

# Una Aproximación Didáctica al Principio de Incertidumbre de Heisenberg y Aplicaciones a Sistemas Simples

R. Acevedo<sup>1</sup>, T.Meruane<sup>2</sup>, G.Navarro<sup>3</sup>

1)Dirección de Investigación y Desarrollo. Vicerrectoría de Desarrollo. Universidad Mayor. Avenida Américo Vespucio Sur 357. Las Condes. Santiago. Chile.

2.-)Departamento de Química. Universidad Metropolitana de Ciencias de la Educación. Avenida José Pedro Alessandri 774. Santiago. Chile.

3.-) Facultad de Ingeniería y Tecnología. Universidad San Sebastián. Bellavista 07. Recoleta. Santiago. Chile.

## Resumen

El objetivo de este artículo es introducir un esquema pedagógico, para la consideración de relaciones de incertidumbre entre variables dinámicas asociadas a operadores hermiticos del espacio de Hilbert, no conmutables entre sí, analizándose las restricciones, bajo las cuales estas relaciones son válidas. Se estudian las dificultades e inconsistencias que se originan en la transformación de las expresiones en coordenadas Cartesianas de los operadores a coordenadas polares esféricas. Las derivaciones, están generalmente basadas en el conmutador posición-momentum, de esta forma la analogía para energía-tiempo pareciera exigir el considerar el tiempo como si fuese un operador, lo cual no es tal en Mecánica Cuántica . De hecho, tal cosa se esperaría para teorías relativistas, dado que el tiempo y la energía se transforman entre sí de un observador a otro. No obstante, la relatividad exige el considerar teorías cuánticas de campos, donde el operador posición no tiene lugar. De esta forma, las relaciones de incerteza posición-momentum adoptan semejanza a las de energía-tiempo y por razones parecidas. En este artículo, presentaremos una derivación para la incerteza energía-tiempo, independiente de operadores. La derivación que se presenta, no es original, tan solo didáctica. Una situación de interés particular, en la enseñanza de la química y de la física molecular, corresponde a sistemas en los cuales la indistinguibilidad de los enlaces químicos, puede ser racionalizada en función de orbitales híbridos, analizándose la variación de la dependencia angular de estos híbridos (del tipo  $sp^3$ ) con el tiempo, con referencia a un sistema del tipo metano ( $CH_4$ ).

Descriptor: Principio de Heisenberg, variaciones de densidades electrónicas con el tiempo, híbridos, enlace químico.

The goal of this article is to introduce a pedagogical approach to the uncertainty relations between dynamic variables associated with non commuting hermitian operators acting in a Hilbert space. We study the boundary conditions for which these relations hold and the difficulties and inconsistencies derived from the coordinate transformation for the operators from Cartesian to spherical coordinates are examined in detail. The derivations are often based upon the position-momentum commutator and therefore, the analogy corresponding to the pair time-energy would seem to require an operator nature for time, which is not true in quantum mechanics. In principle, we could expect this issue to arise in relativistic theories, due to the known fact that both transform among themselves from one observer to the other and moreover in, the theory of relativity strongly suggests quantum field theory, where the operator associated with the position does not exist as such. From this point of view, the uncertainty relations between position and momentum adopt a form more alike to the time- energy pair, without invoking operators. The method is not original, though it seems to be didactic. A situation of particular importance in connection with the teaching of both chemistry and molecular physics is referred to systems there are non distinguishable bonds giving rise to hybrid orbitals. In this current article, we study the dynamic variation of the angular dependence of these orbitals along time for  $sp^3$  mixed central metal orbitals, with reference to methane ( $CH_4$ ).

Keywords: Heisenberg Principle, variation of charge densities along time, hybrid orbitals, chemical bonding.

PACS: 01.40.Gm; 01.40.Fk; 03.64.Ta

## 1. Introducción

La formulación original del Principio de Incertidumbre de Heisenberg, en términos de la interacción entre el dispositivo de medición y el sistema a observar [1], está plasmada en la siguiente desigualdad:

$$(\Delta x)(\Delta p_x) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (1)$$

la cual fue, posteriormente generalizada por Robertson [2], empleando para estos efectos la formulación axiomática de la Mecánica Cuántica y las propiedades de los operadores hermíticos en el espacio de Hilbert. Al respecto, sean  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  y  $\hat{C}$ , operadores hermíticos que satisfacen la relación de conmutación:

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hbar\hat{C} \quad (2)$$

con la cual es válida la desigualdad que se indica a continuación:

$$(\Delta a)^2 (\Delta b)^2 \geq \left| \frac{\langle C \rangle^2}{2} \right| \quad (3)$$

donde  $a$  y  $b$ , representan las variables dinámicas asociadas a los operadores  $\hat{A}$  y  $\hat{B}$ , respectivamente. En esta notación,  $(\Delta a)^2$  y  $(\Delta b)^2$  se refieren a las variancias de los valores correspondientes a los observables, es decir:  $(\Delta a)^2 = \langle a^2 \rangle - \langle a \rangle^2$  y  $(\Delta b)^2 = \langle b^2 \rangle - \langle b \rangle^2$ . De igual forma,  $\langle C \rangle = \langle \Psi | \hat{C} | \Psi \rangle$ , corresponde al valor medio de la variable dinámica  $c$ , en el estado representado por la función de ondas  $\Psi$ . La derivación de la ecuación (3), a partir de (2), puede ser encontrada en una variedad de textos de amplio uso en cursos introductorios [3,4,5].

La validez de la desigualdad representada por la ecuación (3), está restringida al carácter hermítico de los operadores  $\hat{A}$ ,  $\hat{B}$  y  $\hat{C}$ . Los operadores escalares multiplicativos, como las coordenadas y las constantes, son hermíticos y pueden ser considerados como múltiplos del operador identidad, sí se desea mantener la coherencia del formalismo. Las condiciones señaladas pueden ser resumidas en el conjunto de identidades que se indica a continuación:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_i | \hat{0} | \Psi_j \rangle &= \langle \hat{0}^\dagger \Psi_i | \Psi_j \rangle = \langle \Psi_j | \hat{0}^\dagger \Psi_i \rangle \\ \langle \Psi_i | \hat{A}\hat{B} | \Psi_j \rangle &= \langle \hat{A}^\dagger \Psi_i | \hat{B}\Psi_j \rangle = \langle \hat{B}\Psi_j | \hat{A}^\dagger \Psi_i \rangle^* \end{aligned} \quad (4)$$

El asterisco indica conjugación. La carencia de acuciosidad en el examen de las condiciones de validez de las relaciones de incertidumbre, puede conducir a la construcción de relaciones intrínsecamente incorrectas o de discutible sentido físico. El objetivo central de este artículo, consiste en el análisis de algunas situaciones delicadas, relacionadas con el Principio de Incertidumbre, sobre todo las que ocurren al expresar los operadores en coordenadas no Cartesianas, o al intentar asociar a la variable tiempo con un operador hermítico. De igual forma, resulta didáctico ilustrar algunas aplicaciones en los típicos sistemas simples, utilizados ampliamente en la literatura con referencia a las soluciones de la ecuación de ondas. Un enfoque reflejado en una nota didáctica, para el par tiempo-energía, fue realizado por Giribet, el cual es ilustrativo no obstante, con un enfoque más restringido y limitado en sus aplicaciones [1]

## 2. Operadores mecanocuánticos

El operador correspondiente a la variable dinámica de posición es el correspondiente a la coordenadas  $(r, \theta, \phi)$ , etc. De igual forma, el operador asociado a la posición es de origen y naturaleza hermítico, por

cuanto su acción es esencialmente multiplicativa. En esta línea de argumentación, el operador de energía potencial,  $V(r)$ , posee la misma característica.

