combinació adient de totes elles a través de l'evolució quàntica representativa del càlcul.

El problema, essencial per a la descriptació d'un tipus especial de missatges en clau, de la descomposició d'un nombre molt gran en producte de dos de primers és pràcticament impossible de resoldre amb els ordinadors convencionals, perquè el temps de computació creix de forma exponencial amb la longitud del nombre  $i$ , si aquesta és molt llarga, aquell podria arribar a ser superior a l'edat de l'univers.

En la pràctica la descomposició d'un nombre  $N$  es basa en els punts següents:

- 1-Elegim un nombre aleatori  $a$ , entre 0 i  $N$ .
- 2-Definim la funció  $f(x)=a^x \bmod N$ .
- 3-Per a valors de  $x$  creixents  $f(x)$  té un període  $r$ .
- 4-Calcularem  $m = \text{MCD}(N, a^{r/2} + 1)$   $n = \text{MCD}(N, a^{r/2} - 1) \Rightarrow N = m \cdot n$

La descomposició factorial de  $N$  s'ha pogut realitzar gràcies al coneixement de  $r$ . Amb un ordinador convencional les dificultats per trobar  $r$  són d'un ordre semblant al de descompondre  $N$  mitjançant el mètode de les divisions successives.

La computació quàntica disminueix teòricament el temps de procés necessari. En un primer registre tenim una superposició quàntica dels possibles valors de  $x$ . En un segon registre tindrem la superposició quàntica dels valors  $f(x)$ . Ambdós registres estan enllaçats quànticament de manera que el col·lapse del segon dóna lloc a una superposició quàntica del primer amb un conjunt de valors de  $x$  de període  $r$ .

Amb una transformació evolutiva concreta del primer registre seguida del seu col·lapse quàntic arribem al coneixement d'un cert nombre  $c$ . La distribució probabilística de  $c$  té uns pics molt marcats per a aquells valors que permeten calcular  $r$  i fer la descomposició factorial de  $N$  (*efecte simfònic*). Si no obtenim un valor de  $c$  adient, tornem a repetir tot el procés. *Shor* ha demostrat que, amb una probabilitat pràcticament igual a 1, el temps de computació augmenta només potencialment amb la longitud de  $N$ .

A més, el col·lapse quàntic és un esdeveniment aleatori que ens pot endinsar en una *aleatorietat real* ben allunyada de la *pseudoaleatorietat que hom crea* amb els ordinadors ordinaris.

Aquests són alguns dels problemes teòrics més importants que apareixen amb la computació quàntica:

**1-El teorema de no-clonació.** Aquest teorema impedeix la clonació de la informació quàntica global amb la coherència pròpia d'ella. Si poguéssim clonar un sistema, mesuraríem les posicions exactes de les partícules en un d'ells i els seus moments en l'altre: el principi d'incertesa de *Heisenberg* seria violat. Com podem, doncs, realitzar operacions bàsiques, com la lectura de la informació necessària per a la detecció d'errors, sense que aquella sigui destruïda? *Shor* ha demostrat que, amb una informació repetitiva adient, podem corregir errors sense provocar la incoherència.

**2-La dificultat de la preservació de la coherència quàntica.** Podria l'evolució quàntica, inherent a la computació, realitzar-se, tot mantenint la coherència, si el temps d'aquella fos massa gran? No seria la indispensable transmissió interna de la informació l'origen de la seva incoherència final? Aquestes preguntes ara no tenen una resposta clara. El teletransport quàntic (vegeu l'apartat següent) podria, potser, contribuir que la transmissió informativa en preservés la coherència necessària.

## LA VIDA

La computació quàntica permetria anar més enllà de la miniaturització dels ordinadors actuals, gràcies als components moleculars que hi figuressin (*computació quàntica amb molècules*) i ensembles amb l'efecte simfònic podria explicar, en part, *l'aparició i evolució de la vida*. La cèl·lula (protocèl·lula, a l'origen de la vida) seria informada de les condicions de l'ambient exterior i actuaria com a instrument clàssic de mesura sobre les seves estructures internes en estat de superposició quàntica (els éssers vius tenen un caràcter de totalitat semblant a un sistema quàntic). La interacció amb l'entorn extern "dirigiria" (el nostre llenguatge és tan insuficient encara!) *l'elecció de la base d'estats propis* del conjunt entrelaçat format per la cèl·lula i les seves estructures internes, amb probabilitat màxima per a aquells estats en què l'ésser viu tingués una estabilitat més gran front els canvis ambientals.

