



Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile.  
Las Palmeras 3425, Ñuñoa. Casilla 653, Correo 1, Santiago  
FONO: 562 678 7276      FAX: 562 271 2973  
E-MAIL: [secretaria@fisica.ciencias.uchile.cl](mailto:secretaria@fisica.ciencias.uchile.cl)

---

# MECÁNICA CUÁNTICA I

Rodrigo Ferrer P.  
Herbert Massmann L.  
Jaime Roessler B.  
José Rogan C.



# Índice

<b>1</b>	<b>La crisis de la física clásica.</b>	<b>1</b>
1.1	La radiación del cuerpo negro. . . . .	1
1.1.1	Teoría clásica de Rayleigh–Jeans. . . . .	1
1.1.2	Teoría de Planck. . . . .	5
1.2	El efecto fotoeléctrico. . . . .	6
1.3	Calor específico de un gas de moléculas diatómicas. . . . .	8
1.4	Los rayos-X y el efecto Compton. . . . .	9
1.5	La hipótesis de Louis de Broglie. . . . .	11
1.6	Principio de Complementariedad (dualidad onda-partícula). . . . .	12
1.7	Principio de correspondencia. . . . .	15
1.8	El átomo de hidrógeno. . . . .	16
1.9	La regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld. . . . .	21
1.10	El principio de incerteza. . . . .	25
1.11	Problemas. . . . .	29
<b>2</b>	<b>Introducción Matemática.</b>	<b>31</b>
2.1	Espacio vectorial sobre el cuerpo complejo $\mathbb{C}$ . . . . .	31
2.2	Operadores Lineales. . . . .	32
2.3	Vectores duales y producto interno. . . . .	32
2.4	Base de un espacio vectorial. . . . .	32
2.5	Espacios vectoriales de dimensión continua. . . . .	34
2.6	La $\delta$ de Dirac. . . . .	34
2.7	Ortonormalización de una base de dimensión discreta. . . . .	37
2.8	Norma. . . . .	37
2.9	Operadores de proyección $\tilde{\mathbf{P}}$ . . . . .	37
2.10	El operador identidad. . . . .	38
2.11	Operadores unitarios. . . . .	39
2.12	Cambio de Base. . . . .	42
2.13	Notación de Dirac y la notación convencional de matrices. . . . .	44
2.14	Autovalores de un operador. . . . .	45
2.15	El caso de operadores autohermíticos. . . . .	48
2.16	Conmutadores. . . . .	50
2.16.1	Propiedades de los conmutadores. . . . .	51
2.17	Valor esperado y varianza. . . . .	55
2.18	Desigualdad de Schwartz. . . . .	56

2.19	Teorema: “Principio de Incerteza” . . . . .	56
2.20	Problemas . . . . .	59
<b>3</b>	<b>Las ecuaciones básicas de la Mecánica Cuántica.</b>	<b>61</b>
3.1	Introducción Semiclásica para partículas libres. . . . .	61
3.2	Los postulados. . . . .	66
3.3	Conjunto completo de observables compatibles. . . . .	68
3.4	Los operadores $\check{\mathbf{p}}$ y $\check{\mathbf{r}}$ . . . . .	69
3.4.1	El conmutador $[\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}]$ . . . . .	73
3.4.2	El conmutador $[\check{\mathbf{x}}_i, \check{\mathbf{x}}_j]$ y $[\check{\mathbf{p}}_i, \check{\mathbf{p}}_j]$ . . . . .	74
3.4.3	Otras relaciones que involucran a $\check{\mathbf{r}}$ y $\check{\mathbf{p}}$ . . . . .	74
3.5	Uso del principio de correspondencia. . . . .	76
3.6	Ilustraciones. . . . .	81
3.6.1	Teorema del virial. . . . .	81
3.6.2	Regla de suma de Thomas-Reine-Kuhn. . . . .	82
3.7	Paquetes de ondas y transformada de Fourier. . . . .	83
3.7.1	Superposición de ondas planas. . . . .	83
3.7.2	Transformada de Fourier. . . . .	85
3.7.3	Teorema de Parseval. . . . .	86
3.7.4	Propagación de un paquete de ondas. . . . .	88
3.7.5	Dispersión de un paquete de ondas gaussiano. . . . .	90
3.8	Normalización de una función de estado. . . . .	96
3.9	La función de Green para la partícula libre. . . . .	97
3.10	La ecuación de onda en presencia de fuerzas externas. . . . .	99
3.11	Densidad y corriente de probabilidad. . . . .	101
3.12	Propagador. . . . .	104
3.13	Un teorema importante. . . . .	104
3.14	El cuadro de Heisenberg. . . . .	109
3.15	Partícula libre en el cuadro de Heisenberg. . . . .	111
3.16	Leyes de conservación y simetrías . . . . .	112
3.17	Estados estacionarios. . . . .	116
3.17.1	Operador de Green. . . . .	118
3.17.2	Funciones de onda reales. . . . .	119
3.18	Degeneración del espectro y simetrías. . . . .	120
3.19	El Wronskiano. . . . .	122
3.20	Condiciones de borde. . . . .	123
3.20.1	Continuidad de la función de onda. . . . .	129
3.21	Problemas . . . . .	130
<b>4</b>	<b>Solución de algunos problemas unidimensionales.</b>	<b>135</b>
4.1	El pozo infinito. . . . .	135
4.1.1	Autofunciones y energías. . . . .	135
4.1.2	Regla de cuantificación de Bohr-Sommerfeld. . . . .	137
4.1.3	Ensanchamiento repentino. . . . .	137
4.1.4	Ensanchamiento adiabático. . . . .	140

4.1.5	Presión y trabajo. . . . .	141
4.2	Estados ligados en potenciales unidimensionales. . . . .	143
4.2.1	Análisis dimensional. . . . .	143
4.2.2	Potenciales singulares. . . . .	145
4.2.3	Potenciales simétricos. . . . .	146
4.2.4	Ejemplo ilustrativo. . . . .	146
4.2.5	Consideraciones semiclásicas. . . . .	150
4.2.6	Análisis numérico de la Ecuación de Schrödinger. . . . .	153
4.2.7	Resultados numéricos para algunos pozos. . . . .	157
4.3	Partícula ligada a un potencial delta. . . . .	160
4.3.1	Estado ligado en la representación de coordenadas. . . . .	160
4.3.2	Estado ligado en la representación de momentos. . . . .	161
4.3.3	Cambio brusco de la intensidad $V_0$ . . . . .	163
4.3.4	Relación de completitud. . . . .	164
4.3.5	Transformación de Galileo. . . . .	167
4.3.6	Ionización tras una aceleración repentina. . . . .	168
4.4	Resonancias y decaimiento exponencial. . . . .	172
4.4.1	Estados estacionarios y resonancias. . . . .	172
4.4.2	La fórmula de Breit-Wigner. . . . .	175
4.4.3	Decaimiento exponencial. . . . .	177
4.4.4	Energías complejas. . . . .	180
4.4.5	Consideraciones semiclásicas. . . . .	182
4.5	Scattering sobre barreras. . . . .	183
4.5.1	La matriz de transferencia. . . . .	183
4.5.2	El caso de dos barreras. . . . .	185
4.5.3	Transmisión resonante. . . . .	189
4.6	Potenciales periódicos unidimensionales. . . . .	190
4.6.1	Teorema de Bloch. . . . .	190
4.6.2	Modelo de Kroning-Penney. . . . .	192
4.7	Efecto Aharanov-Bohm. . . . .	195
4.7.1	Partícula en movimiento circular. . . . .	195
4.7.2	Potencial vectorial magnético. . . . .	196
4.7.3	Partícula cargada en un campo potencial magnético. . . . .	198
4.8	Problemas . . . . .	201
<b>5</b>	<b>El oscilador armónico. . . . .</b>	<b>203</b>
5.1	Energía de punto cero. . . . .	203
5.1.1	Regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld. . . . .	204
5.2	Los operadores $\hat{\mathbf{a}}$ , $\hat{\mathbf{a}}^\dagger$ y $\hat{\mathbf{n}}$ . . . . .	205
5.3	Función de onda del estado fundamental. . . . .	211
5.4	Estados excitados. . . . .	212
5.5	Polinomios de Hermite. . . . .	216
5.6	Función de Green. . . . .	218
5.7	Representación matricial de los operadores. . . . .	219
5.8	El oscilador armónico en el cuadro de Heisenberg. . . . .	222

5.8.1	Ecuaciones de movimiento. . . . .	222
5.8.2	Interpretación del cuadro de Heisenberg. . . . .	224
5.8.3	Descomposición de $\Psi_H(\xi)$ en autoestados del oscilador armónico. . . . .	226
5.9	Estados coherentes. . . . .	228
5.9.1	Definición. . . . .	228
5.9.2	Valores promedios de algunos operadores. . . . .	229
5.9.3	Forma explícita para $ \alpha\rangle$ . . . . .	230
5.9.4	Evolución temporal. . . . .	231
5.9.5	Comentarios. . . . .	233
5.9.6	Primera ilustración. . . . .	234
5.9.7	Segunda ilustración. . . . .	236
5.10	El oscilador armónico en tres dimensiones. . . . .	237
5.11	Problemas . . . . .	240
<b>6</b>	<b>Momento angular. . . . .</b>	<b>241</b>
6.1	Operadores de rotación en el espacio de Hilbert. . . . .	241
6.2	Momento Angular Orbital. . . . .	245
6.3	Invariancia Rotacional. . . . .	246
6.4	Autovalores y autovectores. . . . .	249
6.5	Autofunciones del momento angular orbital. . . . .	256
6.5.1	Los operadores de momento angular en la representación de coordenadas. . . . .	258
6.6	Los autovectores en la representación de coordenadas. . . . .	260
6.6.1	Evaluación de $Y_{00}$ . . . . .	261
6.6.2	Evaluación de $Y_{\ell\ell}$ . . . . .	261
6.6.3	Evaluación de $Y_{\ell m}$ . . . . .	262
6.6.4	Armónicos esféricos. . . . .	264
6.7	Problemas . . . . .	266
<b>7</b>	<b>Problemas con simetría esférica. . . . .</b>	<b>267</b>
7.1	El problema de dos cuerpos. . . . .	267
7.2	La ecuación radial de Schrödinger. . . . .	270
7.2.1	Propiedades asintóticas de la ecuación radial de Schrödinger. . . . .	273
7.3	La partícula libre en coordenadas polares esféricas. . . . .	275
7.3.1	Funciones de Bessel esféricas. . . . .	275
7.3.2	Función de onda para la partícula libre. . . . .	277
7.4	Partícula en una caja esférica. . . . .	278
7.4.1	Inclusión de un carozo. . . . .	279
7.5	La función hipergeométrica confluyente. . . . .	280
7.6	El oscilador armónico en tres dimensiones. . . . .	282
7.6.1	Operadores de subida y bajada. . . . .	286
7.7	El átomo de hidrogeno . . . . .	290
7.7.1	Degeneración accidental del átomo de hidrógeno. . . . .	295
7.8	Problemas . . . . .	297

# Índice de Figuras

1.1	Caja metálica usada para analizar la radiación del cuerpo negro. . . . .	2
1.2	Cascarón esférico en el espacio $k$ . . . . .	3
1.3	Densidad de energía en función de la frecuencia. . . . .	5
1.4	Átomo absorbiendo energía. . . . .	6
1.5	Energía de los electrones emitidos en función de la frecuencia. . . . .	7
1.6	Distribución temporal de electrones. . . . .	8
1.7	Colisión fotón electrón. . . . .	9
1.8	Experimento de Thomson, Davisson y Germer. . . . .	11
1.9	Difracción de Fresnel de neutrones. . . . .	12
1.10	Diagrama de complementariedad. . . . .	12
1.11	Experimento de interferencia. . . . .	13
1.12	Geometría del experimento de interferencia. . . . .	13
1.13	Experimento de dos fotones. . . . .	14
1.14	Electrón precipitándose al núcleo. . . . .	17
1.15	Vida media del primer estado excitado del Hidrógeno. . . . .	18
1.16	Radio clásico de una orbita de Bohr. . . . .	19
1.17	Átomo de hidrógeno, transiciones entre niveles . . . . .	20
1.18	Orbita electrónica como onda estacionaria . . . . .	21
1.19	Potencial de pozo. . . . .	23
1.20	Experimento de difracción. . . . .	26
1.21	Superposición de ondas. . . . .	27
1.22	Paquete de ondas. . . . .	28
1.23	Estados cuasiestacionarios. . . . .	29
3.1	Transformadas de Fourier . . . . .	87
3.2	Paquete de onda en el espacio de momentum . . . . .	89
3.3	Propagación de un paquete de ondas para tiempos no muy grandes. . . . .	90
3.4	Ancho de un paquete de ondas gaussiano en función del tiempo. . . . .	92
3.5	Gráfico de la envolvente $\sigma(t^*)$ . . . . .	93
3.6	Evolución temporal de la temperatura en un sólido al depositar cierta cantidad de energía en $\vec{r} = 0$ . . . . .	99
3.7	Representación esquemática de la energía potencial y cinética para el caso en que $U(x) - k^2 \geq M^2 > 0 \quad \forall x > x_0$ . . . . .	124
3.8	Comportamiento de las funciones $\phi_1(x)$ y $\phi_2(x)$ para $x > x_0$ . . . . .	124
3.9	Comportamiento de las funciones $f(x)$ y $g(x)$ para $x \rightarrow \infty$ . . . . .	126