Al momentum  $\vec{p}$ , le corresponde el operador gradiente:

$$\vec{p} \rightarrow -i\hbar \vec{\nabla} \quad (5)$$

Cada una de las componentes cartesianas del momentum lineal, es decir:  $\vec{p}_q \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial q}$  ( $q = x, y, z$ ) es un operador hermítico en el espacio funcional  $f(q)$ , del espacio de Hilbert. En coordenadas generalizadas, los operadores de las componentes del momentum no son necesariamente hermíticas y su construcción conlleva cierta ambivalencia en la expresión final [6,7,8], punto que es deseable discutir en cierto detalle. Si expresamos como  $p_k$ , las componentes del momentum, referidas a las coordenadas cartesianas  $q_k$  y como  $P_k$  las correspondientes en un sistema de coordenadas generalizadas  $Q_k$ , entonces la transformación entre estos sistemas de coordenadas, es expresable de la forma que se indica a continuación:

$$P_k = \sum_j \frac{\partial q_j}{\partial Q_k} p_j \quad , \quad (j, k = 1, 2, 3) \quad (6)$$

ó de igual forma:

$$P_k^\dagger = \sum_j p_j \frac{\partial q_j}{\partial Q_k} \quad , \quad (j, k = 1, 2, 3) \quad (7)$$

Desde un punto de vista de la mecánica clásica, las expresiones (6) y (7) son idénticas, dado el caracter conmutativo entre los operadores  $p_j$  y  $\frac{\partial q_j}{\partial Q_k}$ . Lo señalado, no obstante, no es válido en mecánica cuántica, por cuanto  $p_j$  es un operador diferencial. De esta forma, las ecuaciones anteriores dan origen a dos operadores distintos, al sustituir  $p_j \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_j}$ . A partir de la identidad (6)

$$P_k = -i\hbar \sum_j \frac{\partial q_j}{\partial Q_k} \frac{\partial}{\partial q_j} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial Q_k} \quad (8)$$

y, a partir de la ecuación (7), obtenemos para el adjunto de  $P_k$ , la expresión que se indica:

$$P_k^\dagger = -i\hbar \sum_j \frac{\partial}{\partial q_j} \frac{\partial q_j}{\partial Q_k} = -i\hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial Q_k} + \sum_{j,m} \left( \frac{\partial^2 q_j}{\partial Q_k \partial Q_m} \right) \left( \frac{\partial Q_m}{\partial q_j} \right) \right\} \quad (9)$$

o en forma equivalente, podemos escribir:

$$P_k^\dagger = -i\hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial Q_k} + \frac{1}{J} \left( \frac{\partial J}{\partial Q_k} \right) \right\} \quad (10)$$

En la expresión anterior,  $J$  es el jacobiano correspondiente a la transformación  $\{q_k\} \rightarrow \{Q_k\}$ . A modo de ejemplo, en coordenadas polares esféricas, el jacobiano es:  $J = r^2 \sin\theta$ , con lo cual obtenemos directamente las identidades que se indican a continuación:

$$P_r = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial r} \right) \quad , \quad P_\theta = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \quad , \quad P_\phi = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (11.1)$$

y las componentes correspondientes al operador adjunto son:

$$P_r^\dagger = -i\hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial r} + \frac{2}{r} \right\} \quad , \quad P_\theta^\dagger = -i\hbar \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot\theta \right\} \quad , \quad P_\phi^\dagger = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \quad (11.2)$$

Por simple inspección de las identidades anteriores, concluimos que solo en el caso de una de las componentes, se cumple:  $P_\phi = P_\phi^\dagger$ , con lo cual solo la componente a lo largo de la coordenada  $\phi$ , es posible considerarla como asociada a un operador hermítico y no así las restantes. En este punto, es conveniente

recordar que en una base dada del espacio funcional, las variables dinámicas están asociadas solo a operadores hermíticos, lo cual establece restricciones de envergadura. No obstante, lo señalado anteriormente, el producto escalar, digamos  $P_q^\dagger P_q$  es siempre hermítico y corresponde al observable físico, representado por el operador  $P_q^2$  en la base funcional considerada para estos efectos.

Es directo encontrar las identidades que se indican a continuación:

$$P_r^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right\} \quad (12.1)$$

$$P_\theta^2 = -\hbar^2 \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \cot \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right\} \quad (12.2)$$

$$P_\phi^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \quad (12.3)$$

Es interesante, escribir para una partícula, digamos de masa  $m$  y velocidad  $\vec{v}$ , una expresión compacta para el operador de energía cinética  $T$ , de la forma que se indica:

$$T = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} \sum_{j,k} P_j^\dagger g^{jk} P_k \quad (13)$$

donde  $T = T^\dagger$ . En coordenadas polares esféricas, el operador de energía cinética (recordando que las componentes no nulas del tensor, geométrico son:  $g^{11} = 1, g^{22} = \frac{1}{r^2}$  y  $g^{33} = \frac{1}{r^2 \text{sen}^2 \theta}$ ), adopta la forma que se indica:

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + \frac{\cos \theta}{r^2 \text{sen} \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \text{sen}^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad (14)$$

identidad, compatible con la forma del operador de momentum  $\vec{p}$ , ver ec. (5).

De igual forma, en mecánica clásica, el operador de momentum angular orbital corresponde al producto cruz  $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$  y por lo tanto, empleando el Principio de Correspondencia podemos escribir:  $\hat{l} = -i\hbar (\vec{r} \times \vec{\nabla})$ . De esta forma, las componentes de este operador pueden ser escritas en términos de sus componentes cartesianas, como se indica a continuación:

$$\hat{l}_k = -i\hbar \left\{ q_l \frac{\partial}{\partial q_m} - q_m \frac{\partial}{\partial q_l} \right\}, \text{ donde } : k, l, m (= x, y, z). \quad (15)$$