Els col·lapses successius permetrien l'evolució cap a estructures estables. Seria altament improbable que aquestes estructures sorgissin de la unió màgica de l'atzar i de la selecció natural del darwinisme clàssic. Aquests canvis acumulats (*efecte Zenó invers*) permetrien l'aparició d'aquelles estructures, gràcies al propi ambient que *suavitzaria* l'atzar imprescindible a través de la selecció dels estats propis (mitjançant un procés desconegut a hores d'ara) i del seu col·lapse quàntic (*darwinisme quàntic*).

En qualsevol cas, l'estabilitat pròpia dels éssers vius és afavorida, en general, gràcies al seu gran nombre d'àtoms que donen lloc a mitjanes estadístiques amb fluctuacions baixes i als nivells quàntics que impedeixen els trànsits continus més fàcils.

## EL TELETRANSPORT QUÀNTIC

El fenomen *EPR* es pot utilitzar per transmetre informació privada sense la propagació real d'aquesta, amb l'ajuda d'una altra transmissió convencional clàssica pública.

Suposem dues persones, *A* i *B*, que reben cadascuna de les partícules d'un singlet,  $P_A$  i  $P_B$ , respectivament. Una altra partícula-

la,  $\rho_C$  conté informació quàntica, coneguda o no per  $A$  i que aquest vol comunicar a  $B$ . *Es demostra* que, si  $A$  fa col·lapsar el conjunt  $\rho_A-\rho_C$ , col·lapsa el sistema  $P_A-P_B-P_C$  i varia l'estat de  $\rho_B$  de tal manera que amb la informació  $q$ , referent a l'estat  $\rho_A-\rho_C$ , que  $A$  envia per transmissió clàssica a  $B$ , aquest a través de  $P_B$  recupera  $\rho_C$ .  $B$  coneixerà un missatge sense ésser transmès realment, mentre que la informació  $q$  preserva el seu caràcter confidencial, perquè només pot ésser descodificada per  $B$ , posseïdor de  $\rho_B$ .

El teletransport quàntic no vulnera el teorema ans esmentat de la no-clonació quàntica, perquè aquesta no hi figura duplicada en  $A$  i  $B$ : o està en  $A$  o està en  $B$ , però no en ambdós llocs alhora.

La transmissió d'informació tampoc vulnera el principi de la relativitat, perquè  $B$  només estarà en possessió d'ella després de rebre la informació clàssica  $q$ , que no pot viatjar més ràpida que la llum. La variació "instantània" de l'estat de  $P_B$  és deguda a la no-localitat quàntica pròpia dels estats entrellaçats, amb els quals cada vegada haurem de conviure amb més naturalitat.<sup>34</sup>

A continuació explicarem a grans trets els fonaments teòrics del que acabem de dir.

Suposem que l'estat singlet de les partícules  $A$  i  $B$  sigui el

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_A\rangle|\downarrow_B\rangle - |\downarrow_A\rangle|\uparrow_B\rangle)$$

La partícula  $C$  estarà representada per

$$|\varphi_C\rangle = a|\uparrow_C\rangle + b|\downarrow_C\rangle \text{ amb } a^2 + b^2 = 1$$

Finalment, el conjunt de les tres partícules serà

$$|\varphi_{CAB}\rangle = \frac{a}{\sqrt{2}} \cdot (|\uparrow_C\rangle|\uparrow_A\rangle|\downarrow_B\rangle - |\uparrow_C\rangle|\downarrow_A\rangle|\uparrow_B\rangle) + \frac{b}{\sqrt{2}} \cdot (|\downarrow_C\rangle|\uparrow_A\rangle|\downarrow_B\rangle - |\downarrow_C\rangle|\downarrow_A\rangle|\uparrow_B\rangle)$$

Amb les partícules  $A$  i  $C$  es realitza una mesura no individualitzada, la *mesura de Bell*, que permet conèixer en quin dels quatre estats de Bell

$$|\Phi_{CA}^{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_C\rangle|\downarrow_A\rangle \pm |\downarrow_C\rangle|\uparrow_A\rangle) \quad |\Psi_{CA}^{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_C\rangle|\uparrow_A\rangle \pm |\downarrow_C\rangle|\downarrow_A\rangle)$$

es troba el conjunt  $AC$ .

Si ara expressem els estats  $|C\rangle|A\rangle$  en funció dels estats de *Bell* obtindrem l'expansió

$$|\Phi_{CAB}\rangle = \frac{1}{2} \cdot (|\Phi_{CA}^-\rangle \cdot (-a|\uparrow_B\rangle - b|\downarrow_B\rangle) + |\Phi_{CA}^+\rangle \cdot (-a|\uparrow_B\rangle + b|\downarrow_B\rangle) + |\Psi_{CA}^-\rangle \cdot (a|\downarrow_B\rangle + b|\uparrow_B\rangle) + |\Psi_{CA}^+\rangle \cdot (a|\downarrow_B\rangle - b|\uparrow_B\rangle))$$

Després d'haver mesurat l'estat de *Bell AC* la partícula *B* estarà en un estat que dependrà de la mesura anterior.