3.10	Comportamiento esquemático de la energía potencial del ejemplo discutido en el texto para establecer las características del espectro de energía. . . . .	128
4.1	Pozo infinito. . . . .	135
4.2	Funciones de onda de los tres primeros estados de un pozo infinito. . . . .	136
4.3	Gráfico del potencial usado en el ejemplo ilustrativo. . . . .	147
4.4	Solución gráfica de la ecuaciones (4.6) y (4.7). La línea monótonamente decreciente corresponde al lado derecho de las ecuaciones. Las demás líneas corresponden a los lados izquierdos, las líneas cortadas para las soluciones impares y las líneas llenas para las pares. . . . .	148
4.5	Potencial usado para discutir el comportamiento de las soluciones. . . . .	150
4.6	Comportamiento típico de una solución numérica de la ecuación de Schrödinger del potencial mostrado en la figura anterior. . . . .	154
4.7	Comportamiento de la función de onda a medida que se aumenta la energía $E_1 < E_2 < E_3 < \dots$ . Las energías de los autoestados se denota con $\varepsilon_n$ , $n = 0, 1, 2, \dots$ . . . . .	155
4.8	Gráfico usado para mostrar que no puede aparecer un cero doble en la función de onda. . . . .	156
4.9	Niveles de energía para una partícula de masa $m = 0.2$ y $m = 0.5$ ligada a varios potencial que decaen con distinta rapidez a cero para $ x  \rightarrow \infty$ . . . . .	158
4.10	Niveles de energía para una partícula ligada a un potencial con un montículo al centro. En el caso de la arriba la partícula tiene mayor masa que en el de abajo . . . . .	159
4.11	Distribución espectral de la densidad de probabilidad de encontrar la partícula, para $t > 0$ , en el continuo con energía $\epsilon = E/E_0$ . . . . .	171
4.12	Probabilidad de ionización en función de $\Gamma$ . . . . .	171
4.13	Potencial correspondiente a una pared dura con una barrera delta enfrente. . . . .	172
4.14	Corrimiento de fase $\delta_k$ en función del momento de la partícula incidente. . . . .	174
4.15	Probabilidad relativa de encontrar la partícula al interior del “pozo” en función de la energía incidente. . . . .	174
4.16	Estados cuasi-estacionarios. El ancho de cada nivel se muestra con una banda achurada. . . . .	175
4.17	Forma de la tercera resonancia, con $\alpha = 20$ . Comparación entre el resultado exacto y el obtenido con la fórmula de Breit-Wigner. . . . .	176
4.18	Dos barreras, una centrada en $x = 0$ y la otra en $x = a$ . . . . .	185
4.19	Representación gráfica de los procesos de transmisión con 0, 2, y 4 rebotes virtuales entre ambas barreras. . . . .	187
4.20	Representación de los procesos de reflexión con 0, 1 y 3 rebotes virtuales entre ambas barreras. . . . .	187
4.21	Representación de los procesos de transmisión con 0, 2, y 4 rebotes reales entre ambas barreras. . . . .	189
4.22	Potencial periódico. . . . .	190
4.23	Gráfico de la ecuación (4.60) para $mW_0a/\hbar^2 = 3\pi/2$ . . . . .	194
4.24	Bandas de energía del modelo de Kroning-Penney. . . . .	195
4.25	Espira circular de radio $b$ por la cual circula una corriente $I$ . . . . .	196



4.26 Solenoide, de longitud infinita, con  $n$  vueltas por unidad de longitud, por la cual circula una corriente  $I$ . Note que  $r \sin \theta = \chi \sin \alpha$ . . . . . 197

4.27 Espectro de energía para diversas intensidades del flujo magnético. . . . . 200

5.1 Aplicaciones sucesivas del operador de bajada. . . . . 208

5.2 Estado fundamental del oscilador armónico. . . . . 212

5.3 Funciones de onda del oscilador armónico . . . . . 215

5.4 Función de onda del estado fundamental . . . . . 225

5.5 Evolución temporal del oscilador en el espacio  $\alpha$ . . . . . 232

5.6 Fuerza externa que actúa sobre el oscilador analizado en el texto. . . . . 234

5.7 Experimento con luz coherente . . . . . 236

5.8 Espectro de energía de un oscilador tridimensional. . . . . 238

6.1 Rotación de  $\vec{r}_0$ . . . . . 241

6.2 Rotación infinitesimal del  $\vec{r}_0$ . . . . . 243

7.1 Función de Onda y su rotación . . . . . 273

7.2 Gráfico esquemático de  $j_\ell(kr)$  . . . . . 277

7.3 Potencial coulombiano atractivo. . . . . 290

7.4 Órbitas keplerianas y no keplerianas . . . . . 295

# Capítulo 1

## La crisis de la física clásica.

En este primer capítulo recapitularemos los principales hechos que condujeron al desarrollo de la Mecánica Cuántica.

A fines del siglo XIX se hizo cada vez más evidente que la física desarrollada hasta ese entonces era completamente incapaz de dar cuenta de varios hechos experimentales. El estudio de estos problemas llevó a un conjunto de principios y descripciones, a veces bastante forzadas, conocidas hoy en día con el nombre de *Mecánica Cuántica antigua*. En el presente capítulo analizaremos algunos de estos problemas.

### 1.1 La radiación del cuerpo negro.

Consideremos una cavidad cerrada con sólo un pequeño agujero y cuyas paredes se mantienen a una temperatura constante  $T$ . La energía emitida por las paredes en equilibrio termodinámico, llenará la cavidad. Una porción despreciable de la radiación escapa al exterior por el agujero. La radiación emitida por este agujero se denomina *radiación del cuerpo negro*<sup>1</sup>.

Experimentalmente se encuentra que el espectro emitido por el agujero sólo depende de la temperatura  $T$  y no del material de la que está hecha la caja.

Veamos brevemente con qué dificultades se encontró la explicación clásica de este fenómeno.

#### 1.1.1 Teoría clásica de Rayleigh–Jeans.

Consideremos una caja de paredes metálicas y de tamaño  $L_x, L_y, L_z$  (ver figura 1.1).

¿Cuáles son los modos electromagnéticos posibles dentro de esta cavidad? Para responder a esta pregunta, consideremos el campo eléctrico de la radiación. Que las paredes sean conductoras significa que el campo eléctrico paralelo a la superficie debe anularse. Al interior de la cavidad el campo eléctrico satisface la ecuación de ondas libres

$$\nabla^2 \vec{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\delta^2}{\delta t^2} \vec{E} = 0 .$$

---

<sup>1</sup>Con cuerpo negro se denota cualquier cuerpo que absorbe toda la radiación que choca contra él. Toda la radiación que incide desde el exterior sobre el agujero de la caja, penetrará al interior no siendo reflejado nada.

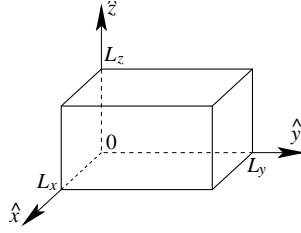


Figura 1.1: Caja metálica usada para analizar la radiación del cuerpo negro.

Busquemos soluciones del tipo

$$\vec{E} = E_x(x, y, z, t)\hat{x} + E_y(x, y, z, t)\hat{y} + E_z(x, y, z, t)\hat{z} ,$$

con

$$E_x(x, y, z, t) = \cos(k_x x) \operatorname{sen}(k_y y) \operatorname{sen}(k_z z) e^{i\omega t} ,$$

$$E_y(x, y, z, t) = \operatorname{sen}(k_x x) \cos(k_y y) \operatorname{sen}(k_z z) e^{i\omega t} ,$$

$$E_z(x, y, z, t) = \operatorname{sen}(k_x x) \operatorname{sen}(k_y y) \cos(k_z z) e^{i\omega t} .$$

El campo debe satisfacer las siguientes condiciones de borde

$$E_x(x, y, 0, t) = E_x(x, y, L_z, t) = 0 \quad \forall x, y, t$$

$$E_x(x, 0, z, t) = E_x(x, L_y, z, t) = 0 \quad \forall x, z, t$$

$$E_y(0, y, z, t) = E_y(L_x, y, z, t) = 0 \quad \forall y, z, t$$

$$E_y(x, y, 0, t) = E_y(x, y, L_z, t) = 0 \quad \forall x, y, t$$

$$E_z(0, y, z, t) = E_z(L_x, y, z, t) = 0 \quad \forall y, z, t$$

y

$$E_z(x, 0, z, t) = E_z(x, L_y, z, t) = 0 \quad \forall x, z, t$$

Estas ecuaciones se satisfacen si elegimos  $\vec{k}$  de manera que

$$\operatorname{sen}(k_x L_x) = 0 ,$$

$$\operatorname{sen}(k_y L_y) = 0$$

y

$$\operatorname{sen}(k_z L_z) = 0 .$$

En otras palabras, los vectores de onda  $k_i$ , ( $i = x, y, z$ ) no son arbitrarios sino que deben satisfacer

$$k_i = \frac{n_i \pi}{L_i} \quad , \quad n_i \in \mathbb{N}^* . \quad (1.1)$$

Sea  $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$  el módulo al cuadrado del vector de onda. La relación entre el vector de onda  $k$  y la frecuencia angular  $\omega$  de la onda electromagnética es

$$k^2 = \frac{\omega^2}{c^2} \quad (\text{relación de dispersión}) .$$

¿Cuántos modos hay que poseen un vector de onda con magnitud entre  $k$  y  $k + \Delta k$ ? A partir de la ecuación (1.1) se deduce que, para cada componente, la separación entre vectores de onda contiguos es

$$\Delta k_x = \frac{\pi}{L_x} \quad , \quad \Delta k_y = \frac{\pi}{L_y} \quad , \quad \Delta k_z = \frac{\pi}{L_z} \quad ,$$

ya que  $\Delta n_i = 1$  ( $n_x, n_y$  y  $n_z$  pueden variar sólo en un entero). Luego cada modo de oscilación electromagnético “ocupa” en el espacio  $k$  un “volumen”

$$\Delta k_x \Delta k_y \Delta k_z = \frac{\pi^3}{L_x L_y L_z} = \frac{\pi^3}{V} .$$

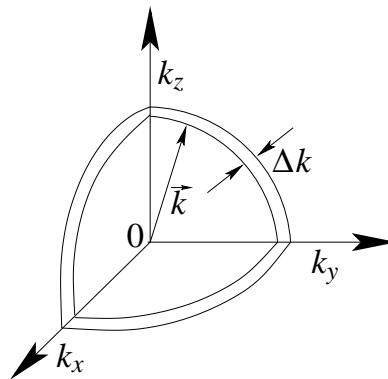


Figura 1.2: Cascarón esférico en el espacio  $k$ .

Para encontrar el número de modos con vector de onda entre  $k$  y  $k + \Delta k$  basta calcular el volumen de la cáscara esférica mostrada en la figura 1.2 y dividirlo por el volumen que ocupa cada modo. En la figura 1.2 se considera sólo un octante de la esfera, ya que  $n_i$  sólo toma valores enteros positivos. Sea  $n(k) \Delta k$  el número de modos con vector de onda entre  $k$  y  $k + \Delta k$ , entonces se tiene que

$$n(k) \Delta k = \frac{1}{8} \frac{4\pi k^2 \Delta k}{\pi^3/V} \cdot 2 = \frac{V k^2 \Delta k}{\pi^2} . \quad (1.2)$$

El factor 2 que aparece en la ecuación anterior se debe a que, para cada  $\vec{k}$ , existen dos estados de polarización. (una vez elegido  $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$ , quedan sólo dos grados de libertad para el campo eléctrico ya que  $\vec{E}$  necesariamente debe ser perpendicular a  $\vec{k}$ .) A partir de (1.2) y usando las relaciones

$$n(\omega) = n(k) \frac{\Delta k}{\Delta \omega}$$

y

$$\frac{\Delta k}{\Delta \omega} = \frac{1}{c},$$

se obtiene, para la densidad de modos de frecuencia  $\omega$

$$n(\omega) = \frac{V k^2}{\pi^2} \frac{1}{c} = \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \frac{V}{\pi^2 c}.$$

Para encontrar la densidad de energía  $u(\omega)$  hay que multiplicar la densidad de modos  $n(\omega)$  por la energía promedio  $\bar{E}_\omega$  que posee un modo con frecuencia  $\omega$ :

$$u(\omega) = n(\omega) \bar{E}_\omega.$$

Según la teoría estadística clásica, la probabilidad de que un oscilador tenga la energía entre  $E$  y  $E + dE$ , si la temperatura es  $T$ , viene dada por

$$\frac{\exp(-E/k_B T) dE}{\int_0^\infty \exp(-E'/k_B T) dE'}. \quad (\text{Distribución de Boltzmann})$$

Usando este resultado podemos evaluar el valor promedio de la energía para el modo  $\omega$ . Se obtiene

$$\begin{aligned} \bar{E}_\omega &= \frac{\int_0^\infty E \exp(-E/k_B T) dE}{\int_0^\infty \exp(-E'/k_B T) dE'} = -\frac{d}{d\beta} \left[ \log \int_0^\infty e^{-\beta \epsilon} d\epsilon \right] \\ &= -\frac{d}{d\beta} \log \frac{1}{\beta} = \frac{1}{\beta}, \end{aligned}$$

donde,  $\beta \equiv (k_B T)^{-1}$  y  $k_B$  es la *Constante de Boltzmann*. Con este resultado se obtiene para la densidad de energía la expresión

$$u(\omega) = \frac{\omega^2 V k_B T}{\pi^2 c^3}. \quad \text{Fórmula de Rayleigh-Jeans} \quad (1.3)$$

La energía interna total  $U$  de la radiación al interior de la caja se obtiene integrando la densidad  $u(\omega)$

$$U = \frac{V k_B T}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \omega^2 d\omega = \infty,$$

resultado obviamente absurdo. La ecuación (1.3) no puede ser correcta. Esto se observa con mayor claridad en la figura 1.3, donde se grafica la densidad de energía en función de la frecuencia  $\omega$ . Para pequeños valores de  $\omega$  el resultado de la teoría de Raleigh-Jeans concuerda bastante bien con los datos experimentales. Para valores grandes de  $\omega$  la teoría está en completo desacuerdo con los datos experimentales: Raleigh-Jeans diverge mientras que experimentalmente se encuentra que la densidad de energía tiende exponencialmente a cero. Esta dificultad se conoce con el nombre de “*catástrofe ultravioleta*”.