De la identidad anterior, tenemos expresiones del tipo:  $\hat{l}_x = -i\hbar \left\{ y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right\}$ , empleándose para los sub-índices  $k, l, m$ , permutaciones cíclicas de los índices  $k \rightarrow l \rightarrow m \rightarrow k$  ( $x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x$ ). Las identidades de la ec. (15) pueden ser escritas, en el sistema de coordenadas  $(r, \theta, \phi)$ , de acuerdo a las identidades:  $\hat{l}_x = i\hbar \left\{ \text{sen} \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right\}$ ,  $\hat{l}_y = \left\{ -\cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} + \cot \theta \text{sen} \phi \frac{\partial}{\partial \phi} \right\}$  y  $\hat{l}_z = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial \phi} \right)$ . Es directo, inferir de las identidades anteriores, la validez de la identidad:  $P_\phi = P_\phi^\dagger = \hat{l}_z$ . De igual forma, obtenemos el conjunto de identidades que se indican a continuación:

$$\hat{l}_r = 0, \quad \hat{l}_\theta = \hat{P}_\theta, \quad \hat{l}_\theta^\dagger = \hat{P}_\theta^\dagger \quad (16.1)$$

de igual forma, también podemos escribir:

$$\hat{l}_\phi = \frac{1}{\text{sen}^2 \theta}, \quad \hat{P}_\phi = \frac{1}{\text{sen}^2 \theta}, \quad \hat{P}_\phi^\dagger = \hat{l}_\phi^\dagger \quad (16.2)$$

### 3. Relaciones de incertidumbre

Las relaciones de no conmutatividad entre los operadores de posición y de momentum lineal conjugado y entre las componentes del momentum angular orbital, proporcionan un conjunto de relaciones de

incertidumbre de interés, ver Tabla 1. En coordenadas polares esféricas no obstante, se satisfacen relaciones de conmutación análogas a las indicadas en esta Tabla 1, no resulta posible derivar productos de incertezas a partir de las relaciones, indicadas en las ecs (2) y (3), dado el carácter no hermítico de los operadores  $\widehat{P}_r$ ,  $\widehat{P}_\phi$  y sus operadores adjuntos  $\widehat{P}_r^\dagger$  y  $\widehat{P}_\phi^\dagger$ . En el caso particular de la coordenada  $\phi$ , para la cual no se presenta la dificultad señalada, se encuentra el conmutador  $[\phi, \vec{p}_\phi] = i\hbar$ , lo cual al invocar la ec. (3) nos entrega la desigualdad:  $(\Delta\phi)(\Delta P_\phi) \geq \frac{\hbar}{2}$ . De acuerdo a esta expresión, si el sistema está descrito por, digamos una función propia del operador  $\widehat{P}_\phi$ , como podría ser el conjunto de funciones del tipo  $\exp(i\phi)$  ó en general, las armónicas esféricas  $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ , entonces resulta directo demostrar  $(\Delta P_\phi) = 0$ , de lo cual se deduce que la variancia asociada a  $\Delta\phi$  tendería, en el límite a un valor infinitamente grande. Esta conclusión no tiene sentido, por cuanto resulta imposible aceptar un valor de  $(\Delta\phi)$  superior a  $2\pi$ . De igual forma, para las armónicas esféricas

$$Y_{l,m}(\theta, \phi), \text{ resulta inmediato obtener la relación: } (\Delta\phi)^2 = \langle\phi^2\rangle - \langle\phi\rangle^2 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \phi^2 d\phi - \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_0^{2\pi} \phi d\phi \right\}^2 = \frac{\pi^2}{3},$$

de modo que el valor máximo de  $(\Delta\phi)$  es  $\frac{\pi}{\sqrt{3}}$ . El problema radica en que si bien es cierto que el operador  $\widehat{P}_\phi$  (en forma análoga, el operador  $\widehat{l}_z$ ) es hermítico en la base de las funciones correspondientes a las armónicas esféricas, no goza de esta propiedad frente a la función producto  $\phi Y_{l,m}(\theta, \phi)$  [9], por lo tanto no se satisfacen las exigencias matemáticas referidas en el conjunto de propiedades referidas en las ecs (4). De esta forma, la expresión correcta para el Principio de Incertidumbre entre  $\phi$  y  $\widehat{l}_z$  debe asegurar para la variancia en  $\phi$ , un valor del tipo:  $(\Delta\phi) = \frac{\pi}{\sqrt{3}}$ , cuando  $(\Delta l_z) \rightarrow 0$ . No obstante, lo señalado anteriormente, un análisis riguroso nos permite escribir una relación de incertidumbre de la forma que se indica:

$$\frac{(\Delta\phi)(\Delta l_z)}{1 - 3 \left\{ \frac{(\Delta\phi)^2}{\pi^2} \right\}} \geq \frac{\hbar}{2} \quad (17)$$

derivada, originalmente por Bouten y colaboradores [10]. La desigualdad anterior, garantiza la incerteza máxima equivalente a  $\frac{\pi}{\sqrt{3}}$  para  $(\Delta\phi)$ .

Tabla 1

Conmutador	Producto de incerteza
$[x, p_x] = i\hbar$	$(\Delta x)(\Delta p_x) \geq \frac{\hbar}{2}$
$[L_x, L_y] = i\hbar L_z$	$(\Delta L_x)(\Delta L_y) \geq \frac{\hbar}{2}  L_z $
$[x^2, p_x] = 2i\hbar x$	$(\Delta x^2)(\Delta p_x) \geq \hbar  x $
$[x, p_x^2] = 2i\hbar p_x$	$(\Delta x)(\Delta p_x^2) \geq \hbar  p_x $
$[x, L_z] = -i\hbar y$	$(\Delta x)(\Delta L_z) \geq \frac{\hbar}{2}  y $
$[p_x, L_z] = -i\hbar p_y$	$(\Delta p_x)(\Delta L_z) \geq \frac{\hbar}{2}  p_y $

siendo las relaciones de incertidumbre, consecuencia directa de la formulación axiomática de la Mecánica Cuántica, las cuales deben cumplirse para cada uno de los sistemas monocorpusculares frecuentemente empleados en la enseñanza introductoria de la mecánica de objetos pequeños en sentido absoluto [11]. A continuación, ilustraremos lo relacionado con el Principio de Incertidumbre en el caso de sistemas simples de interés didáctico.

- A) Partícula en una caja monodimensional de longitud  $L$  en ausencia de energía potencial en el intervalo de la variable  $0 \leq x \leq L$  y con un potencial infinitamente grande fuera de la caja, es decir, simultáneamente en los intervalos  $(-\infty < x < 0)$  y  $(L < x < \infty)$ . En este caso, las funciones propias y valores propios de la ecuación de ondas  $\left\{ \left( \frac{-\hbar^2}{2m} \right) \nabla^2 \right\} \Psi(x) = E\Psi(x)$  son:  $\left\{ \Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{sen} \left( \frac{n\pi x}{L} \right) \right\}$  y  $\left\{ E_n = n^2 \left( \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \right) \right\}$ , respectivamente. En estos casos, los valores medios son:  $\langle x \rangle = \frac{L}{2}$ ,  $\langle x^2 \rangle = \left( \frac{2n^2 \pi^2 - 1}{6n^2 \pi^2} \right) L^2$ ,  $\langle p_x \rangle = 0$ ,  $\langle p_x^2 \rangle = \left( \frac{n\pi\hbar}{L} \right)^2$ , lo cual nos conduce directamente a la identidad:  $(\Delta x)^2 (\Delta p_x)^2 = \frac{(n^2 \pi^2 - 6)\hbar^2}{12}$ . Para los valores permitidos de  $n = 1, 2, 3, \dots, \infty$ , el producto de las variancias es siempre mayor que  $\frac{\hbar^2}{4}$ , satisfaciéndose el Principio de Incertidumbre.