Quan a *B* rebem la informació sobre l'estat de *Bell AC*, sabem exactament l'operació que cal fer amb la partícula *B* perquè aquesta es transformi en la *C* original.

El teletransport quàntic ens aboca a la ciència-ficció (el 1997 es teletransportà un fotó). Podríem entrellaçar dos sistemes macroscòpics situats en dos llocs molt allunyats. La interacció posterior del sistema *A* amb el sistema *C*, que volem teletransportar, seguida de la telecomunicació d'informació adient permetria la materialització del sistema *C* en *B*. Això és molt diferent de la desmaterialització de *C* teletransportada a *B* que faria desaparèixer *C* d'un lloc i aparèixer en un altre. El que en realitat ocorreria, doncs, seria l'aparició de *C* en *B* tot romanent les seves "deixalles" en *A*.

## EL SIGNIFICAT DE LA FÍSICA QUÀNTICA

Quant al tema que ens ocupa, seguirem en part les idees de *Franco Selleri* i *Mario Bunge*. La física quàntica es desenvolupà fonamentalment al llarg de tres generacions des de finals del segle XIX:

- 1-*Planck, Sommerfeld.*
- 2-*Ehrenfest, Einstein, Born, Schrödinger, Bohr.*
- 3-*De Broglie, Pauli, Heisenberg, Jordan, Dirac.*

La majoria d'ells eren d'Alemanya-Àustria amb l'excepció de *Bohr* (Dinamarca), *de Broglie* (França) i *Dirac* (Anglaterra).

La física quàntica participà dels grans canvis del pensament ocorreguts des de finals del segle XIX i durant la primera meitat del segle XX i de la nova visió que, com a conseqüència, hi sorgí.

En el naixement de la física quàntica el debat fou la norma. *Jordan* creà les bases de l'estructura matemàtica de la teoria i *Di-*

*rac* i *Sommerfeld* posaren l'èmfasi en la seva bellesa (els col·laboradors de *Sommerfeld* anomenaven atomística aquest aspecte de la seva visió pitagòrica de les relacions numèriques atòmiques).

La interpretació probabilística es degué a *Born*. *Pauli*, a través de les seves converses amb *Carl Jung*, fonamentà la seva visió de la *sincronia* del món (les correlacions i coincidències significatives) a través d'una realitat més profunda, equivalent a l'arquetipus de *Jung*, que donava unitat al món. Les reflexions d'*Ehrenfest* i *Bohr* animaren els debats.

La figura cabdal de tot el grup, però, fou *Bohr*.

Des del començament es plantejaren aquestes qüestions:

1-*Existeixen els objectes físics realment amb independència de les nostres observacions?*

2-*Podem fer descripcions adients d'ells, segons la nostra concepció espaciotemporal habitual?*

3-*Es compleix el principi de causalitat al món que descriu la física quàntica?*

Els debats sovintejaren a les conferències de *Solvay* a l'hotel *Metropol* de *Brussel·les* entre *Einstein*, *Bohr*, *Born*, de *Broglie* i *Schrödinger*, a les revistes de física i a través de correspondències. En el diàleg entre *Popper* i *Einstein* quedà clar que la qüestió cabdal era el realisme i no el determinisme. Tanmateix, el debat central el protagonitzaren *Einstein* i *Bohr*.

El formulisme matemàtic no fou qüestionat en cap moment i, finalment, tingué, enmig de fortes diferències, la interpretació guanyadora de *Copenhaguen-Gotinga* basada en *la complementarietat de Bohr*, *el principi d'incertesa de Heisenberg* i *la interpretació probabilística de Born* i que afirmava::

->La presència de probabilitats *fenomenològiques essencials* i que, per tant, la física quàntica era *completa i no li mancava res*.

->Una actitud *sovint no realista*, basada en el positivisme del Cercle de Viena, a partir de la qual res no es podia afirmar sobre la hipotètica realitat dels objectes quàntics, més enllà de les dades observacionals i de les nostres representacions, sovint parcials i limitades pel nostre llenguatge.