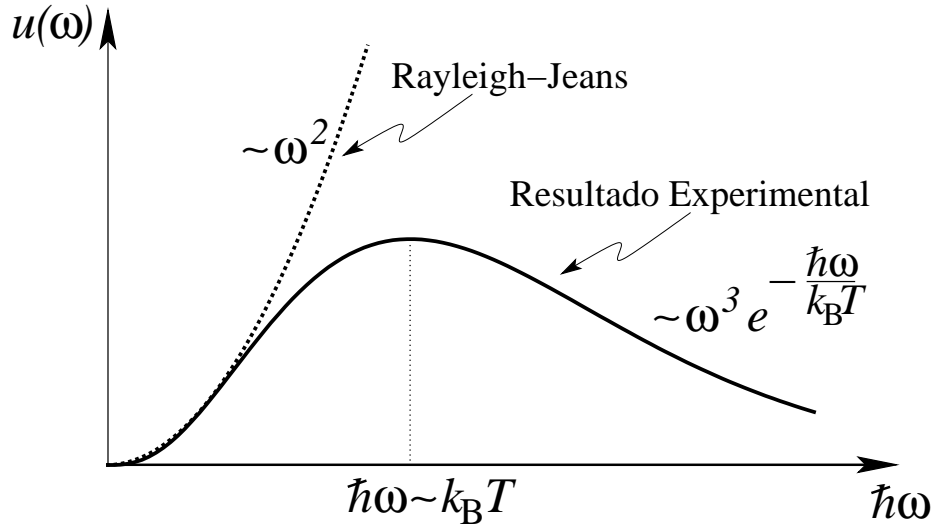


Figura 1.3: Densidad de energía en función de la frecuencia. La línea sólida corresponde al resultado experimental mientras que la línea cortada corresponde al resultado de la teoría de Raleigh-Jeans.

### 1.1.2 Teoría de Planck.

Para evitar la aparición de la divergencia ultravioleta es necesario lograr que la energía promedio  $\bar{E}_\omega$  de un modo con frecuencia  $\omega$ , sea menor que  $k_B T$  para frecuencias altas. Max Planck logró precisamente esto introduciendo una hipótesis bastante revolucionaria. Planck supuso que la energía de un oscilador siempre es un múltiplo entero de  $\hbar\omega$ , donde  $\hbar$  es una constante y  $\omega$  es la frecuencia angular del oscilador, es decir,

$$E = n\hbar\omega \quad (n = \text{número cuántico} \in \mathbb{N}^*).$$

Ahora, para calcular  $\bar{E}_\omega$ , en (17) hay que usar sumatorias, en lugar de las integrales. Luego:

$$\begin{aligned} \bar{E}_\omega &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\hbar\omega e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}}} = -\hbar\omega \frac{d}{dx} \left[ \log \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} \right]_{x=\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \\ &= \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \begin{cases} k_B T & \text{si } \frac{\hbar\omega}{k_B T} \ll 1, \text{ Rayleigh-Jeans} \\ \hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} & \text{si } \frac{\hbar\omega}{k_B T} \gg 1, \text{ Ley empírica de Wien} \end{cases} \end{aligned} \quad (1.4)$$

Esta es la distribución de Planck.

Usando (1.4) se obtiene una densidad de energía que está en completo acuerdo con los resultados experimentales:

$$u(\omega) = \frac{V\omega^2}{c^3\pi^2} \left( \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \right)$$

si  $\hbar$  toma el valor:

$$\hbar = 1.0545887 \times 10^{-27} \text{ [erg}\cdot\text{s]}$$

## 1.2 El efecto fotoeléctrico.

Al iluminar una placa metálica con luz, escapan electrones del metal (efecto fotoeléctrico). Este hecho por sí solo es fácil de explicar: la luz que incide sobre la placa transporta una cierta energía que la traspasa a los electrones. Algunos electrones adquieren suficiente energía como para sobrepasar la barrera de potencial que los mantiene dentro del metal. El estudio más cuantitativo de este efecto trajo sin embargo algunos resultados completamente inesperados. Lenard encontró que la energía de los electrones emitidos, no dependía de la intensidad de la luz incidente; al disminuir la intensidad de la luz, sólo disminuye el número de electrones. La energía de los electrones emitidos sólo depende de la frecuencia de la luz y del metal considerado. Otro hecho experimental interesante es que aparecen electrones tan pronto como se hace incidir luz sobre la placa metálica.

La teoría electromagnética clásica es completamente incapaz de explicar estos resultados. La intensidad de la luz es proporcional al cuadrado del campo electromagnético. Clásicamente la energía irradiada por una carga oscilante es proporcional a la energía del oscilador y viceversa. Por lo tanto, la energía absorbida por una carga es proporcional a la intensidad del campo electromagnético a la que está expuesta. Luego se espera que la energía de los electrones emitidos sea proporcional a la intensidad de la luz.

Evaluemos el tiempo que requieren los electrones para absorber la energía observada de  $\sim 1 \text{ [eV]} = 1.60219 \times 10^{-12} \text{ [erg]}$ , al ser iluminada una placa metálica por una ampolla de  $1 \text{ [W]} = 10^7 \text{ [erg/s]}$  situada a  $1 \text{ [m]}$  de distancia.

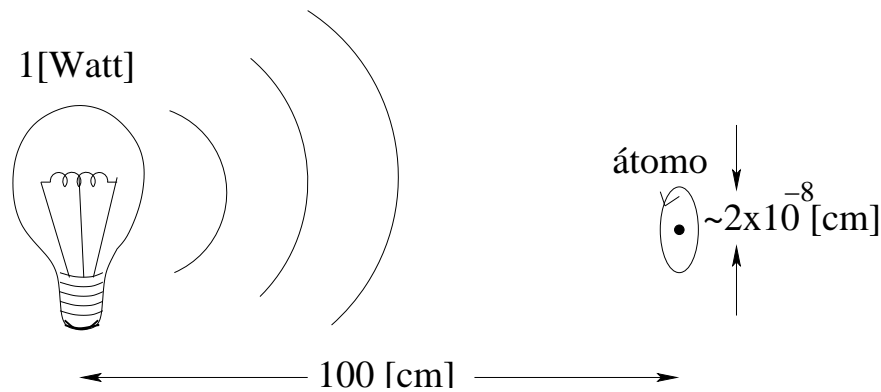


Figura 1.4: Átomo absorbiendo energía.

Sobre un átomo de la placa metálica inciden

$$10^7 \left[ \frac{\text{erg}}{\text{s}} \right] \cdot \left( \frac{\pi (10^{-8})^2 [\text{cm}^2]}{4\pi (100)^2 [\text{cm}^2]} \right) = 0.25 \times 10^{-13} \left[ \frac{\text{erg}}{\text{s}} \right] .$$

El término en paréntesis es el ángulo sólido sustentado por el átomo.

Luego para absorber  $1.6 \times 10^{-12}$  [erg] se requiere un tiempo de al menos

$$\frac{1.6 \times 10^{-12}}{0.25 \times 10^{-13}} [\text{s}] \sim 60 [\text{s}] = 1 [\text{min}] .$$

Esto está en contradicción con los hechos experimentales, pues los electrones aparecen inmediatamente. Pareciera ser que la energía de la luz no se distribuye homogéneamente sobre toda la placa (como lo requiere la teoría electromagnética clásica), sino que “la onda colapsa”, concentrando toda la energía y entregándosela a un electrón.

Planck tuvo que suponer que un oscilador de frecuencia  $\omega$  sólo puede tener energías  $E_n = n\hbar\omega$  con  $n \in \mathbb{N}^*$ , luego al absorber energía de un campo electromagnético la energía del campo electromagnético sólo puede cambiar en un múltiplo entero de  $\hbar\omega$ . Estas consideraciones hicieron postular a Einstein la siguiente hipótesis para resolver el problema planteado por el efecto fotoeléctrico.

**Hipótesis:** Una onda electromagnética de frecuencia  $\omega$  y energía  $n\hbar\omega$  colapsa en (está compuesta de)  $n$  partículas (llamadas fotones) de energía  $\hbar\omega$ .

De esta hipótesis se deduce inmediatamente que la cantidad de partículas que aparecen por el colapso de la onda es proporcional a la intensidad de onda electromagnética. Note que la energía de las partículas, sin embargo, depende sólo de la frecuencia.

Si  $\phi$  es la función de trabajo del metal (es decir, la energía necesaria para remover un electrón de la superficie del metal) entonces la energía del electrón emitido viene dada por

$$E_e = \hbar\omega - \phi$$

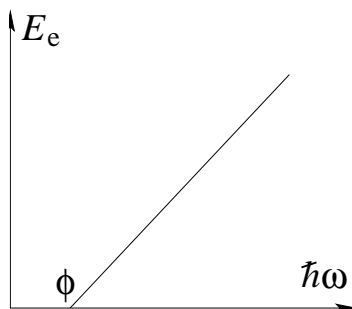


Figura 1.5: Energía de los electrones emitidos en función de la frecuencia.

Este comportamiento lineal de  $E_e$  con  $\omega$  (ver figura 1.5) predicho por Einstein, fue más tarde verificado experimentalmente por Millikan. La teoría de Einstein explica completamente todos los hechos experimentales del efecto fotoeléctrico.

Al iluminar una placa metálica con luz coherente proveniente de un láser y medir el tiempo transcurrido entre la detección de dos electrones emitidos por el metal se encuentra que estos están distribuidos según una distribución de Poisson.

El hecho de que la distribución observada sea de Poisson indica que el proceso de colapso es un proceso que ocurre completamente al azar (o sea intrínsecamente irreproducible).



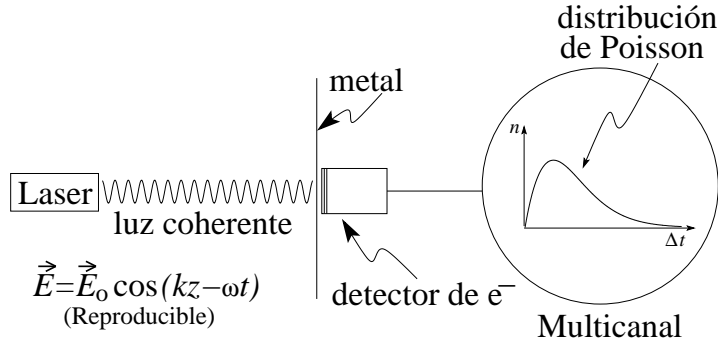


Figura 1.6: Distribución temporal de electrones.

### 1.3 Calor específico de un gas de moléculas diatómicas.

Cada átomo de un gas monoatómico posee 3 grados de libertad traslacionales. De acuerdo con el teorema de la **equipartición de energía** de la mecánica estadística clásica. (Ver por ejemplo Reif: *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, pág. 248) cada uno de estos 3 términos contribuye con  $\frac{1}{2}k_B T$  a la energía total (no relativista) del átomo:

$$U = \frac{3}{2}k_B T ,$$

donde  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $T$  la temperatura.

De (25) se obtiene para el calor específico:

$$C_v \equiv \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_v = \frac{3}{2}k_B ,$$

valor que coincide con el resultado experimental para gases monoatómicos.