B) Oscilador armónico simple:

En este caso, para un potencial periódico de la forma  $V = \frac{1}{2}kx^2$  en el intervalo  $-\infty < x < \infty$ , se encuentran soluciones generales:

$\left\{ \Psi_n(\xi) = \left(\frac{b}{\pi}\right)^{1/4} \left(\frac{1}{2^n n!}\right) H_n(\xi) \exp\left[-\frac{\xi^2}{2}\right] \right\}$  y  $\{E_n = (n + \frac{1}{2})h\nu\}$ . En estas conocidas expresiones,  $H_n(\xi)$  corresponde a los polinomios de Hermite de orden  $n$  ( $n = 0, 1, 2, \dots, \infty$ ), en la variable  $\xi = \sqrt{b}x$  ( $b = \frac{4\pi^2 m\nu}{h} > 0$ ). En esta situación, es directo encontrar el producto de las variancias correspondientes a la posición y a la componente en esta coordenada del momentum lineal de la partícula. De esta forma, podemos escribir:  $(\Delta x)^2 (\Delta p_x)^2 = (n + \frac{1}{2})^2 \hbar^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$

C) Rotor rígido:

En este caso, las soluciones propias de la ecuación de ondas de Schrödinger, son de la forma:  $\{Y_{l,m}(\theta, \phi)\}$  y  $\left\{E_l = l(l+1) \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m R_0^2}\right\}$ . La situación correspondiente al par  $(\phi, \hat{l}_z)$ , fue examinada anteriormente, ver ec. (17). Para el par de componentes del momentum angular orbital  $\{\hat{l}_x, \hat{l}_y\}$ , en estados descritos por la base funcional correspondiente a las armónicas esféricas, es directo obtener una relación de la forma:  $(\Delta l_x)(\Delta l_y) = \frac{1}{2} [l(l+1) - m^2] \hbar^2$ . Este producto es siempre mayor o a lo sumo igual, cuando  $l = |m|$  a la cantidad  $\frac{\hbar}{2} \langle \hat{l}_z \rangle = \frac{1}{2} m \hbar^2$ , lo cual es compatible con la exigencia del Principio de Incertidumbre (ver, Tabla 1). Procedamos a continuación a examinar la relación  $(\Delta \theta)(\Delta p_\theta) \geq \frac{\hbar}{2}$ .

Sea, por ejemplo, un estado descrito por la función  $Y_{1,0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$ . Es inmediato, encontrar los valores medios que se indican:  $\langle \theta \rangle = \frac{\pi}{2}$  y  $\langle \theta^2 \rangle = \frac{\pi^2}{2} - \frac{14}{9}$ . Considerando la simetría esférica del problema, en estudio, podemos suponer que se satisface  $\langle \hat{p}_\theta \rangle = 0$  y el valor medio de  $\hat{p}_\theta^2 = 2\hbar^2$ , de modo que:  $(\Delta \theta)^2 (\Delta p_\theta)^2 = \left(\frac{9\pi^2 - 56}{18}\right) \hbar^2 > \frac{\hbar^2}{4}$ .

D) Átomo de Hidrógeno:

En este ejemplo, resulta interesante el considerar las propiedades radiales, por cuanto la componente angular de las funciones de ondas corresponden a las armónicas esféricas, tema analizado a propósito del rotor rígido, ver (C). A modo de ejemplo, consideremos el estado fundamental:  $R_{1s}(r) = \left(\frac{2}{a_0}\right) \exp\left[-\frac{r}{a_0}\right]$ , con lo cual obtenemos los valores medios que se indican:  $\langle r \rangle = \frac{3}{2}a_0$ ,  $\langle r^2 \rangle = 3a_0^2$ , con  $(\Delta r) = \frac{\sqrt{3}}{2}a_0$  (observar que la incerteza es del orden de un 58% del valor medio de la variable radial  $r$ ). En consideración con la simetría del problema, supondremos que se satisface  $\langle \Delta p_r \rangle = 0$ . A partir del operador  $\hat{p}_r^2$ , encontramos la identidad:  $\langle p_r^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{a_0^2}$ , con lo cual es directo encontrar la identidad:  $(\Delta p_r)^2 = \frac{\hbar^2}{a_0^2}$ , en consecuencia obtenemos:  $(\Delta r)(\Delta p_r) = \frac{\sqrt{3}}{2}\hbar > \frac{\hbar}{2}$

## 4. Versión pedagógica de la incerteza energía-tiempo

Es un hecho conocido en física que el Principio de Heisenberg, relacionada la dispersión de posición y momentum. Las derivaciones están, como lo hemos señalado en las secciones anteriores de esta ponencia, en el conmutador de posición y momentum. La analogía para energía y tiempo pareciera considerar el tiempo como operador lo que no ocurre en Mecánica Cuántica. De hecho tal cosa, se esperaría para teorías relativistas, dado que tiempo y posición se transforman entre sí de un observador a otro. No obstante, lo señalado anteriormente, la relatividad obliga a considerar teorías cuánticas de campos, donde el operador posición no tiene lugar. Las relaciones de incerteza posición-momentum cobran semejanza a las de energía-tiempo y por razones parecidas. Es precisamente por estas dos razones que proporcionaremos en este escrito una derivación independiente de operadores. La derivación no pretende ser original, tan solo didáctica.

Para estos efectos, considere un hamiltoniano simplificado a dos niveles de energías  $E_0$  y  $E_1$ . Esto se hace para clarificar y simplificar la notación solamente. Los estados propios correspondientes son  $|E_0\rangle$  y

$|E_1\rangle$ . La evolución temporal de un estado cualquiera  $|t=0\rangle = c_0|E_0\rangle + c_1|E_1\rangle$  es:  $|t\rangle = c_0 \exp\left[-\frac{E_0 t}{\hbar}\right]|E_0\rangle + c_1 \exp\left[-\frac{E_1 t}{\hbar}\right]|E_1\rangle$

A fin de medir la energía es necesario perturbar el sistema. Esto lo podemos modelar con un potencial  $V(t)$ , necesariamente dependiente del tiempo y que se anula tanto en menos como en más infinito. Se trata ahora de evolucionar el sistema con un hamiltoniano del tipo:  $H_0 + V(t)$ . En ausencia de la perturbación  $V(t)$ , las constantes  $c_0$  y  $c_1$  resultan ser independientes del tiempo, de modo que la perturbación los hace evolucionar de la forma que se indica:

$$i\hbar \frac{dc_0}{dt} = c_0 V_{0,0} + c_1 V_{0,1} \exp\left[-\frac{E_0 t}{\hbar}\right] \quad (18.1)$$

$$i\hbar \frac{dc_1}{dt} = c_1 V_{1,1} + c_0 \exp\left[\frac{(E_0 - E_1)t}{\hbar}\right] V_{1,0} \exp\left[-\frac{E_0 t}{\hbar}\right] \quad (18.2)$$