Contra aquesta interpretació, globalment, estaven *Planck*, *Einstein*, *Ehrenfest*, *Schrödinger* i *de Broglie*. *Heisenberg* de mica en mica se n'allunyà de la seva visió positivista dient que *el més*



*important era comprendre i no predir* i, en aquest sentit, s'acostava a la concepció de *Bohr*, sovint mal interpretat fins i tot pel cercle de Copenhaguen-Gotinga, que així reflexionava sobre el significat del terme *comprendre*, tot parafrasejant *Schiller*: "Només la plenitud porta a la claredat, la veritat habita dins de l'abisme", amb la qual cosa volia dir que només a partir de nous conceptes, paraules i imatges arriscades per superar les contradiccions aparents (com a la poesia) canviariem el pensament i la *comprensió* de la realitat que hi ha més enllà dels fenòmens.

*Einstein* no acceptava les probabilitats essencials ("Déu no juga als daus... i és subtil, però no malvat") i defensava la introducció de *variables ocultes*, per recuperar la causalitat, i l'eliminació dels components subjectius per encabir dins de la teoria la seva concepció realista del món.

Quant a la *completesa*, de *Broglie-Bohm* i posteriorment *Bell* han demostrat que el teorema de *von Neumann*, que afirma la incompatibilitat del formulisme quàntic amb la presència de variables ocultes, es refereix únicament a les variables *locals* que actuen sobre una partícula en un instant i són *independents* del que passi fora de l'estricta entorn de la partícula al mateix instant (pensem que les variables locals farien molt difícil explicar l'extraordinària correlació de moltes propietats). Per tant, malgrat que a la física quàntica no tenim variables ocultes, les podríem introduir, amb la qual cosa la teoria no seria completa. A més, extrapolant el teorema de *Gödel*, la consistència de la teoria quàntica, *exempta de contradiccions*, ens conduiria a afirmacions vertaderes no demostrables que palesarien la seva incompletesa.

Ara, amb la serenor del temps passat, podem dir, amb totes les precaucions que és possible, que la nostra visió pren aspectes essencials defensats per *Bohr* i *Einstein*, separadament o no:

->Tota teoria física ha de *revelar* d'alguna manera una realitat externa a l'observador i exempta dels components subjectius (*Einstein* i el *realisme* hi guanyarien, amb un concepte de realitat, però, ben allunyat de l'espaciotemporal que ell tenia!).

->Quan descrivim la realitat fenomenològica amb els conceptes propers heretats dels nostres avantpassats, les afirmacions que en fem són paradoxalment i necessària estranyes per a la nostra forma habitual de pensar (*Bohr* guanyaria).

Fins fa relativament poc temps la majoria de físics afirmava el caràcter *essencial* de les probabilitats quàntiques i *la duplicitat necessària de les presències de l'evolució determinista i del col·lapse probabilístic* (Bohr guanyaria). Malgrat tot, en paraules de Dirac, "la física quàntica no ha trobat encara la seva expressió definitiva i està necessitada de canvis profunds... és summament probable que a la llarga la raó estigui del costat d'Einstein".

Per acabar, hem de dir que els termes del principi de Heisenberg no són rigorosament ni incerteses ni indeterminacions (conceptes barrejats al llarg del temps i assignats a l'esmentat principi). No són indeterminacions, perquè els objectes quàntics no són puntuals, malgrat que es puguin manifestar puntualment. No són incerteses, perquè no hi ha ambigüitat en el coneixement de la manifestació espacial concreta d'un objecte que no és puntual. Ambdues expressions són fruit del prejudici gratuït d'assignar als sistemes quàntics les propietats objectives dels objectes macroscòpics. Es tracta simplement de dispersions, al pla de la manifestació dels fenòmens, ocasionades per la dinàmica del món. Amb aquesta visió la física quàntica no seria acausal, tot afirmant la realitat de les probabilitats com a *propensions a manifestar-se*, seguint Popper, amb una evolució determinista.

En el que segueix *mostrarem* i *suggestirem* l'estranya realitat quàntica, tot seguint el consell de Wittgenstein, i ho farem, dins d'un respecte total amb el "callar del que no podem parlar" del mateix Wittgenstein, mitjançant la raó poètica de la *paraula* a través dels seus símbols i de les seves imatges.

Prescindirem del solipsisme, que nega tota realitat fora del "jo" individual. Ens preguntarem sobre la naturalesa de la realitat i ens endinsarem, amb totes les precaucions possibles, en la "realitat velada" d'Espagnat. També ho farem en el "gran drac vaporós" amb cua i cap, però sense cos, de Wheeler, que fa referència al desconeixement que tenim de la realitat quàntica entre dos col·lapses successius coneguts. I caminarem entre el que "és dicible i el que és indicable" de Bell.

Tanmateix, està molt lluny de nosaltres la negació dogmàtica de la possibilitat de coneixement que ens aporten la poesia, l'art i el misticisme a través de la unió *sense preguntes* amb el Misteri, que no és altra cosa que l'amor al món.