Para una molécula diatómica hay 6 términos de energía cinética, 3 de traslación, 2 de rotación y uno de vibración, y un término de energía potencial (vibración). Luego de acuerdo con el teorema de la equipartición de la energía se debería tener

$$U = \frac{7}{2}k_B T ,$$

y por lo tanto

$$C_v = \frac{7}{2}k_B .$$

Sin embargo, experimentalmente se obtiene que a temperatura ambiente, la mayoría de los gases diatómicos tienen un calor específico.

$$C_v = \frac{5}{2}k_B .$$

Esta contradicción desaparece al considerar el hecho de que un oscilador (vibración) de frecuencia  $\omega$  sólo puede tener una energía que es un múltiplo entero de  $\hbar\omega$ . De acuerdo con la ecuación (1.4), el grado de libertad vibracional contribuye en promedio, con una energía

$$\langle E_{nb} \rangle = \frac{\hbar\omega}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) - 1}$$

a la energía total de la molécula. A partir del espectro vibracional de la molécula se puede obtener el valor de  $\hbar\omega$ . Para moléculas diatómicas tiene un valor del orden de 5000 [K]. Luego a temperatura ambiente ( $T \sim 300$  [K]).

$$\frac{\hbar\omega}{k_B T} \gg 1 .$$

Luego, el grado de libertad vibracional no contribuye a la energía total de la molécula (el grado de libertad vibracional está “congelado”), lo cual explica el valor experimentalmente observado del calor específico para moléculas diatómicas.

## 1.4 Los rayos-X y el efecto Compton.

En 1865 Roentgen observa por primera vez los rayos-X. Experimentos posteriores demuestran que los rayos-X no son otra cosa que radiación electromagnética igual que la luz pero de frecuencia mayor. Particularmente importantes son los experimentos de Von Laue y los hermanos Bragg que obtienen diagramas de difracción de rayos-X al hacerlos incidir sobre cristales. De acuerdo con estos resultados, la longitud de onda para los rayos-X es similar a las dimensiones atómicas.

$$\lambda = \frac{c}{\nu} = \frac{2\pi c}{\omega} \sim 10^{-8}[\text{cm}] ,$$

considerando que la longitud de onda de la luz visible es del orden  $\lambda \sim 5 \times 10^{-5}$  [cm].

Compton en 1923 retoma las ideas de Einstein y le asocia a los rayos-X de frecuencia angular  $\omega$  una partícula (fotón) de energía  $\hbar\omega$  y de masa nula y estudia la colisión elástica entre tal fotón y un electrón.

Suponiendo al electrón inicialmente en reposo en el sistema de laboratorio se tiene:

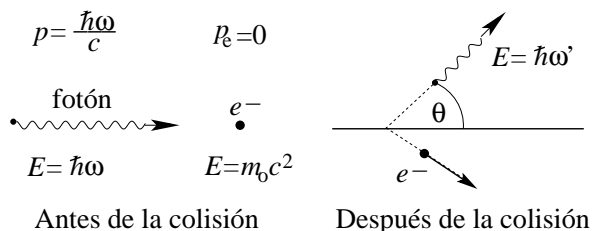


Figura 1.7: Colisión fotón electrón.

Sea  $v$  la velocidad del centro de masa. Realizando una transformación de Lorentz desde el sistema del Laboratorio al sistema del centro de masa se obtiene para la energía del fotón antes y después de la colisión el resultado

$$\hbar\bar{\omega} = \frac{\hbar\omega \left(1 - \frac{v}{c}\right)}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \quad \hbar\bar{\omega}' = \frac{\hbar\omega' \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta\right)}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \quad (1.5)$$

En el centro de masa la descripción de un choque elástico de 2 partículas es particularmente simple; las energías de las partículas antes y después de la colisión son las mismas, o sea

$$\hbar\bar{\omega} = \hbar\bar{\omega}' , \quad (1.6)$$

luego, reemplazando (1.5) en (1.6) se obtiene

$$\omega \left(1 - \frac{v}{c}\right) = \omega' \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta\right) . \quad (1.7)$$

De (1.7) se obtiene que

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = 2\pi c \left( \frac{1}{\omega'} - \frac{1}{\omega} \right) = \frac{2\pi c}{\omega} \left( \frac{1 - \cos \theta}{\frac{c}{v} - 1} \right) .$$

**Ejercicio:** (Problema 1). Demuestre que la velocidad del centro de masa  $v$  viene dada por

$$\frac{c}{v} = 1 + \frac{m_o c^2}{\hbar\omega} . \quad (1.8)$$

Usando la ecuación (1.8),  $\Delta\lambda$  se puede reescribir de la forma

$$\Delta\lambda = \lambda_c (1 - \cos \theta) , \quad (1.9)$$

donde la longitud de onda de Compton para el electrón es

$$\lambda_c = \frac{2\pi\hbar}{m_o c^2} = 0.02426 \text{ [Å]} ,$$

la anterior corresponde a la longitud de onda Compton para el electrón.

La ecuación (1.9) concuerda plenamente con las mediciones realizadas por Compton. Más adelante incluso se midió la energía de retroceso del electrón en una cámara de Wilson, confirmando que se trata de un choque elástico entre fotones y electrones.

Lo anterior reafirma el carácter corpuscular de la radiación electromagnética, entre ellos la luz y los rayos-X, en aparente contraposición con las propiedades ondulatorias obtenidas de los experimentos de Von Laue. Paradojalmente fue el mismo Compton quien hizo uso de estas propiedades ondulatorias de los rayos-X. al medir directamente sus longitudes de onda mediante el uso de una red de difracción óptica (1925). Este último trabajo llevó a una determinación precisa de las dimensiones atómicas al combinarse con los resultados de Von Laue, W. Bragg y L. Bragg.

**Ejercicio:** (Problema 2) Demuestre la ecuación (1.9) usando directamente la conservación de la energía y el momento lineal.

## 1.5 La hipótesis de Louis de Broglie.

Los experimentos y efectos descritos en las secciones anteriores demuestran que la luz tiene un comportamiento ondulatorio o corpuscular según la situación en que se observa.

Para la luz se tiene

$$E = \hbar\omega \quad (\text{Postulado de Einstein}) \quad E = pc$$

luego

$$p = \frac{\hbar\omega}{c} = \hbar k = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (1.10)$$

donde

$$k = \text{vector de onda} = k = \omega/c$$

$$\nu = \text{frecuencia} = \omega/(2\pi)$$

$$\lambda = \text{longitud de onda} = c/\nu$$

$$h = 2\pi\hbar .$$

En 1924 Louis de Broglie aventura la hipótesis de que una partícula material cualquiera (electrón, protón, ...) se comporta también como onda siendo la longitud de onda

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (1.11)$$

en concordancia con la ecuación (1.10) para fotones. Tal hipótesis no era más que una especulación, pero en 1925 Davisson y Germer descubren accidentalmente que al hacer incidir electrones de 40 [eV] sobre un monocristal de níquel se observa, efectos de difracción.

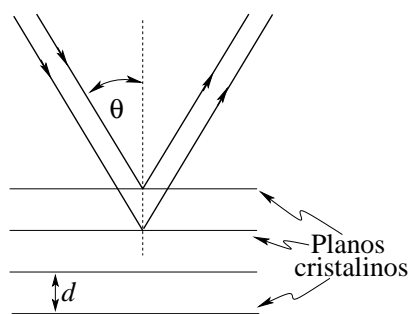


Figura 1.8: Experimento de Thomson, Davisson y Germer.

Hay interferencia constructiva si

$$2d \cos \theta = n\lambda \quad \text{con } n \in \mathbb{N}$$

Casi al mismo tiempo que Davisson y Germer, Thomson hace incidir electrones de alta energía ( $\sim 10.000$  [eV]) sobre láminas muy delgadas de oro, observando las mismas imágenes

que aquellas obtenidas por rayos-X. Por último Rupp mide la longitud de onda de un electrón mediante una red de difracción, confirmando la ecuación (1.11), ¡y sin embargo el electrón muestra masa y carga definida, como cualquier partícula!

Johnson observa propiedades ondulatorias de átomos de hidrógeno y más adelante Stern y Frish (1937) observan difracción de átomos de He sobre cristales de fluoruro de litio.

También se ha observado la típica difracción de Fresnel en la difracción de neutrones lentos por un borde bien determinado (ver *Am. J. Phys.* 295, (1977)).

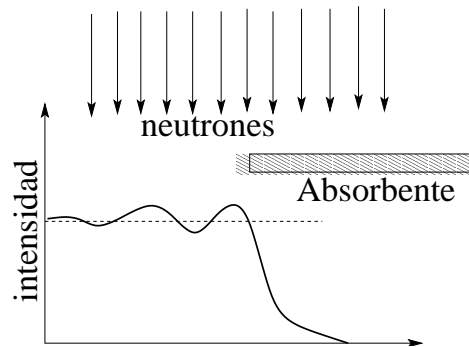


Figura 1.9: Difracción de Fresnel de neutrones.

Estos experimentos confirman la idea de que las partículas poseen también propiedades ondulatorias (difracción). Por otra parte el efecto fotoeléctrico y el efecto Compton muestran que las ondas electromagnéticas manifiestan adicionalmente propiedades de partícula. Así es como se llegó a la formulación del principio de complementariedad.

## 1.6 Principio de Complementariedad (dualidad onda-partícula).

“La materia posee naturaleza de partícula y de onda. Cuál de ellas se manifiesta en un experimento particular depende de qué propiedad es medida por el aparato”.

El siguiente diagrama representa al principio de complementariedad

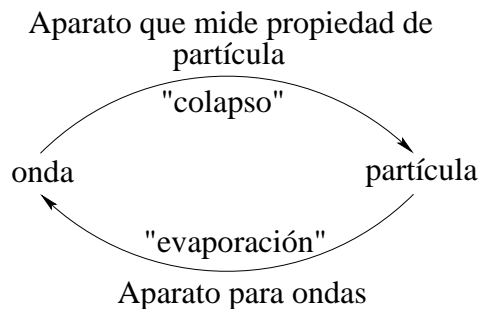


Figura 1.10: Diagrama de complementariedad.

Apartémonos de la secuencia histórica que llevó a la construcción de la Mecánica Cuántica, y analicemos el significado de la dualidad onda-partícula. Consideremos por ejemplo el siguiente experimento de interferencia; enviemos un onda luminosa sobre una lámina con dos rendijas.

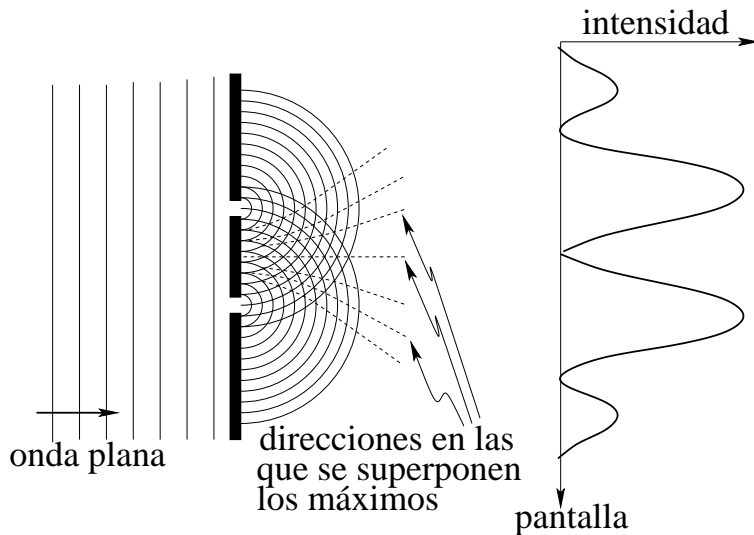


Figura 1.11: Experimento de interferencia.

En el caso de dos rendijas es particularmente simple encontrar las direcciones de interferencia constructiva; éstas deben satisfacer

$$d \operatorname{sen} \theta = n\lambda \quad n \in \mathbb{N} .$$

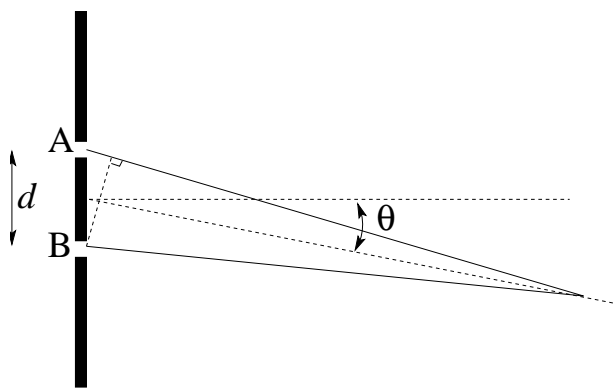


Figura 1.12: Geometría del experimento de interferencia.

La difracción de Bragg-Von Laue no es más que una versión microscópica de este efecto; allí la luz se reemplaza por rayos-X y las rendijas por la estructura periódica del cristal (ver

Ashcroft-Mermin, en *Solid State Physics* (Holt, Rinehart and Winston 1976) pág. 96).