donde  $V_{1,0} = \langle E_1|V(t)|E_0\rangle$  y los restantes elementos matriciales se definen en forma semejante. Estas ecuaciones son exactas y se obtienen por simple sustitución y proyección en  $|E_0\rangle$  y  $|E_1\rangle$ . Si partimos desde el estado fundamental  $|E_0\rangle$  en  $t=0$ , obtenemos  $c_0 = 1$  y  $c_1 = 0$ , con lo cual la solución aproximada para  $c_1$  es:

$$i\hbar \frac{dc_1}{dt} \approx V_{1,0}(t) \exp\left[\frac{i(E_1 - E_0)t}{\hbar}\right] \Rightarrow c_1(t \rightarrow \infty) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} V_{1,0}(t) \exp\left[\frac{i(E_1 - E_0)t}{\hbar}\right] dt \quad (18.3)$$

lo cual nos entrega la amplitud de la probabilidad de transición desde el estado fundamental (basal) al primer estado excitado. De igual forma, este resultado nos indica que esta amplitud no es más que la transformada de Fourier del potencial de perturbación. Exactamente, la misma relación se cumple entre la amplitud de momentum y de posición, lo que nos sugiere que:  $(\Delta E)(\Delta t) \geq \frac{\hbar}{2}$ , dado que  $(\Delta x)(\Delta p_x) \geq \frac{\hbar}{2}$ . Con del propósito de simplificar la deducción de esta relación recíproca entre las transformadas de Fourier, lo cual en los textos se realiza normalmente empleando operadores, procederemos a considerar la transformada:

$$c(w) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} V(t) \exp[iwt] dt \quad (19)$$

Desde un punto de vista intuitivo, la condición para que  $c(w)$  se anule, prácticamente en todo el rango de la variable  $w$ , es preciso suponer una familia infinita de exponenciales oscilantes, con unas pocas de éstas obtendremos los  $c(w)$  oscilando hasta el infinito. Lo mismo ocurre con la transformada inversa, si tenemos un  $V(t)$  concentrado obtenemos un  $c(w)$  distribuido. Si deseamos un argumento formal es totalmente necesario definir con exactitud que se entiende por “concentrado” y “distribuido”.

Para estos efectos, procederemos a definir los promedios:

$$\langle t^2 \rangle = \frac{\int t^2 |V(t)|^2 dt}{\int |V(t)|^2 dt} \quad (20.1)$$

$$\langle w^2 \rangle = \frac{\int w^2 |c(w)|^2 dt}{\int |c(w)|^2 dt} \quad (20.2)$$

con los pesos  $|V(t)|^2$  y  $|c(w)|^2$ . Resulta interesante que sea posible demostrar rigurosamente que el producto de estos promedios es necesariamente mayor que una constante determinada. Se define para  $\lambda$  arbitrario:

$$u(t) = tV(t) + \lambda \frac{dV(t)}{dt} \quad (21)$$

y se procede a calcular:

$$\begin{aligned} \int u u^* dt &= \int \left\{ t^2 |V|^2 + \lambda^2 \left| \frac{dV}{dt} \right|^2 + \lambda t \left[ V \frac{dV^*}{dt} + V^* \frac{dV}{dt} \right] \right\} dt = \int \left\{ t^2 |V|^2 + \lambda^2 \left| \frac{dV}{dt} \right|^2 + \lambda t \frac{d(VV^*)}{dt} \right\} dt \\ &= \int \left\{ t^2 |V|^2 + \lambda^2 \left| \frac{dV}{dt} \right|^2 - \lambda V V^* \right\} dt = \left\{ \frac{\int t^2 |V|^2 dt}{\int |V|^2 dt} + \lambda^2 \frac{\int \left| \frac{dV}{dt} \right|^2 dt}{\int |V|^2 dt} - \lambda \right\} \int |V|^2 dt \end{aligned}$$

En la expresión anterior, se realizó una integración por partes. Claramente, estamos igualando cantidades positivas, el polinomio cuadrático en  $\lambda$  es positivo para todo  $\lambda$  y esto implica que su mínimo debe ser positivo, lo que también implica que se satisfaga la desigualdad:

$$\frac{\int t^2 |V|^2 dt}{\int |V|^2 dt} \frac{\int \left| \frac{dV}{dt} \right|^2 dt}{\int |V|^2 dt} \geq \frac{1}{4} \quad (22)$$

Tenemos, una identidad para todo  $V(t)$ . Con la definición dada para la trasformada de Fourier, obtenemos la identidad de Parseval [12]:  $\int |V(t)|^2 dt = \int |c(w)|^2 dw$  y junto con la transformada de  $\frac{dV(t)}{dt}$  que es  $-iwc(w)$ , obtenemos:  $\langle t^2 \rangle \langle w^2 \rangle \geq \frac{1}{4} \rightarrow (\Delta t) (\Delta w) \geq \frac{1}{2}$  obteniendo finalmente, la relación de incerteza buscada. Exactamente pasa lo mismo con el momentum-posición. La desigualdad se da solo cuando  $u = 0$ , lo que arroja una ecuación diferencial con una gaussiana de solución.

## 5. Comentarios adicionales

La relación  $(\Delta E) (\Delta t) \geq \frac{\hbar}{2}$ , fue originalmente propuesta por Bohr y es corrientemente utilizada en la interpretación del decaimiento radiactivo y en el estudio de los anchos de líneas espectrales (en estas situaciones  $(\Delta t)$  se interpreta no como una desviación estándar corriente sino que más bien como asociada a la vida media de los estados caracterizados por funciones soluciones de la ecuación de ondas de Schrödinger. También es posible encontrar en discusiones bibliográficas que la inclusión del tiempo en las relaciones de incertidumbre, puede ser realizada incorporando una propiedad, digamos  $A$  del sistema la cual no dependa en forma explícita del tiempo, no obstante, su valor medio sí variará con el tiempo [13,14], de esta forma escribimos el conmutador:

$$[\hat{H}, \hat{A}] = i\hbar \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \quad (23)$$

de donde, podemos escribir:

$$(\Delta E) (\Delta t) \geq \frac{\hbar}{2} \left| \frac{\partial \langle \hat{A} \rangle}{\partial t} \right| \quad (24)$$

expresión general, para el Principio de Incertidumbre energía-tiempo [15].