## INTERPRETACIONS DE LA TEORIA QUÀNTICA

El paper *privilegiat* de l'observador en la física quàntica ens torna al període anterior a *Copèrnic* i la doble presència de l'evolució quàntica lineal a través de la seva equació de *Schrödinger*, per exemple, i del col·lapse quàntic no lineal posterior no és gens satisfactòria. A hores d'ara s'han buscat moltes explicacions alternatives a aquests problemes, que a grans trets exposem a continuació, sense, però, aprofundir-ne els detalls:

### 1-TEORIA DE WIGNER

*Wigner* assigna a la consciència el paper actiu en la creació del col·lapse quàntic ("ser és ésser percebut", com diria *Berkeley*). La seva concepció és la més propera a l'ortodoxa de Copenhaguen. Els sistemes macroscòpics romanen en un estat de coherència quàntica mentre una ment conscient no els observés. *El gat de Schrödinger*, que està dins d'una habitació aïllada amb una ampolla de cianur que pot ésser oberta aleatòriament, estaria en una mescla coherent de gat viu/mort fins que nosaltres obríem l'habitació i provoquéssim el col·lapse amb la nostra observació. Ens preguntem: On és l'observador quan estudiem *tot* l'univers abans de l'aparició de la consciència? O bé la consciència és essencial a la realitat des de *sempre*?

### 2-TEORIA D'EVERETT-DE WITT

Per a *Everett* i *De Witt* l'univers evoluciona segons la dinàmica quàntica i tot ell és una mescla coherent fenomenològica i de consciència. No apareix cap col·lapse: *els distints mons co-existeixen en un univers més gran (multivers)*, però cada consciència només contempla un d'ells.<sup>37</sup> Segons paraules d'*Everett*, "únicament hi ha un gran món, però conté molt més del que pensem". Segons *Deutsch*, podria haver-hi una comunicació petita entre aquests mons i paradoxes com la de les dues esclatxes s'esvairien.

Moltes preguntes ens apareixen entorn a l'essència de la consciència:

És reductible la consciència a la física? O, potser, seria necessari un paradigma nou que donés lloc a principis insospitats,

tot afirmant un monisme essencial que es manifestaria en una fenomenologia *complementària* (ben allunyada de la dualitat!) que abracés alhora la física i la consciència? Segons *Wheeler*, la informació seria l'essencial i es manifestaria en diferents plans: l'exterior seria la física i l'interior la consciència. Ambdós serien universals al llarg de tot el cosmos: la no-localitat física estaria acompanyada per la corresponent no-localitat de la consciència.

### 3-TEORIES DE BOHM

La formulació de *Bohm* de la física quàntica és determinista i les partícules tenen posicions definides. Hi apareixen dos tipus d'equacions evolutives: l'equació de *Schrödinger* i les de les posicions de cada partícula, on està present un *camp quàntic addicional* que actua *no localment*, depèn de la *forma* de la funció d'ona de totes les partícules de l'entorn de l'experiment (potencialment tot l'univers) i guia la trajectòria de cada partícula. L'anterior *fa innecessàries la introducció del col·lapse, de l'observador i de la distinció entre els móns clàssic i quàntic*. El desconeixement de les posicions inicials de les partícules introdueix el càlcul de probabilitats mitjançant la funció d'ona. Les probabilitats no són, doncs, essencials, sinó fruit del desconeixement inevitable. Tenim una teoria de variables ocultes, que, segons *Bell*, han de ser no locals<sup>12</sup>.

Per a *Bohm* la realitat està organitzada en una multiplicitat (potser infinita) de nivells. Amb *l'holomoviment*, hi hauria un *desplegament* i un *replegament* continu entre *l'ordre implicat* i *l'ordre explicat* del món amb intercanvi d'informació, *no local i no energètic*, a través del potencial quàntic<sup>12</sup>.

### 4-TEORIA DE WHEELER

Segons *Wheeler*, la realitat bàsica no seria l'espai sinó el *superespai*. Aquest vindria a ser un espai d'espais relacionats per mitjà de les *connexions multidimensionals* dins del superespai. L'Univers contindria, a través de la seva funció d'ona que verificaria l'equació quàntica gravitacional atemporal al superespai de *Wheeler-De Witt*, una superposició quàntica d'infinitos universos. Les quatre coordenades serien espacials a les rodalies d'un *Big Bang* sense singularitats i el temps apareixeria més endavant.

Cada univers seria *participatiu*, la realitat emergiria a partir de l'acte de l'observació i, amb el seu *"it from bit"*, aquella manifestació física tindria el seu origen en la informació. Què s'entén,

però, per observador: un sistema clàssic, un organisme viu, una ment conscient? *Wheeler* no és antirealista, però la seva realitat més profunda no té atributs físics fins que se la fa emergir.