A nivel de la Física Clásica son totalmente incompatibles las características corpusculares y ondulatorias; en efecto, imaginemos la onda ubicada a la izquierda de las rendijas como una distribución homogénea de fotones que viaja hacia la derecha; supongamos el flujo suficientemente bajo, de modo que en cada momento se tenga a lo más un solo fotón cruzando la rendija. De acuerdo a la imagen clásica de una partícula, parece razonable suponer que los fotones que formarán la imagen de interferencia cumplen con la siguiente proposición lógica:

$P1$  “Cada fotón cruza o por la rendija A o por la rendija B”.

Tal proposición parece confirmada al poner una fotocélula justo en frente de una de las rendijas; se detecta o bien un fotón completo (de energía  $\hbar\omega$ ) o bien no se detecta nada. **Nunca** se detecta un fotón de energía  $\hbar\omega/2$ .

Sin embargo, si suponemos cierta esta proposición debemos concluir que el diagrama formado sobre la pantalla no es más que la suma de los diagramas asociados a una y otra rendija. El diagrama de intensidad obtenido por la proposición  $P1$  no concuerda con el experimentalmente observado (ver figura); es decir, la proposición  $P1$  no contempla la interferencia (superposición) de las ondas provenientes de cada una de las rendijas.

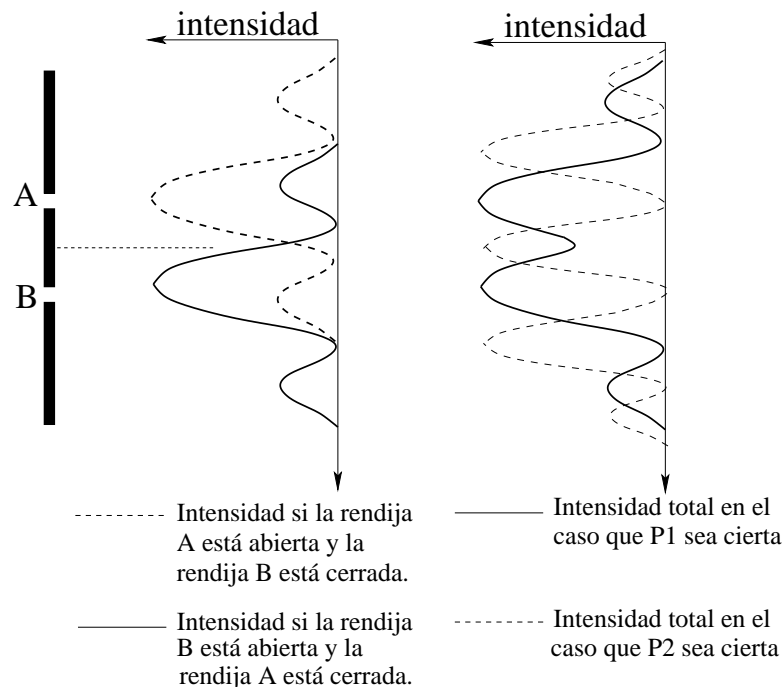


Figura 1.13: Experimento de dos fotones.

Planteamos la proposición alternativa a  $P1$  adecuada a la imagen ondulatoria de la luz (pero incompatible con el concepto clásico de partícula).

$P2$  “Cada fotón cruza a la vez por ambas rendijas”.

Esta hipótesis describe correctamente el diagrama de interferencia experimentalmente observado pero no resulta adecuada para describir otros experimentos, por ejemplo, montar una fotocélula contigua a la rendija A, de acuerdo a lo indicado anteriormente.

Resumiendo: Si colocamos un fotodetector sobre la pantalla (alejada de las rendijas), es útil la imagen del fotón como onda hasta el momento de la medición (momento en el cual se comporta como partícula), y por lo tanto pareciera cumplirse  $P2$ . Pero al montar el fotodetector contiguo a una rendija pareciera cumplirse  $P1$ . Este es el gran misterio que presenta la microfísica: no es posible hacerse una imagen (única) de los procesos microscópicos; la Física Cuántica nos exige renunciar a la intuición. Tan sorprendente situación requirió un cambio fundamental de actitud en los físicos de la década de 1920; ya no podrían seguir buscando interpretaciones de la realidad microscópica-cuántica en término de concepciones a-priori, provenientes de nuestra experiencia macroscópica; en cambio había que construir nuevas concepciones físicas capaces de describir esta nueva realidad. El enunciado del principio de complementariedad de Bohr mostraba este cambio de actitud; según Bohr el hecho de que un objeto cuántico tenga comportamientos diversos (aparentemente incompatibles desde el punto de vista de nuestra intuición clásica) ante operaciones de medición mutuamente excluyentes entre sí, no debe ser visto como contradictorio, sino que la información así obtenida debe considerarse como complementaria para el conocimiento del objeto cuántico.

La mecánica cuántica plantea una situación nueva; ya no es posible tener imágenes intuitivas de los distintos procesos cuánticos; en cierta medida los distintos experimentos parecieran proporcionalmente imágenes de “algunas facetas” del mundo cuántico; sin embargo, si tratamos de aunar toda la información experimental mediante una única imagen clásica, nuestro esquema resulta inevitablemente incoherente.

Los aparatos de medición sólo son capaces de darnos facetas parciales de un objeto cuántico, dado el carácter clásico de los primeros. Sólo tenemos acceso a la interrelación objeto cuántico-aparato de medición; no tenemos acceso al objeto cuántico “en si”.

## 1.7 Principio de correspondencia.

En la óptica física, al considerar ondas electromagnéticas de longitud de onda  $\lambda$  mucho menor que las dimensiones típicas de los elementos con que interactúa se obtiene lo que es conocido como “óptica geométrica”. En la óptica geométrica la naturaleza ondulatoria no entra en juego y perfectamente se puede considerar a la luz de naturaleza corpuscular. De la misma forma se puede pensar que la mecánica clásica de Newton es el límite de longitudes de onda corta de la mecánica cuántica.

$$\begin{array}{ccc} \text{óptica física} & \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} & \text{óptica geométrica} \\ \text{mecánica ondulatoria} & \xrightarrow{\lambda \rightarrow 0} & \text{mecánica clásica} \end{array}$$

Recordando la relación de de Broglie (1.11)

$$\lambda = \frac{h}{p} \tag{1.11}$$

se obtiene que si  $h \rightarrow 0$  entonces  $\lambda \rightarrow 0$ .



**Principio de correspondencia.**

Consideremos un fenómeno clásico. Si en el problema cuántico análogo que le corresponde se realiza el límite  $h \rightarrow 0$  (es decir, en el límite en que la mecánica se vuelve continua), los resultados cuánticos deben coincidir con los resultados clásicos.

El proceso límite  $h \rightarrow 0$  de la mecánica cuántica tiene varias sutilezas (en otras palabras, no es trivial), a las cuales nos dedicaremos en un capítulo posterior.

Además, es conveniente hacer notar que no todo fenómeno cuántico tiene un análogo clásico. Por ejemplo para el spin  $\sigma$  de un sistema cuántico que sólo posee dos niveles, no existe un análogo clásico.

Consideremos un sistema cuántico descrito por un número cuántico  $n$ , entonces otra forma equivalente de enunciar el principio de correspondencia es:

“Al realizar el límite de grandes números cuánticos ( $n \rightarrow \infty$ ) en un problema cuántico, los resultados cuánticos deben coincidir con los resultados clásicos”.

El principio de correspondencia asegura que no haya contradicciones al aplicar la mecánica cuántica a problemas macroscópicos bien descritos por la mecánica clásica.

## 1.8 El átomo de hidrógeno.

A principios del siglo XX se afianzó la idea de que la materia macroscópica está en último término formada por átomos, principalmente a raíz de los trabajos de A. Einstein sobre el movimiento Browniano. Posteriormente Rutherford (1911) logró determinar la naturaleza de estos átomos como resultado de sus experimentos de dispersión de partículas por delgadas láminas de oro. En efecto, al combinar sus resultados con experimentos anteriores sobre la carga y masa de un electrón (Millikan, 1910, Thomson y Zeeman 1897) emergió la siguiente imagen de un átomo: su centro (núcleo) tiene una dimensión del orden de  $10^{-12}$  [cm], estando allí concentrada la mayor parte de su masa (más del 99.9% de ella). La carga nuclear es positiva y a su alrededor giran electrones de carga negativa, en órbitas de unos  $10^{-8}$  [cm] de diámetro (*i.e.* unas 10.000 veces mayor que el diámetro nuclear); en total la carga atómica es neutra.

La imagen anterior estaba en principio de acuerdo con las leyes de Newton (esto al hacer una analogía entre átomo y el sistema planetario), pero no así con las ecuaciones de Maxwell, según las cuales una carga en movimiento circular debería irradiar luz (visible o no visible), perdiendo constantemente energía hasta precipitarse al núcleo. La luz irradiada no formaría un espectro discreto (como el observado en los tubos de descarga), sino que uno continuo, es decir, el átomo de Rutherford no explica ni la estabilidad atómica ni su espectro de emisión.

Evaluemos el tiempo que tarda un electrón para precipitarse al núcleo. La potencia irradiada viene dada por

$$\frac{dW}{dr} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} a^2, \quad (1.12)$$

(ver Jackson, ec. 14.22), donde  $a$  es la aceleración.

La fuerza centrífuga y la fuerza Coulombiana atractiva vienen dadas por

$$F_{cent} = \frac{mv^2}{r}, \quad F_{coul} = -\frac{e^2}{r^2}.$$

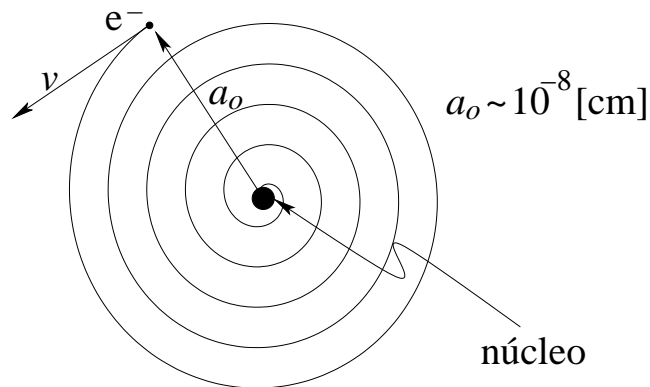


Figura 1.14: Electrón precipitándose al núcleo.

Al imponer

$$F_{cent} + F_{coul} = 0 ,$$

se concluye

$$mv^2 = \frac{e^2}{r} . \quad (1.13)$$

La aceleración  $a$  viene dada por

$$a = \frac{v^2}{r} . \quad (1.14)$$

De (1.12), (1.13) y (1.14) se concluye que

$$\frac{dW}{dt} = \frac{2e^6}{3c^3m^2r^4} , \quad (\text{Potencia irradiada}). \quad (1.15)$$

Por otra parte, la energía del sistema es

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{r} = -\frac{e^2}{2r} = -\frac{1}{2}mv^2 , \quad (1.16)$$

luego

$$\frac{dE}{dt} = \frac{e^2}{2r^2} \cdot \frac{dr}{dt} , \quad (\text{Variación de la energía del sistema}) \quad (1.17)$$

Como, por conservación de energía,

$$\frac{dW}{dt} + \frac{dE}{dt} = 0 , \quad (1.18)$$

se obtiene, sustituyendo (1.15) y (1.17) en (1.18) que

$$dt = -\frac{3c^3m^2r^2}{4e^4} dr .$$

Finalmente integrando, el tiempo de “decaimiento” resulta ser

$$\int_{t(r=a_0)}^{t(r=0)} dt = \frac{3}{8} \frac{c^2 m^2}{e^4} r^3 \Big|_{r=a_0}^{r=0} = \frac{3c^2 m^2 a_0^3}{8e^4} \sim 10^{-5} \text{ [s]} .$$

Es interesante hacer notar que la vida media del primer estado excitado en el átomo de hidrógeno es aproximadamente igual a la vida media clásica (principio de correspondencia). Los problemas planteados por el átomo de Rutherford se pueden resolver introduciendo las

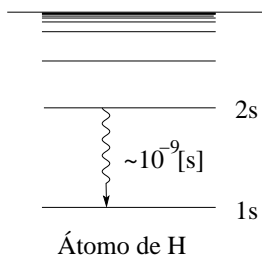


Figura 1.15: Vida media del primer estado excitado del Hidrógeno.

siguientes hipótesis (átomo de Bohr):

1. Existen órbitas ( $n = 1, 2, 3, 4, \dots$ ) que no irradian.
2. El átomo irradia cuando el electrón cambia de una órbita a otra. La frecuencia de la radiación en tal caso viene dada por:

$$\begin{aligned} \hbar\omega &= \Delta E , && \text{diferencia de energía entre las 2 órbitas.} \\ &= E_n - E_{n-1} , && \text{para órbitas contiguas.} \end{aligned}$$