Para efectos ilustrativos y de completitud, considere un estado permitido, el cual dependa paramétricamente de las coordenadas de posición y del tiempo.

$$\Psi(q, t) = \Phi(q) \exp \left[ -\frac{iEt}{\hbar} \right] \quad (25)$$

Es directo, indicar que los valores medios para estados como los descritos anteriormente, ver ec. (25), son tales que se satisface:  $\langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \langle \Phi | \hat{A} | \Phi \rangle$ . Una situación interesante y de mayor generalidad, ocurre para el caso de estados mezclas (híbridos) del tipo que se indica a continuación:

$$\Psi = \sum_k c_k \Psi_k = \sum_k c_k \Phi_k \exp \left[ -\frac{iE_k t}{\hbar} \right] \quad (26)$$

supondremos, sin que esto signifique pérdida de generalidad, que los coeficientes de mezcla  $c_k$  son escalares y de igual forma que estamos en presencia de una situación de estados permitidos sin degeneración orbital. Bajo estas circunstancias, el valor medio de  $\hat{A}$ , resulta ser función del tiempo. Escribamos la identidad, tal cual como se indica a continuación:

$$\langle \hat{A} \rangle = \sum_k c_k^2 \langle \hat{A} \rangle_{kk} + 2 \sum_{k < l} c_k c_l \langle \hat{A} \rangle_{k,l} \cos(D)t, \text{ donde : } D = \frac{(E_k - E_l)}{\hbar} \quad (27)$$

y por lo tanto, es directo escribir la identidad:



$$\frac{\partial \langle \hat{A} \rangle}{\partial t} = -2D \sum_{k < l} c_k c_l \langle \hat{A} \rangle_{k,l} \text{sen}(D) t \quad (28)$$

con lo cual obtenemos la expresión:

$$(\Delta E)(\Delta t) = \sum_{k < l} (E_k - E_l) c_k c_l \langle \hat{A} \rangle_{k,l} \text{sen}(D) t \quad (29)$$

Supongamos a modo de ejemplo, un estado permitido del oscilador armónico simple caracterizado por la función:  $\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \Psi_0 \exp[-\frac{iE_0 t}{\hbar}] + \Psi_1 \exp[-\frac{iE_1 t}{\hbar}] \}$ , donde los estados componentes del estado mezcla son:  $\Psi_0 = (\frac{b}{4\pi})^{1/4} \exp[-\frac{\xi^2}{2}]$  y  $\Psi_1 = \sqrt{2} (\frac{b}{\pi})^{1/4} \xi \exp[-\frac{\xi^2}{2}]$  con los valores propios  $E_0 = \frac{1}{2} h\nu$  y  $E_1 = \frac{3}{2} h\nu$ , respectivamente. Si la variable  $A$ , corresponde a la coordenada cartesiana  $x$ , obtenemos:  $\langle x \rangle_0 = \langle x \rangle_1 = 0$ ,  $\langle x^2 \rangle_0 = \frac{1}{2b}$ ,  $\langle x^2 \rangle_1 = \frac{3}{2b}$ ,  $\langle x \rangle_{0,1} = \frac{1}{\sqrt{2b}}$ ,  $\langle x^2 \rangle_{0,1} = 0$ . De estos resultados, obtenemos las identidades:  $\langle x \rangle = \frac{\cos 2\pi x}{\sqrt{2b}}$  y  $\langle x^2 \rangle = \frac{1}{b}$ , con lo cual:  $(\Delta x)^2 = \frac{2 - \cos^2 2\pi x}{2b}$ . De igual forma,  $\langle E \rangle = h\nu$  y  $\langle E^2 \rangle = \frac{5}{4} (h\nu)^2$ , con lo cual:  $(\Delta E)^2 = \frac{1}{4} (h\nu)^2$ . Estos resultados parciales nos conducen a escribir la identidad:

$$(\Delta E)^2 (\Delta x)^2 = \frac{h^2 \nu^2 (8 - \cos^2 2\pi x)}{8b} \quad (30)$$

De igual forma y en conformidad con la ec. (29), debería cumplirse:

$$(\Delta E)^2 (\Delta x)^2 \geq \frac{h^2 \nu^2 \text{sen}^2 2\pi x}{8b} \quad (31)$$

La figura 1 presenta la distribución de la densidad de probabilidad ( $\Psi^* \Psi$ ) para diferentes valores de  $t$ , con intervalos de  $\frac{1}{8} \nu^{-1}$ . Al observar las ecs (30) y (31), constatamos que la cantidad  $(8 - \cos^2 2\pi x) > \text{sen}^2 2\pi x$ , con lo cual se satisface la relación de incertidumbre. En cada instante:  $t = \frac{n}{2\nu}$  ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ),  $\langle x \rangle = \frac{0,353}{\sqrt{b}}$  y la incerteza en la posición alcanza el valor mínimo  $\frac{0,953}{\sqrt{b}}$ ; en los instantes en que  $t = \frac{n}{4\nu}$ , el valor medio de  $x$  es cero y también el valor máximo de  $(\Delta x)$  es  $\frac{1}{\sqrt{b}}$ . Hemos incluido, las Figuras 2 y 3 de modo de ilustrar la variación del valor medio de la posición con el tiempo y la variación de la incerteza en la posición con el tiempo, respectivamente.

Una situación parecida a la anterior, de uso corriente en química se observa en los casos de estados atómicos descritos por orbitales mezclas (orbitales híbridos). En un enfoque localizado, el sistema  $\sigma$  de metano ( $CH_4$ ), se interpreta en función de un total de cuatro híbridos del tipo  $sp^3$ . De esta forma, el híbrido orientado a lo largo del eje de cuantización  $z$ , se expresa de acuerdo a la identidad:

$$\Psi = \frac{1}{2} \Psi_{2s} + \frac{\sqrt{3}}{2} \Psi_{2p_z} = \frac{1}{2} \phi_{2s} \exp\left[-\frac{iE_{2s} t}{\hbar}\right] + \frac{\sqrt{3}}{2} \Phi_{2p_z} \exp\left[-\frac{iE_{2p} t}{\hbar}\right] \quad (32)$$

Para el átomo central, Carbono, la diferencia energética:  $(E_{2p} - E_{2s}) \approx 70,800 \text{ cm}^{-1}$  [16]. Expresando las funciones  $\Phi_{2s}$  y  $\Phi_{2p}$ , en la representación radial simple, propuesta por Slater [17], obtenemos los siguientes resultados parciales:  $\langle z \rangle_{2s} = \langle z \rangle_{2p} = 0$ ,  $\langle z^2 \rangle_{2s} = \frac{10}{Z_{efec}^2} a_0^2$ ,  $\langle z^2 \rangle_{2p_z} = \frac{16}{Z_{efec}^2} a_0^2$  y  $\langle z \rangle_{2s \rightarrow 2p} = \frac{15\sqrt{3}}{Z_{efec}} a_0$ ,  $\langle z^2 \rangle_{2s \rightarrow 2p} = 0$ . En función de estos resultados, para el orbital híbrido, obtenemos:  $\langle z \rangle = \frac{5a_0}{2Z_{efec}} \cos At$  y  $\langle z^2 \rangle = \frac{16}{Z_{efec}^2} a_0^2$ . En estas expresiones,  $Z_{efec} = Z - S$  es la carga nuclear efectiva y  $A = \frac{E_{2p} - E_{2s}}{\hbar}$ , con lo cual la incerteza a lo largo del eje  $z$ , resulta ser:  $(\Delta z) = \frac{a_0}{2Z_{efec}} \sqrt{64 - 25 \cos^2 At}$ . La incerteza mínima se logra en los instantes  $t = \frac{n\pi}{A}$  con un valor igual a  $\frac{39}{2Z_{efec}} a_0$ , correspondiente a un valor medio de la coordenada  $z$ , en conformidad con el resultado:  $\langle z \rangle = \frac{5a_0}{2Z_{efec}}$  en cada instante  $t = \frac{n\pi}{2A}$  ( $n = 1, 2, 3, \dots$ ), correspondiente al valor medio  $\langle z \rangle = 0$ . Al emplear el valor  $Z_{efec} = 3,25$  [17] y  $A = \frac{70800}{\hbar} = 1,34,10^{16} \text{ seg}^{-1}$ , obtenemos para  $t = \frac{n\pi}{A}$  ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ), los valores:  $\langle z \rangle = 0,77a_0$  y  $(\Delta z) = 0,96a_0$ . Similarmente, para  $t = \frac{n\pi}{2A}$  ( $n = 1, 2, \dots$ ), se llega a los resultados:  $\langle z \rangle = 0$  y  $(\Delta z) = 1,23a_0$ .