### **5-LA VISIÓ DE PAULI**

En la seva visió del món són fonamentals els conceptes jungians de sincronia i arquetipus. Segons *Pauli*, el món exterior és el que es manifesta a la nostra consciència. Tanmateix, hi ha una realitat oculta que, com els arquetipus de *Jung*, brota des de l'interior a l'exterior. En conseqüència la realitat és molt més que allò de què som conscients i la no-localitat seria una conseqüència de principis variacionals aplicats a una realitat molt més global que no pas la nostra. El que és real està en un nivell profund que actua connectivament a través de la informació. Això fa possible la sincronia: es tracta de les coincidències significatives. El reduccionisme de la totalitat a les seves parts és només parcial: les parts també són condicionades per la totalitat. La no-linealitat introdueix la cooperació entre les parts i la creativitat a través de noves relacions. L'emergència de noves propietats no es pot limitar reductivament a les antigues. Es tracta del desplegament d'un ordre més profund que el de la superfície dels fenòmens. És el mateix que expressava *Heisenberg*: el que és essencial no són les partícules, sinó les simetries que hi ha més enllà d'elles i que, com els arquetipus de *Jung* o les formes polièdriques de *Plató*, es materialitzen al nostre món. Es tracta d'un rebuig clar de les concepcions materialistes de *Leucip* i *Demòcrit* i un apropament a la substància aristotèlica i al seu pas de la potència a l'acte.

### **6-LA DINÀMICA INTERACTIVA UNIFICADA (DIAU)**

*Laszlo*, des de la teoria general de sistemes de *Bertalanffy*, explica la sincronia a partir de la presència d'un camp que abraçaria, des del buit quàntic omnipresent, la totalitat del *metavers*. El nostre món de consciència-energia sorgiria del buit i retornaria a ell, tot restant connectat a través de la comunicació superlumínica de la informació continguda en aquell camp. En ell es "gravaria" permanentment i hologràfica la realitat fenomenològica, que romandria unida més enllà de la separació en l'espai i en el temps. Així, s'explicarien fenòmens com la no-localitat, la sinergia de la superconductivitat i la superfluidesa, la comunicació entre els electrons d'un àtom per ocupar els nivells estacionaris correctes,

d'acord amb el principi d'exclusió de *Pauli*, l'evolució aparentment aleatòria de la vida i el perquè del nostre *a priori improbable* univers, sorgit, com l'au Fènix, de les cendres d'un altre.

### **7-INTERPRETACIÓ GRW**

La teoria GRW (*Ghirardi, Rimini i Weber*) postula els col·lapses microscòpics *naturals continuats*. Degut a l'essència no separable de la realitat, es provocaria el col·lapse de tot sistema macroscòpic amb la pèrdua de la superposició quàntica.

### **8-LES NOVES CONCEPCIONS DE LA FÍSICA QUÀNTICA**

La física té plantejats dos problemes importants: el de la compatibilitat de la irreversibilitat experimental amb la reversibilitat de les equacions evolutives i el de *la absència, en general, de coherència i d'estats entrelaçats en els sistemes macroscòpics*. No podrien estar ambdós relacionats? L'esperit de la teoria inicial de *Bohm* en què el determinisme era compatible amb un "cert" indeterminisme ha inspirat les noves concepcions de la física quàntica.

Estudis relativament recents (*Hartle, Gell-Mann, Griffiths, Omnès, Zee, Zurek, Joos,...*) han demostrat que els sistemes macroscòpics (un aparell de mesura interaccionant amb un sistema microscòpic ho és) evolucionarien cap als estats incoherents finals amb les probabilitats teòricament previstes (la realitat del col·lapse del sistema quàntic durant una mesura no apareixeria enlloc i esdevindria únicament un element de càlcul útil per conèixer les probabilitats de les mesures posteriors). L'anterior seria possible, gràcies al fregament irreversible amb la resta de *l'univers contínuament canviant en essència* que faria compatibles el determinisme global amb l'indeterminisme local (*Einstein* guanyaria en el debat amb *Bohr* i el pensament que ell expressava còmicament en una nota dirigida a *Ehrenfest* durant una conferència, en el sentit que en el purgatori els físics quàntics serien condemnats a aprendre física clàssica durant deu hores al dia, esdevindria una realitat!). No totes les històries serien tingudes en compte en els càlculs: només es considerarien aquelles "bones" històries en què la seva probabilitat complís estrictament els postulats clàssics de la teoria de la probabilitat (*històries de Griffiths*).