3. Para  $n \rightarrow \infty$  la frecuencia de la radiación debe coincidir con la clásica, (Principio de correspondencia), o sea

$$\begin{array}{ccc} \hbar\omega = E_n - E_{n-1} = \frac{E_n - E_{n-1}}{n - (n-1)} & \xrightarrow{n \rightarrow \infty} & \frac{dE(n)}{dn} = \hbar\bar{\omega} \\ \uparrow & & \uparrow \\ \text{frecuencia de luz emitida} & & \text{frecuencia del electrón orbitado} \end{array}$$

$$\bar{\omega} = \frac{v}{r} , \quad \text{frecuencia del electrón orbitando.}$$

Usando (1.13) esta ecuación se puede escribir de la forma

$$\bar{\omega} = \frac{mv^3}{e^2} . \tag{1.19}$$

Se tiene

$$\frac{dE(n)}{dn} = \hbar\bar{\omega} = \frac{\hbar m v^3}{e^2} = \frac{\hbar m}{e^2} \sqrt{\frac{8}{m^3}} E^{3/2},$$

donde la primera igualdad corresponde al principio de correspondencia, la segunda igualdad a la ecuación (1.19) y la última a la ecuación (1.16). Despejando

$$E^{-3/2} dE = -\frac{\hbar^2}{e^2} \sqrt{\frac{8}{m}} dn.$$

Integrando se obtiene

$$-2E^{-1/2} = \frac{\hbar^2}{e^2} \sqrt{\frac{8}{m}} n,$$

o sea

$$E_n = -\left(\frac{e^4 m}{2\hbar^2}\right) \frac{1}{n^2} = -\frac{R}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots, \quad (1.20)$$

donde  $R$ , la constante de Rydberg es

$$R \equiv \frac{e^4 m}{2\hbar^2} = \frac{e^2}{2a_o} \approx 13.6 \text{ [eV]}. \quad (1.21)$$

En (1.21)  $a_o$  es el radio de Bohr y viene dado por

$$a_o \equiv \frac{\hbar^2}{m} \approx 0.53 \times 10^{-8} \text{ [cm]}.$$

Los radios de las distintas órbitas de Bohr vienen dados por

$$r_n = -\frac{e^2}{2E_n} = a_o n^2.$$

(Si el núcleo tiene carga  $Ze$  hay que reemplazar en todas las ecuaciones  $e^2$  por  $Ze^2$ ).

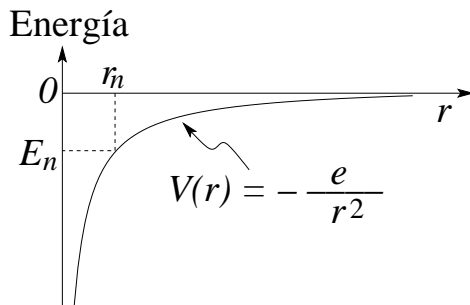


Figura 1.16: Radio clásico de una órbita de Bohr.

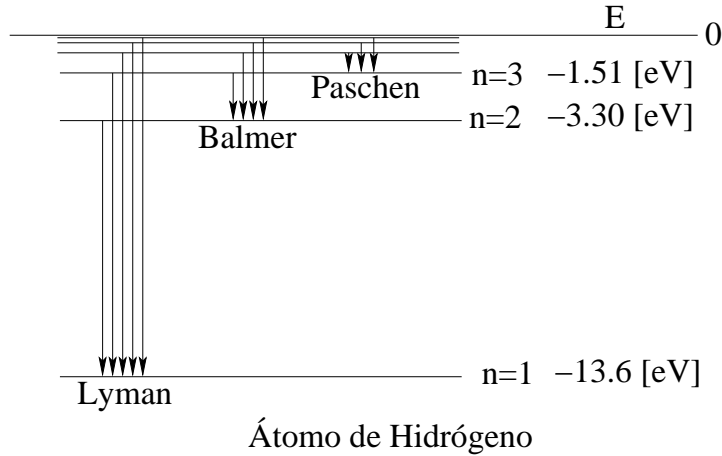


Figura 1.17: Átomo de hidrógeno, transiciones entre niveles

Al cambiar un electrón de la órbita con número cuántico  $n_2$  a la órbita  $n_1$ , la energía del fotón asociado a la radiación electromagnética es

$$\Delta E = \hbar\omega = R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Evaluemos el momento angular para las distintas órbitas:

$$\begin{aligned} L = rp &= \frac{e^2}{mv^2}mv = \frac{e^2}{v} = \sqrt{\frac{-m}{2E}}e^2 \\ &= \sqrt{\frac{\hbar^2 n^2}{e^4}}e^2 = n\hbar, \end{aligned}$$

o sea, obtenemos el siguiente sorprendente resultado

$$\boxed{L_n = n\hbar, \quad \text{Cuantización del momento angular.}} \quad (1.22)$$

En lugar de la hipótesis iii, también se podría haber postulado (1.22) para encontrar la ecuación (1.20) para la energía de los estados excitados del átomo de hidrógeno.

Hacemos notar que el resultado (1.22) resulta totalmente concordante con la hipótesis de De Broglie sobre la naturaleza ondulatoria de los electrones. En efecto, usando la hipótesis de De Broglie (1.11) se obtiene

$$r \frac{h}{\lambda} = rp = L = n\hbar = n \frac{h}{2\pi},$$

o sea

$$n = \frac{2\pi r}{\lambda} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.23)$$

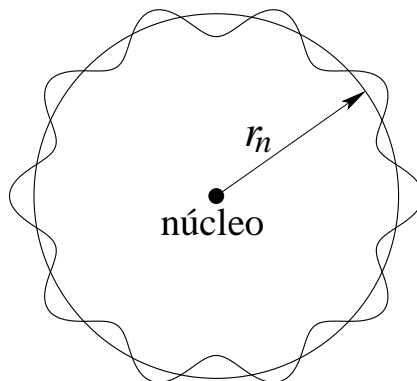


Figura 1.18: Órbita electrónica como onda estacionaria

Es decir, la longitud de onda de De Broglie asociada al fotón está contenida un número entero de veces en la longitud de la órbita electrónica. Lo anterior es una condición necesaria para ondas estacionarias. De no ser así, la onda auto-interferiría aniquilándose. Resulta bastante difícil compatibilizar la idea de partícula en una órbita definida con la de onda. Con el establecimiento definitivo de la Mecánica Cuántica (1924-1926) esta dificultad desapareció pues se abandonó completamente la idea de “trayectoria del electrón” u “órbita electrónica”.

## 1.9 La regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld.

El razonamiento que nos llevó a la ecuación (1.23) lo podemos generalizar para cualquier movimiento periódico.

El número de ondas a lo largo de una trayectoria periódica viene dado por la integral

$$\oint \frac{dq}{\lambda(q)},$$

donde  $q$  es la coordenada que mide la distancia a lo largo de la trayectoria. Para que la onda auto-interfiera constructivamente se debe tener que el número de ondas a lo largo de la trayectoria sea entero, es decir

$$\oint \frac{dq}{\lambda(q)} = n \quad \text{con } n \in \mathbb{N}.$$

Usando la relación de De Broglie (1.11) se obtiene la así llamada regla de cuantificación de Bohr-Sommerfeld.

$$\boxed{\oint p(q) dq = nh.} \quad (1.24)$$

Poniendo

$$dq = v dt \quad p = mv.$$

La ecuación (1.24) queda de la forma

$$\oint p(q) dq = \oint mv^2 dt = 2 \oint T dt \equiv 2\tau \langle T \rangle = nh , \quad (1.25)$$

donde  $\langle \dots \rangle$  representa al promedio temporal,  $T = \frac{1}{2}mv^2$  es la energía cinética y  $\tau$  es el período del movimiento.

Si el potencial es del tipo  $V(q) = Aq^S$  (con  $A$  y  $S$  constantes), podemos usar el teorema del virial (ver por ejemplo Berkeley Physics Course I, pág. 202 y 296). Según el teorema del virial, para movimientos en un potencial del tipo arriba mencionado, se tiene que:

$$\langle T \rangle = \frac{S}{S+2} E , \quad (1.26)$$

donde  $E$  es la energía total.

A partir de (1.24), (1.25) y (1.26) se deduce que

$$2\tau \frac{S}{S+2} E = nh ,$$

o sea

$$E_n = h\nu_{E_n} \left( \frac{S+2}{2S} \right)^n . \quad (1.27)$$

En (1.27)  $\nu_{E_n}$  es la frecuencia de la oscilación que está relacionada con el período por la ecuación

$$\nu_{E_n} = \frac{1}{\tau} .$$

Aplicamos estas últimas relaciones a algunos casos particulares:

### 1. Oscilador armónico.

El potencial para el oscilador armónico es

$$V(q) = \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 ,$$

es decir en este caso  $S = 2$ . La frecuencia del oscilador armónico es independiente de la energía. Usando (1.27) con  $S = 2$  se obtiene la forma en que están cuantizados los niveles de energía de un oscilador armónico:

$$E_n = nh\nu = n\hbar\omega ,$$

resultado que esta de acuerdo con la hipótesis de Planck. Este resultado, de la mecánica cuántica antigua, difiere del obtenido rigurosamente dentro de la Mecánica Cuántica sólo en la energía del punto cero, es decir un término aditivo adicional de tamaño  $\hbar\omega/2$ .

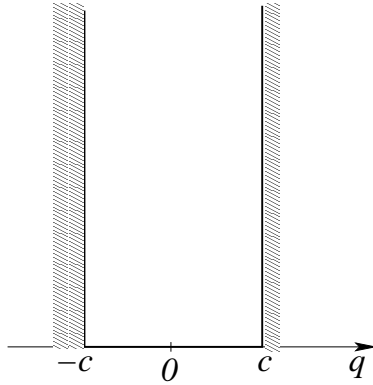


Figura 1.19: Potencial de pozo.

## 2. Partícula en una caja.

Consideremos el potencial

$$V(q) = \begin{cases} 0 & |q| \leq c \\ \infty & |q| > c \end{cases} = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{q}{c}\right)^n .$$

En este caso  $S = n$  y  $n \rightarrow \infty$ .

Para la frecuencia se obtiene en este caso (usando un argumento puramente clásico) que:

$$\tau = \frac{1}{\nu_E} = \frac{4c}{v} = 4c\sqrt{\frac{m}{2E}} . \quad (1.28)$$

Usando (1.27) con  $S \rightarrow +\infty$  y sustituyendo (1.28) se obtiene

$$E_n = \frac{h\nu_E}{2}n = \frac{hn}{8c}\sqrt{\frac{2E_n}{m}} .$$

Despejando  $E_n$  de esta última ecuación se obtiene finalmente para los niveles de energía cuantizados la ecuación

$$E_n = \frac{h^2}{32mc^2}n^2 = \frac{\pi^2\hbar^2}{8mc^2}n^2 ,$$

resultado que, como veremos más adelante, coincide con el obtenido rigurosamente dentro de la Mecánica Cuántica.

## 3. El átomo de Hidrógeno.

Para el átomo de hidrógeno el potencial es

$$V(r) = -\frac{e^2Z}{r} ,$$



en este caso  $S = -1$ .

Del teorema del virial (1.26) con  $S = -1$  se obtiene que

$$\langle T \rangle = -E \quad (1.29)$$

Consideremos las partes radial y angular separadamente:

$$\langle T \rangle = \langle T_r \rangle + \langle T_\theta \rangle . \quad (1.30)$$

Para  $\langle T_\theta \rangle$  se tiene que

$$\langle T_\theta \rangle = \frac{1}{2} m \langle (r\dot{\theta})^2 \rangle = \frac{L \langle \dot{\theta} \rangle}{2} , \quad (1.31)$$

mientras que  $\langle T_r \rangle$  se obtiene usando (1.25) para la parte radial:

$$\langle T_r \rangle = \frac{n\hbar}{2\tau} = \frac{h\nu_E n}{2} . \quad (1.32)$$

Como ya sabemos el momento angular viene cuantizado por la ecuación:

$$L = \ell\hbar; \quad \ell = 0, 1, \dots . \quad (1.33)$$

También se tiene que

$$\langle \dot{\theta} \rangle = \omega_E = 2\pi\nu_E , \quad (1.34)$$

luego a partir de (1.31), (1.33) y (1.34) se obtiene

$$\langle T_\theta \rangle = \frac{\hbar\ell 2\pi\nu_E}{2} = \frac{h\ell\nu_E}{2} . \quad (1.35)$$

De las ecuaciones (1.29), (1.30), (1.32) y (1.35) resulta

$$E_N = -\frac{h\nu_E}{2}(n + \ell) = -\frac{h\nu_E}{2}N , \quad (1.36)$$

donde

$$N \equiv n + \ell \quad \ell = 0, 1, \dots , \quad n = 1, 2, \dots .$$

Falta evaluar  $\nu_E$ . El período  $\tau = 1/\nu_E$  se obtiene de la tercera ley de Kepler:

$$\tau^2 = \frac{1}{\nu_E^2} = \frac{m^2\pi^2}{2Ze^2} R^3 , \quad (1.37)$$

donde  $R$  es el semieje mayor de las trayectorias elípticas. Además, se sabe que para el potencial coulombiano, el semieje mayor  $R$  y la energía  $E$  están relacionadas por

$$E = -\frac{Ze^2}{R} , \quad (1.38)$$

luego, de (1.36), usando (1.37) y (1.38) se obtiene

$$E^2 = \frac{h^2 N^2}{4\tau^2} = \frac{h^2 N^2}{4} \frac{2Ze^2}{m\pi^2 R^3},$$

o bien

$$E = -\frac{mZ^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{N^2}.$$

El espectro de energía que se obtiene es idéntico al que se obtuvo anteriormente pero el significado de los números cuánticos es diferente.