De lo señalado anteriormente, podemos instuir que en este modelo de híbridos en un enfoque localizado, la densidad electrónica en el estado mezcla  $sp^3$  no es estacionaria, variando periódicamente de punto en punto, con incertezas que excediendo en alto grado los valores medios calculados para la posición. Por efectos de completitud, en la Figura 4, se grafica la variación de la dependencia angular de los orbitales híbridos  $sp^3$  en función del tiempo.

Resulta directo el constatar que para un átomo libre, la densidad electrónica máxima de un híbrido (orbital mezcla) es fluctuante. Resulta, en consecuencia incorrecto, asociar la formación de un enlace localizado con una imagen física de acercamiento de los ligandos hacia aquellas posiciones de máxima densidad electrónica de los híbridos. Desde la perspectiva del ligando, la nube electrónica del híbrido aparece oscilante y no estática esperando la formación del enlace. Habría que aceptar que, de alguna forma, la proximidad del ligando inhibe las variaciones periódicas de la densidad electrónica, si deseamos el supuesto de un átomo de Carbono, en un estado valencial apropiado como para explicarnos la formación de un total de cuatro híbridos, físicamente indistinguibles y dando origen al esqueleto molecular. En esta situación los cuatro orbitales mezclas del átomo central se enlazan con orbitales atómicos  $1s$  de Hidrógeno, origando cuatro enlaces del tipo  $\sigma$  ( $sp^3 1s$ ).

Una visión alternativa consiste en remplazar la idea de hibridación del átomo central por la de orbitales moleculares deslocalizados del tipo:  $\Psi_{OM} = k_1\Psi_C + k_2\sum_L c_L\Phi_L$ , donde  $\Psi_C$  representa uno de los orbitales de Carbono y la sumatoria  $\sum_L c_L\Phi_L$  corresponde a una combinación lineal adaptada por simetría, compatible con la simetría del orbital del átomo central. También, el enlace localizado del tipo:  $\Phi_{Loc} = c_1(sp^3) + c_2\Phi_L$ , es simplemente una solución particular, del concepto más general de orbital molecular. En la descripción localizada, existen fluctuaciones periódicas de la densidad de cargas electrónica, pero una vez ya formada la molécula. De esta forma, la molécula de metano (grupo puntal molecular  $T_d$ ), podría interpretarse en términos de un modelo de orbitales moleculares como una nube electrónica completamente deslocalizada o bien en términos de un modelo con enlaces localizados, cuya densidad de cargas electrónica varía cíclicamente con el tiempo.

## Agradecimientos:

RA desea expresar su gratitud a la Universidad de Chile por suministrar las facilidades necesarias para el desarrollo de este trabajo. De igual forma, los autores desean expresar su gratitud a la Vicerrectoría Académica de la Universidad Diego Portales quién ha financiado parcialmente este trabajo. Proyecto VRA-10.03.25.008

## Referencias

- [1] W.Heisenberg. Z.Phys,**42**,172(1927), Giribert.G.E. Rev.Méx.Fís. E,**51**,23(2005)
- [2] H.P.Robertson. Phys.Rev, **34**,163(1929)
- [3] E.Merzbacher. Quantum Mechanics. J.Wiley.N.Y, 1961
- [4] Schiff. L.I. Quantum Mechanics. Mc Graw Hill, N.Y, 1949
- [5] Szabo.A.,Ostlund.N.S. Modern Quantum Chemistry. MacMillan Publishing.Co.Inc. London, 1982
- [6] Villaseñor.P., Cisneros.J.Am:j.Phys, **49**,754(1981)
- [7] Gruber.R. Found.Phys, **1**,227(1971)
- [8] De Witt.B.S. Phys.Rev, **85**, 653(1952)
- [9] Roy.C.L., Sannigrahi.A.B. Am.J.Phys, **47**, 965(1979)
- [10] Bouten.M.,Maene.M.,Van Laure.P. Nuevo Cimento, **37**,1119(1965)
- [11] P.A.M.Dirac. Principios de Mecánica Cuántica. Oxford University Press, 1958

- [12] Eic W. Weisstein. "Parseval's Theorem." From MathWorld Awolfram Web Resource. <http://mathword.wolfram.com/PersevalsTheorem.html>
- [13] Bunge.M. Can.J.Phys,**48**,1410(1870)
- [14] De La Peña.L. Am.J.Phys, **48**,775(1980)
- [15] Mandeslstam.L.,Tamm.I. J.Phys (USRR), **9**,249(1945)
- [16] Basch.H.,Viste.A.,Gray.H.B. Theor.Chim.Acta,**3**,458(1965)
- [17] Meruane.T. Ciencia Abierta,**5**(1999). <http://cabierta.uchile.cl>