Així com la computació quàntica de *Shor* originaria un efecte simfònic que facilitaria el col·lapse posterior a estats molt precisos, anàlogament la interacció irreversible d'un sistema macros-

còpic amb el seu ambient *imprevisible* dirigiria simfònicament també l'evolució quàntica cap als estats propis, amb les probabilitats que la teoria estàndard preveu i la desaparició posterior de la coherència. L'aparició de la incoherència d'un sistema no és instantània: és necessari un temps per destruir la coherència, però aquell seria tan petit que impossibilitaria pràcticament la seva detecció.

La paradoxa quàntica podria resoldre's amb el pas del món quàntic al clàssic: el món quàntic seria l'essencial (hauríem trobat els principis de la seva realitat inabastable als nostres sentits, en contra de *Hume*) i el clàssic apareixeria com a una conseqüència de l'anterior a partir d'una *correspondència* ben determinada (*anàlisi microlocal i càlcul pseudodiferencial*): Déu ja no jugaria als daus! Amb aquest nou plantejament no serien els nostres "a priori" els que abastarien la Realitat (en contra de *Kant*), sinó que seria una part d'aquesta la que hauria anat modelant la nostra visió al llarg de l'evolució biològica de l'home.

Els postulats de la física quàntica apareixerien així com a teoremes de la nova teoria i les probabilitats sorgirien degut al fet de no poder copsar plenament la Realitat. La consideració d'històries no detallades macroscòpiques, amb la *integració* dels seus detalls, eliminaria les interferències probabilístiques amb l'aparició de la incoherència. No es tractaria d'una ignorància estadística clàssica, sinó d'una selecció del que veuríem, a través d'un conjunt d'històries concretes, condicionada pel nostre passat biològic. En paraules d'*Omnès*, aquesta transmutació des del nivell fonamental a l'aparent és un dels grans descobriments filosòfics del nostre temps. La informació externa rebuda a través del nostre canal de comunicació es perdria en part. Hi hauria una incompatibilitat bàsica entre la Realitat i els nostres intents per poder abastar-la. A través de les matemàtiques podríem intuir la continuïtat que hi ha darrera de la discontinuïtat fenomenològica, però el seu significat profund romandria allunyat de la nostra visió quotidiana.

Tant el teorema de recurrència de *Poincaré* com el de recurrència quàntica afirmen que en sistemes confinats en una regió finita l'evolució permet acostar-se repetidament tant com vulguem a tots els estats en un temps suficientment gran. Les

històries no detallades podrien aparèixer amb la presència de microestats, compatibles amb un macroestat, no equiprobables (com ocorre en els processos irreversibles), la qual cosa eliminaria els microestats que evolutivament originessin estats macroscòpics coherents absurds. Això tindria com a conseqüència la no-ergodicitat, en no visitar-se tots els microestats possibles, i permetria foragitar els teoremes de recurrència.

Ignorar l'entorn ens conduiria a la irreversibilitat i a la incoherència macroscòpiques (*Prigogine*, tanmateix, afirma tot el contrari: és la irreversibilitat i la creativitat el que és essencial al món, mentre que la reversibilitat n'és una conseqüència). La coherència i la reversibilitat romandrien, potser, si tinguéssim en consideració l'entorn, en lloc d'integrar-lo, tot ignorant els seus detalls i determinats microestats.

L'aïllament amb l'entorn i, en conseqüència, l'absència de fregament mantindria la coherència dels sistemes macroscòpics: és el que hauria d'ocórrer en la computació quàntica i en els sistemes superconductors, com l'SQUID. És també el que passa amb la superfluïdesa i la llum. La llum formada per molts fotons amb una nul·la interacció entre ells és un sistema macroscòpic que produeix interferències pròpies de la coherència quàntica.

L'SQUID ("*Superconducting Quantum Interference Device*" = dispositiu superconductor d'interferència quàntica) consta d'un anell superconductor (vegeu "la superconductivitat" en aquest capítol) interromput per una o dues *unions aïllants de Josephson* (UJ): es tracta dels SQUIDS tipus S1 i S2, respectivament.

*L'estudi rigorós de l'efecte túnel de la unió UJ demostra que el corrent d'electrons aparellats depèn de la diferència de fase de l'ona quàntica en ambdós extrems de la unió UJ.* En una UJ pot circular un corrent elèctric sense caiguda de tensió mentre aquell no arribi a un valor crític (*efecte Josephson cc*), a partir del qual apareix ràpidament una diferència de potencial. En una UJ sotmesa a una diferència de potencial circula un corrent altern *superconductor* amb una freqüència que és funció del valor d'aquella (*efecte Josephson ca*).