N	n	$\ell$	degeneración	
1	1	0	1	
2	1	1	3	} 4
	2	0	1	
3	1	2	5	} 9
	2	1	3	
	3	0	1	
$\vdots$				

Como se desprende de la tabla, en la presente solución se puede tener  $\ell = 0$ , más aún, los niveles excitados del átomo de hidrógeno son degenerados teniendo los estados varios momentos angulares orbitales distintos. Esta solución del problema del átomo de hidrógeno se asejema bastante más a la solución cuántica rigurosa, que la solución presentada en la sección anterior.

(Ver también L. Gottdiener, Am. J. Phys. 45, 771, (1977)).

## 1.10 El principio de incerteza.

Un concepto muy importante de la Mecánica Cuántica es el de “observables complementarios”; esto se refiere a dos parámetros físicos tales que la medición del primero altera el resultado de una medición simultánea del segundo.

Un caso típico de observables complementarios son la posición y el momento lineal en una determinada dirección. Para ilustrar esto consideremos una rendija de diámetro  $d$  sobre la que incide un fotón con momento lineal  $p$  en la dirección  $x$ .

Al llegar a la rendija la “onda plana” asociada al fotón, esta se difracta. Como es bien sabido de la óptica física, la dirección de propagación de la onda no es estrictamente en la dirección  $x$  sino que se difracta en un ángulo  $\theta$  dado por

$$\frac{\lambda}{2d} = \text{sen } \theta \quad \left( \text{con } \lambda = \frac{h}{p} \right).$$

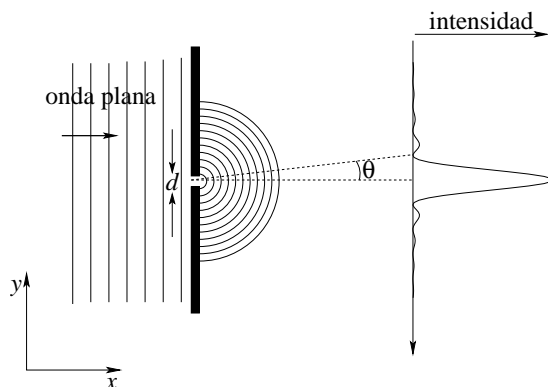


Figura 1.20: Experimento de difracción.

El hecho que un fotón particular cruce la rendija representa una medición de la coordenada  $y$  del fotón, aunque con una imprecisión  $d$ , *i.e.* el error  $\Delta y$  en la determinación de  $y$  es

$$\Delta y = \frac{d}{2} . \quad (1.39)$$

Por otra parte el momento en la dirección  $\hat{y}$  tampoco está bien definido, en vez de ser nulo (como antes de traspasar la rendija), ahora está acotado aproximadamente por los valores  $p_y = \pm p \text{ sen } \theta$ , *i.e.*

$$\Delta p_y \approx p \text{ sen } \theta . \quad (1.40)$$

De (1.39) y (1.40) se obtiene

$$\Delta y \Delta p_y \approx \frac{d}{2} p \text{ sen } \theta = \frac{d}{2\lambda} h \text{ sen } \theta = \frac{h}{4} .$$

Siguiendo un camino más riguroso se obtiene (como veremos más adelante) que siempre se cumple

$$\boxed{\Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}} . \quad (1.41)$$

Esta relación se conoce como el principio de incerteza de Heisenberg (1926). Su aceptación elimina automáticamente el concepto de “trayectoria” en Mecánica Cuántica: sólo se puede conocer la posición y el momento de una partícula en una dirección cualquiera con una precisión máxima acotada por (1.41). Tal indeterminación no es un problema de error experimental, sino que, de acuerdo al formalismo de la Mecánica Cuántica, es una indeterminación esencial.

Como ilustración consideremos:

1. Un electrón localizado en una zona de dimensiones atómicas.

En este caso

$$\Delta x \sim a_o \sim 0.5 \times 10^{-8} \text{ [cm]} ,$$

luego

$$\begin{aligned}\Delta v &= \frac{\Delta p}{m_e} = \mathcal{O}\left(\frac{\hbar}{\Delta x m_e}\right) = \mathcal{O}\left(\frac{\hbar}{a_0 m_e}\right) \\ &= \mathcal{O}\left(\frac{e^2}{\hbar}\right) = \mathcal{O}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right) \sim 2000 \left[\frac{\text{km}}{\text{s}}\right],\end{aligned}$$

lo que corresponde aproximadamente a la velocidad promedio de un electrón atómico.

2. Un protón localizado en una zona de dimensiones atómicas.

En este caso

$$\Delta v = \mathcal{O}\left(\frac{\hbar}{a_0 m_p}\right) \sim 1 \left[\frac{\text{km}}{\text{s}}\right].$$

Esta velocidad es del orden de la velocidad térmica para el hidrógeno, obtenida de la “Teoría cinética de gases” para la temperatura ambiente.

Otra forma de visualizar el origen del principio de incerteza es el siguiente: Consideremos una partícula libre (en una dimensión) con un momento  $p_1$  bien definido. De acuerdo a la hipótesis de de Broglie, a tal partícula se le asocia una onda (plana) de longitud de onda  $\lambda_1 = h/p_1$  bien definida. Es claro que tal onda no está localizada. Para localizar la partícula en una región del espacio  $x$  hay que formar, como es bien sabido, un paquete de ondas, es decir, hay que superponer ondas con distinto momento lineal.

Consideremos la suma de 2 ondas planas

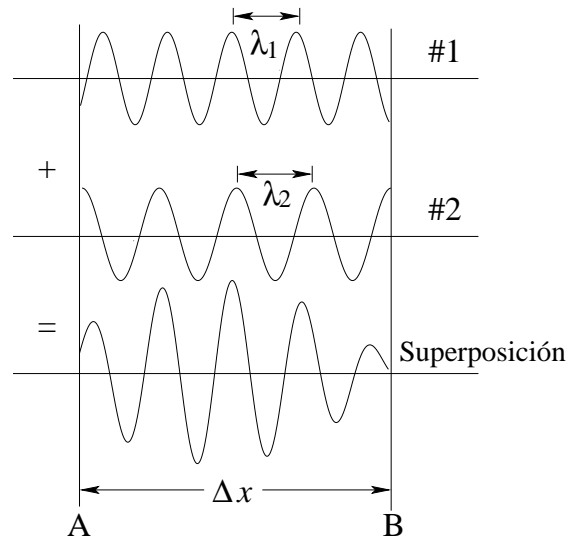


Figura 1.21: Superposición de ondas.

Para obtener una interferencia destructiva en los extremos  $AB$  es necesario que el número de ondas de las 2 ondas difiera en 1 en el intervalo  $\Delta x$ , o sea

$$\left|\frac{\Delta x}{\lambda_1} - \frac{\Delta x}{\lambda_2}\right| \sim 1,$$

es decir

$$\Delta x \cdot \Delta \left( \frac{1}{\lambda} \right) = \frac{1}{h} \Delta x \Delta p \sim 1 ,$$

de donde nuevamente se deduce que

$$\Delta x \Delta p \sim h .$$

El principio de Incerteza no sólo rige para la coordenada espacial y el momento lineal respectivo, sino que se cumple para cualquier par de coordenadas generalizadas canónicamente conjugadas, por ejemplo:

$$\Delta L \Delta \theta \geq \frac{\hbar}{2} , \quad \Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2} , \quad \Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2} , \quad \text{etc.}$$

Consideremos un observador situado en un lugar fijo que “ve” pasar un paquete de onda. Para este paquete se tiene que  $\Delta x \Delta p_x \sim \hbar$ . Por otra parte

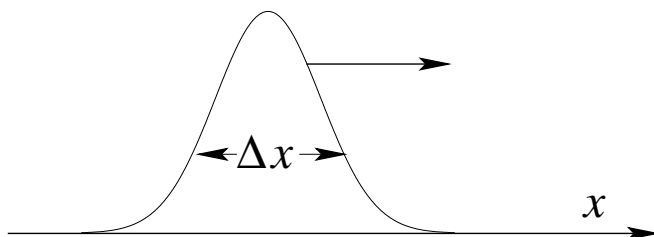


Figura 1.22: Paquete de ondas.

$$E = \frac{p_o^2}{2m} ,$$

o sea

$$\Delta E = \frac{p_x \Delta p_x}{m} = v_x \Delta p_x . \quad (1.42)$$

El observador está inseguro del instante en que pasa el paquete en la cantidad

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{v_x} . \quad (1.43)$$

De (1.42) y (1.43) se obtiene

$$\Delta E \Delta t = \Delta x \Delta p_x \sim \hbar . \quad (1.44)$$

Otra circunstancia en que interviene la relación (1.44) es en el decaimiento de estados cuasiestacionarios.

Tanto más demora el sistema en decaer tanto menor es  $\Delta E$ . La razón de esto reside en que si el sistema se encuentra poco tiempo en el pozo no es necesario que la regla de cuantificación de Bohr-Sommerfeld se cumpla con toda precisión. Si el sistema queda durante un tiempo  $\tau$  en el pozo y el período del sistema en el pozo es  $T$ , entonces lo único que debe satisfacerse es que en la  $\tau/T$  pasadas, la onda no se desincronice en más de  $\tau/2$ . Luego, tanto mayor es  $\tau$ , tanto menor es la desincronización de la onda dentro del pozo.

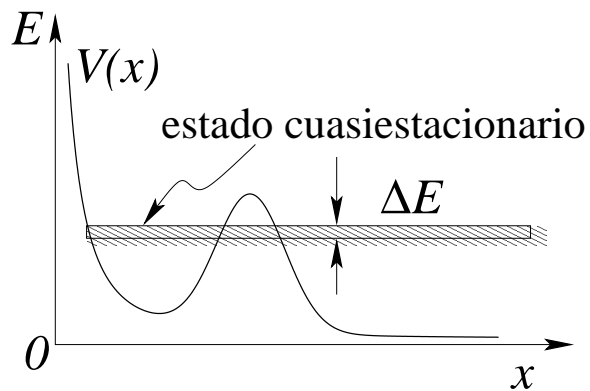


Figura 1.23: Estados cuasiestacionarios.

## 1.11 Problemas.

1. En la colisión de Compton, demuestre que la velocidad del centro de masa  $v$  viene dada por

$$\frac{c}{v} = 1 + \frac{mc^2}{\hbar\omega}.$$

2. Colisión de Compton, demuestre la ecuación (1.9)

$$\Delta\lambda = \lambda_c(1 - \cos\theta), \quad (1.9)$$

usando directamente la conservación de la energía y el momento lineal.



# Capítulo 2

## Introducción Matemática.

En este capítulo se recopilarán algunos resultados matemáticos – sobre todo del álgebra lineal – que serán de mucha utilidad para el desarrollo de estos apuntes. En la mayoría de los casos no demostraremos los resultados aquí enunciados, suponiéndose que el lector ya los conoce de los cursos de matemáticas.

### 2.1 Espacio vectorial sobre el cuerpo complejo $\mathbb{C}$ .

Consideremos un conjunto de elementos

$$\mathcal{H} \equiv \{|x\rangle, |y\rangle, \dots\} .$$

Supongamos que existen dos leyes de composición tales que:

- i) A todo par  $|x\rangle \in \mathcal{H}$ ,  $|y\rangle \in \mathcal{H}$ , la primera ley de composición (para la cual usaremos el símbolo  $+$ ), asigna un objeto  $(|x\rangle + |y\rangle) \in \mathcal{H}$ , y se cumple:

$$(a) \quad |x\rangle + |y\rangle = |y\rangle + |x\rangle \quad (\text{Ley conmutativa}).$$

$$(b) \quad |x\rangle + (|y\rangle + |z\rangle) = (|x\rangle + |y\rangle) + |z\rangle \quad (\text{Ley asociativa}).$$

- (c) Existe un elemento nulo  $|0\rangle \in \mathcal{H}$ , tal que

$$|x\rangle + |0\rangle = |x\rangle .$$

- (d) Todo  $|x\rangle$  puede ponerse en correspondencia con un elemento de  $\mathcal{H}$ , que denotaremos por  $| -x\rangle$ , denominado opuesto de  $|x\rangle$ , tal que

$$|x\rangle + | -x\rangle = |0\rangle .$$

- ii) A todo elemento  $|x\rangle \in \mathcal{H}$  y a todo número  $\alpha \in \mathbb{C}$  la segunda ley de composición (para la cual usaremos el símbolo  $\cdot$ ), asigna un objeto  $\alpha \cdot |x\rangle \in \mathcal{H}$ , y se cumple:

$$(a) \quad 1 \cdot |x\rangle = |x\rangle .$$

$$(b) \quad \alpha \cdot (\beta \cdot |x\rangle) = (\alpha\beta) \cdot |x\rangle \quad (\text{Ley asociativa, } \beta \in \mathbb{C}).$$



- (c)  $(\alpha + \beta) \cdot |x\rangle = \alpha \cdot |x\rangle + \beta \cdot |x\rangle$  (Ley distributiva para la adición de escalares).  
 (d)  $\alpha \cdot (|x\rangle + |y\rangle) = \alpha \cdot |x\rangle + \alpha \cdot |y\rangle$  (Ley distributiva).