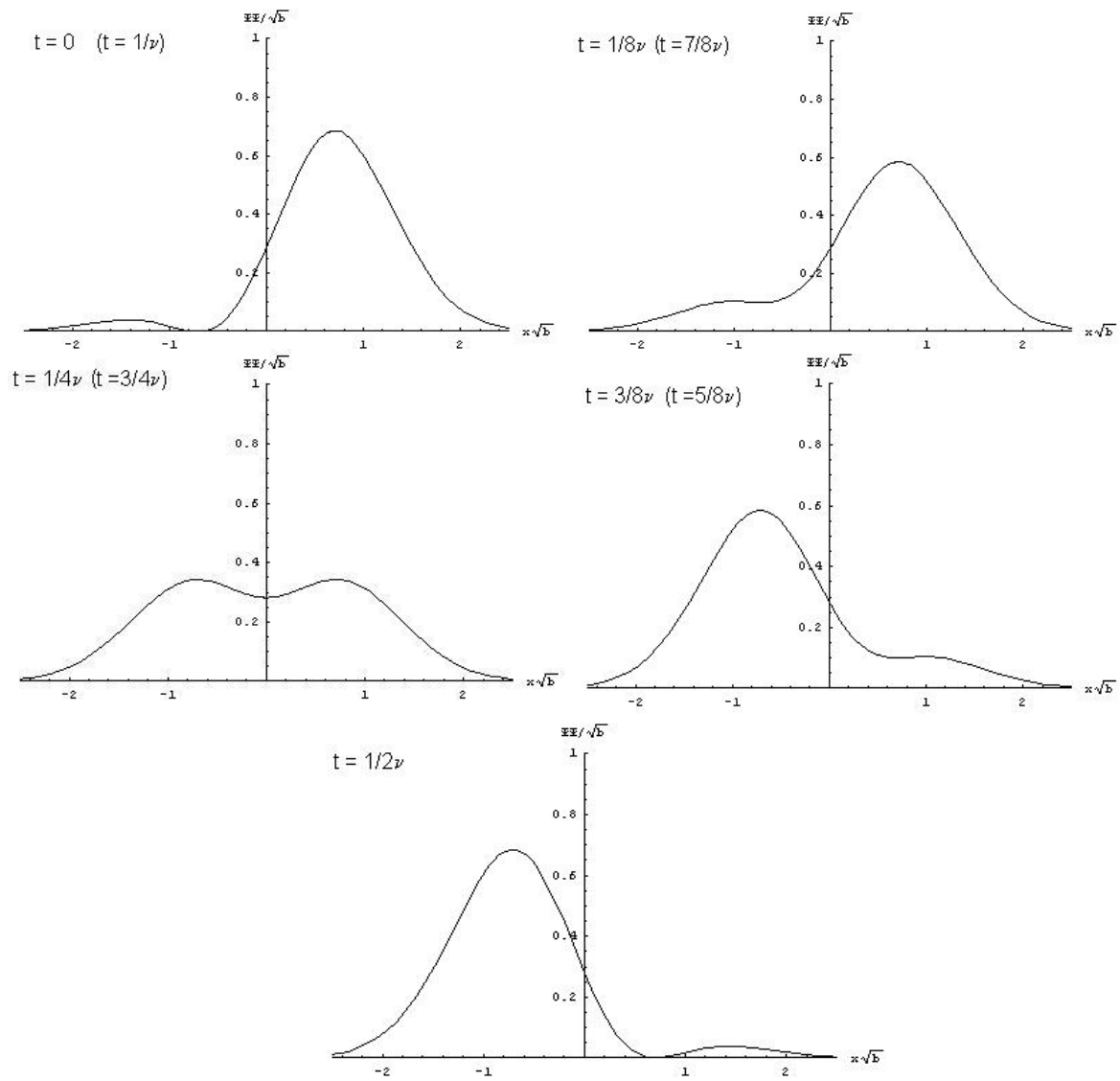


Figura 1: Variación de la densidad de probabilidad ( $\Psi^*\Psi$ ) a diferentes intervalos, entre  $t = 0$  y  $t = 1/\nu$

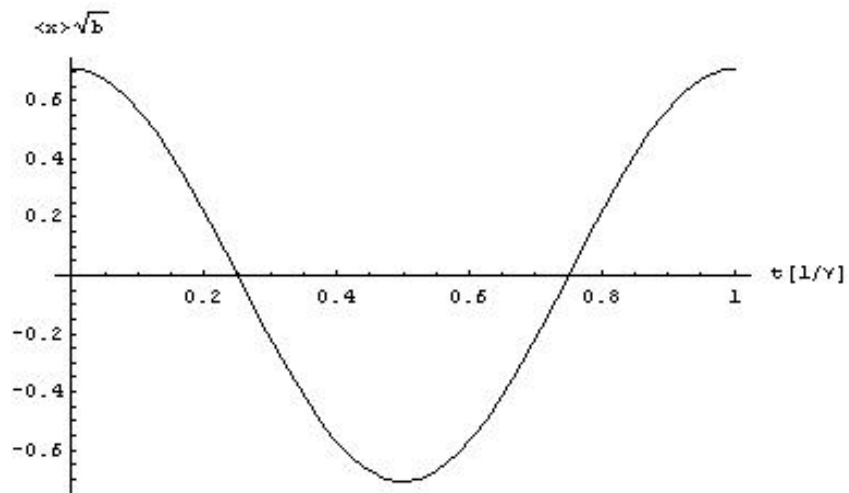


Figura 2: Variación del valor medio de la posición con el tiempo

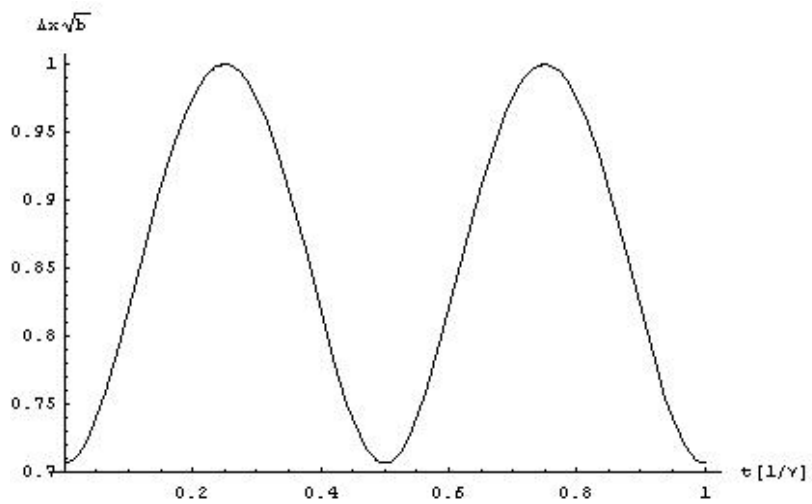


Figura 3: Variación de la incerteza en la posición, con el tiempo

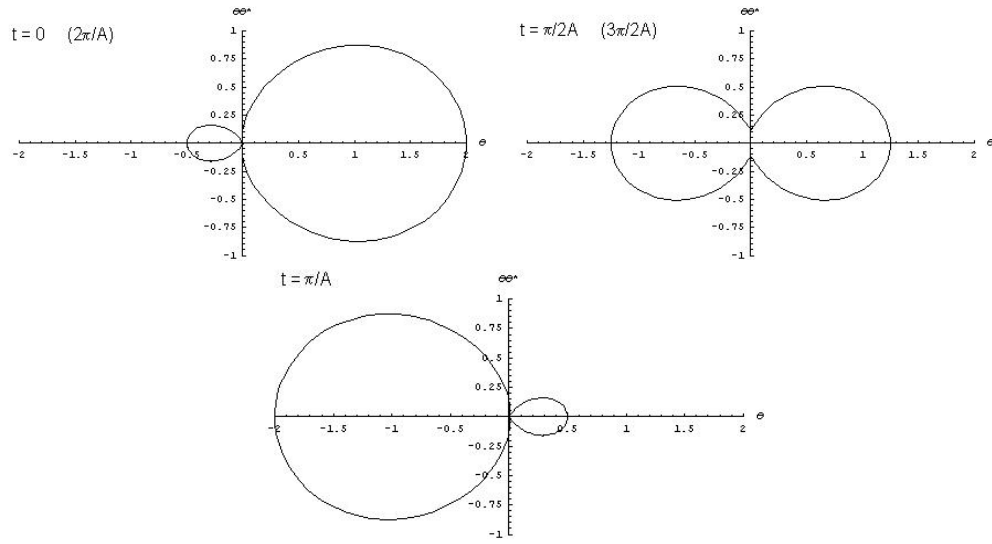


Figura 4: Variación de la dependencia angular del híbrido  $sp^3$  en función del tiempo