En l'SQUID el corrent circula a partir dels electrons que es lliguen en parelles (*parelles de Cooper*) i que, degut al seu caràcter bosònic, poden ocupar el mateix estat quàntic. La coherència



quàntica de llarg abast fa que en cada punt hi hagi un valor concret de l'ona podent haver-hi una diferència de fase de  $n \cdot 2\pi$  radians al llarg d'un recorregut tancat. La diferència de fase a través de les UJ i la influència del potencial magnètic sobre la fase electrònica (vegeu l'efecte *Aharonov-Bohm* dins de les "Qüestions entorn de l'EDQ" del capítol següent) fa que hi hagi *una relació molt estreta entre el corrent superconductor i el flux magnètic global que el travessa*. Durant el període transitori necessari per establir l'SQUID hi haurà valors de  $n$  energèticament més favorables. El flux magnètic resulta ser finalment un múltiple del flux quàntic elemental  $\Phi_0 = h/2e$  (rigorosament és el *fluxoid*, quantitat que en condicions normals és quasi igual al flux magnètic, el que ha d'estar quantificat). Si el corrent de les UJ supera el valor crític, la tensió elèctrica quasi instantània que apareix tindrà una correlació molt gran amb el flux magnètic *original*. Així, un SQUID troba la seva aplicació com a magnetòmetre i com a commutador ultraràpid.

Teòricament, segons ha demostrat *Leggett*, podem fixar els paràmetres d'un SQUID  $S_1$  travessat per un camp magnètic de manera que hi hagi dos corrents superconductors energèticament favorables i altament probables amb sentits contraris. *El sistema macroscòpic format per totes les parelles de Cooper podria situar-se en un estat mescla coherent d'aquestes dues possibilitats: dos valors diferents del flux global  $\Phi$  que el travessa*.

El problema fonamental que hi ha en la detecció d'aquesta mescla quàntica coherent macroscòpica està en la destrucció de la coherència que es produeix quan es realitza una mesura. Per tal d'evitar-ho incorporem el flux de l'SQUID  $S_1$  a altres dos SQUIDS,  $S_a$  i  $S_b$ , de manera que es mantinguin en una mescla coherent de fluxos  $\Phi'$  equivalents a  $\Phi$ . Els fluxos  $\Phi'$  interaccionaran posteriorment amb dos magnetòmetres,  $M_a$  i  $M_b$ , la qual cosa donarà lloc en ells a les mesures corresponents. Aquestes mesures farien evident la coherència macroscòpica de  $S_1$  en absència de fregament, *si aquelles donessin resultats diferents: és el que ha trobat recentment J.R. Friedman*.

També s'ha observat la coherència quàntica macroscòpica a l'experiment de les dues esclatxes realitzat amb les molècules  $C_{60}$  del tipus dels *fullerens*. Aquesta és la molècula amb el més gran

nombre d'operacions de simetria que existeix: 120 en total! *Leonhard Euler* ja havia demostrat que una superfície "esfèrica" enterament construïda amb pentàgons i hexàgons havia de tenir exactament 12 pentàgons. Segons el nombre d'hexàgons obtenim diferents molècules anomenades fullerenes en honor a l'arquitecte *Richard Buckminster Fuller*, famós per les seves cúpules geodèsiques formades per pentàgons i hexàgons. La molècula  $C_{60}$  és una nova forma de carboni sòlid, a més del diamant i del grafit. A hores d'ara són coneguts milers de fullerenes. Amb l'addició d'àtoms alcalins obtenim nous materials superconductors.

L'absència global de càrrega elèctrica d'aquest compost altament simètric sembla estar a l'origen de la conservació de la coherència quàntica, malgrat la seva gran massa. A l'electró carregat elèctricament, però lleuger, i al neutró més pesant, però elèctricament neutre, s'han observat des de molt abans figures d'interferència a l'experiment de les dues esclatxes. Aquí pot raure la dificultat d'obtenir el mateix amb protons on la seva càrrega elèctrica i la seva massa han de donar lloc a una forta interacció ambiental amb les esclatxes i a la pèrdua de la seva coherència i de la interferència posterior.

Les dimensions espacials de l'*ADN* molecular similars a les del  $C_{60}$  ens permetrien afirmar que aquell seria també un sistema macroscòpic amb propietats coherents. Si la interpretació quàntica dels molts móns fos la correcta, l'aparició de propietats evolutives altament improbables tindria una explicació raonable en ocórrer en un d'aquests móns de l'univers: el nostre món.

Per completar l'anterior, diguem que els àtoms de carboni tenen la propietat de enllaçar-se de maneres molt diferents amb la formació de molècules força diversificades. La combinació lineal de molècules de carboni adients permet la creació dels *nanotubs*, d'aplicació important en la futura tecnologia de la computació.