Diremos en tal caso que  $\mathcal{H}$  es un espacio vectorial sobre el cuerpo de los números complejos  $\mathbb{C}$ . Es inmediato ver que

$$0 \cdot |x\rangle = |0\rangle \quad \text{y} \quad (-1) \cdot |x\rangle = -|x\rangle = |-x\rangle .$$

Es usual ignorar el símbolo  $\cdot$  para la multiplicación por un escalar.

## 2.2 Operadores Lineales.

$\check{A}$  es un operador lineal en  $\mathcal{H}$  si es una aplicación de  $\mathcal{H}$  en  $\mathcal{H}$  que cumple con

- i)  $\check{A}|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  ,  $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$  ,  
 ii)  $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$  y  $|x\rangle, |y\rangle \in \mathcal{H}$  ,  $\check{A}(\alpha|x\rangle + \beta|y\rangle) = \alpha\check{A}|x\rangle + \beta\check{A}|y\rangle$  Linealidad.

## 2.3 Vectores duales y producto interno.

A cada vector  $|x\rangle \in \mathcal{H}$  le asociamos un vector dual  $\{|x\rangle\}^\dagger \equiv \langle x|$ . Esta asociación define un espacio dual de  $\mathcal{H}$ , denotado por  $\mathcal{H}^\dagger$ , si tal asociación cumple con:

$$\{\alpha|x\rangle + \beta|y\rangle\}^\dagger = \alpha^*\langle x| + \beta^*\langle y| .$$

Introducimos, además, una aplicación de  $\mathcal{H}^\dagger \times \mathcal{H} \longrightarrow \mathbb{C}$ , un “producto interno” entre los elementos de  $\mathcal{H}$  y  $\mathcal{H}^\dagger$  por:

$$\langle x| \in \mathcal{H}^\dagger , |y\rangle \in \mathcal{H} \longrightarrow \langle x|y\rangle \in \mathbb{C} .$$

La aplicación  $\mathcal{H}^\dagger \times \mathcal{H} \longrightarrow \mathbb{C}$  cumple con las condiciones siguientes:

- i)  $(\alpha\langle x_1| + \beta\langle x_2|)|y\rangle = \alpha\langle x_1|y\rangle + \beta\langle x_2|y\rangle$ .  
 ii)  $\langle x|(\alpha|y_1\rangle + \beta|y_2\rangle) = \alpha\langle x|y_1\rangle + \beta\langle x|y_2\rangle$ .  
 iii)  $\langle x|x\rangle \geq 0$ .  
 iv)  $\langle x|x\rangle = 0$  si y sólo si  $|x\rangle = |0\rangle$ .

## 2.4 Base de un espacio vectorial.

Un conjunto de vectores  $\{|m_k\rangle\}$  de  $\mathcal{H}$  es una base de  $\mathcal{H}$  si  $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$ , existen coeficientes únicos  $C_k \in \mathbb{C}$ , tales que

$$|\psi\rangle = \sum_k C_k |m_k\rangle .$$

Como aquí se trabaja siempre en espacios con producto interno, se dispone de una métrica y luego de conceptos adecuados de convergencia e integración. Esto nos permite escribir sumas como la anterior aún en casos en que los  $C_k$  son no nulos para un conjunto infinito numerable de índices  $k$ . Siempre que se escriba una tal suma, se supondrá implícitamente que ésta converge.

El número de elementos de la base de  $\mathcal{H}$  se denomina la dimensión de  $\mathcal{H}$  o bien la cardinalidad de  $\mathcal{H}$ .

Sea  $\check{\mathbf{A}}$  una aplicación lineal de  $\mathcal{H}$  en  $\mathcal{H}$ . Al conocer el efecto de  $\check{\mathbf{A}}$  sobre los vectores de una base de  $\mathcal{H}$ , podemos determinar fácilmente el efecto de  $\check{\mathbf{A}}$  sobre cualquier vector  $|\psi\rangle$ . En efecto, sea

$$\check{\mathbf{A}}|m_k\rangle = \sum_{\ell} A_{\ell k} |m_{\ell}\rangle ,$$

y supongamos conocidos los coeficientes  $A_{\ell k}$ . Si  $|\psi\rangle = \sum_k C_k |m_k\rangle$ , se tiene

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{A}}|\psi\rangle &= \sum_k C_k \check{\mathbf{A}}|m_k\rangle = \sum_{\ell, k} C_k A_{\ell k} |m_{\ell}\rangle \\ &= \sum_{\ell} \left( \sum_k A_{\ell k} C_k \right) |m_{\ell}\rangle . \end{aligned}$$

Una base  $\{|m_k\rangle\}$  de  $\mathcal{H}$  es ortonormal si cumple con

$$\langle m_i | m_j \rangle = \delta_{ij} \quad i, j = 1, \dots, n ,$$

donde  $n$  es la dimensión del espacio  $\mathcal{H}$ .

En una base ortonormal  $\{|m_i\rangle\}$ , el producto interno o “producto punto” de los vectores

$$|x\rangle = \sum_i x_i |m_i\rangle , \quad |y\rangle = \sum_j y_j |m_j\rangle ,$$

puede expresarse como sigue:

$$\langle x | y \rangle = \sum_{ij} x_i^* y_j \langle m_i | m_j \rangle = \sum_{ij} x_i^* y_j \delta_{ij} ,$$

o sea,

$$\langle x | y \rangle = \sum_i x_i^* y_i .$$

De esta última ecuación se deduce inmediatamente que

$$\langle x | y \rangle = (\langle y | x \rangle)^* .$$

## 2.5 Espacios vectoriales de dimensión continua.

a dimensión de un espacio vectorial puede ser finita o infinita. En este último caso la dimensión puede ser numerable (en cuyo caso el índice  $k$  que rotula los vectores de una base es discreto) o no numerable (siendo el índice  $k$  que rotula un conjunto completo de vectores del espacio vectorial una variable continua).

Para un espacio de dimensión no numerable, las ideas anteriores deben generalizarse. En este caso la sumatoria debe reemplazarse por una integral, escribiéndose la expansión de un vector  $|\psi\rangle$  en la forma

$$|\psi\rangle = \int dk C(k) |m(k)\rangle .$$

A los valores que puede tomar el producto interno hay que agregarle el  $\infty$ . La ortonormalidad de un conjunto completo de vectores base de un espacio de dimensión continua queda expresada por

$$\langle m(k) | m(k') \rangle = \delta(k - k') ,$$

donde  $\delta$  es la “delta de Dirac” (ver sección siguiente).

Consideremos los dos vectores

$$|x\rangle = \int dk x(k) |m(k)\rangle , \quad |y\rangle = \int dk' y(k') |m(k')\rangle .$$

Si las funciones  $x(k)$  y  $y(k)$  son de cuadrado integrable, entonces es posible introducir una métrica. En tal caso el producto interno de los dos vectores queda expresado por

$$\begin{aligned} \langle x | y \rangle &= \int \int dk dk' x^*(k) y(k') \langle m(k) | m(k') \rangle \\ &= \int \int dk dk' x^*(k) y(k') \delta(k - k') , \end{aligned}$$

es decir,

$$\langle x | y \rangle = \int dk x^*(k) y(k) = (\langle y | x \rangle)^* .$$

Cuando un vector  $|x\rangle$  es no normalizable, impondremos al menos que  $|x(k)|$  sea acotado. Si bien este caso puede presentar dificultades formales, en lugar de presentar una teoría demasiado general que pueda sobrepasar el margen de interés físico, trataremos de resolverlas en la situación específica donde ellas surjan.

## 2.6 La $\delta$ de Dirac.

La  $\delta$  de Dirac no es una función en el sentido convencional, sino que está definida como una distribución. Esto significa que  $\delta(x)$  no viene definido por su valor en cada punto, sino que solamente por los valores de la integral

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \delta(x - t) dt ,$$

que se obtienen para un  $x$  arbitrario, cuando  $f(t)$  es cualquier función continua. La “función”  $\delta(x)$  se puede interpretar como el límite de una sucesión de funciones  $f_n(x)$ , con  $\int_{-\infty}^{\infty} dx |f_n(x)| < A$ , con  $A$  fijo, y que satisface

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} f_n(x - x') dx' = 1 ,$$

y que tienden a anularse en todo punto  $x$ , salvo para  $x = 0$ . Es fácil mostrar que tal “función” cumple con

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx' g(x') f_n(x - x') = g(x) .$$

Algunas sucesiones que generan a la  $\delta$  de Dirac son:

i)

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow \infty} \begin{cases} a/2 & |x| \leq 1/a \\ 0 & |x| > 1/a \end{cases} ,$$

ii)

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{n \rightarrow \infty} \left( \frac{\text{sen}(nx)}{x} \right) ,$$

iii)

$$\delta(x) = \frac{1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\epsilon}{\epsilon^2 + x^2} ,$$

iv)

$$\delta(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{\epsilon}} \exp\left(-\frac{x^2}{\epsilon}\right) .$$

Sea  $f(x)$  una función con derivada continua en  $x = x_o$ . Entonces algunas propiedades de la  $\delta$  de Dirac son:

i)  $\int_{+\infty}^{+\infty} \delta(x - x_o) f(x) dx = f(x_o)$ .

ii)  $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta'(x - x_o) f(x) dx = -f'(x_o)$ .

iii)  $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(n)}(x - x_o) f(x) dx = (-1)^n f^{(n)}(x_o)$ .

iv)  $\delta(x) = \delta(-x) = \delta^*(x)$ , o sea, la  $\delta$  de Dirac es par y real.

v)  $\delta(x) = 0$  en cada intervalo cerrado que no contenga el 0.

vi)  $f(x) \delta(x) = f(0) \delta(x)$ .

vii) Como caso particular de la propiedad anterior:  $x \delta(x) = 0$ .

$$\text{viii)} \quad \delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|}$$

ix)  $\delta(f(x)) = \sum_i \frac{\delta(x - x_i)}{|f'(x_i)|}$ , donde  $x_i$  son ceros simples de  $f$ , es decir,  $f(x_i) = 0 \forall i$ .

$$\text{x)} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - t) \delta(s - t) dt = \delta(x - s).$$

xi)  $\delta'(x) = -\delta'(-x)$ , la derivada de la  $\delta$  de Dirac es impar.

xii) Si  $\frac{f(x)}{x}$  es una función continua en  $x = 0$ , entonces

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta'(x) f(x) dx = - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x} \delta(x) f(x) dx ,$$

en tal caso se puede escribir

$$\delta'(x) = -\frac{1}{x} \delta(x) .$$

xiii)

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik(x-x_0)} dk .$$

Esta relación es delicada. Sólo tiene sentido si se usa en una integral y luego se intercambia el orden de integración ( o si se usa con un factor de convergencia, como por ejemplo,  $\exp(-|k|\eta)$  con  $\eta \rightarrow 0$ ).

xiv) Es cómodo imponer (y así se supondrá durante el curso) que

$$\int_0^{\infty} dx f(x) \delta(x) = \frac{1}{2} f(0) .$$

Algunas relaciones útiles de la  $\delta$  en tres dimensiones son:

$$\delta(\vec{r}) = \delta(x) \delta(y) \delta(z) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{ikr} d^3k .$$

$$\int \delta(\vec{r}) F(\vec{r}) d^3r = F(0) .$$

$$\delta(\vec{r}) = \frac{\delta(r)}{2\pi r^2} .$$

$$\delta(\vec{r}' - \vec{r}) = \frac{1}{r^2} \delta(\Omega - \Omega') \delta(r' - r) ,$$

donde

$$\delta(\Omega - \Omega') = \delta(\phi - \phi') \delta(\cos \theta - \cos \theta') = \frac{\delta(\phi - \phi') \delta(\theta - \theta')}{\text{sen } \theta} .$$

La integración de la variable radial, como es usual, se realiza partiendo de  $r=0$ .

## 2.7 Ortonormalización de una base de dimensión discreta.

Una vez definido el producto interno, una base discreta cualquiera puede ser ortonormalizada usando el método de Gram-Schmidt. Para ello se procede como sigue: Sea  $\{|m_i\rangle\}_i$  una base arbitraria. Comenzamos normalizando  $|m_1\rangle$ ,

$$|m_1\rangle \longrightarrow |\overline{m}_1\rangle = \frac{|m_1\rangle}{\sqrt{\langle m_1 | m_1 \rangle}} .$$

A continuación, se construye un vector  $|\widetilde{m}_2\rangle$ , que sea una combinación lineal de  $|m_1\rangle$  y  $|m_2\rangle$  y sea ortogonal a  $|\overline{m}_1\rangle$ . Es fácil mostrar que el vector

$$|\widetilde{m}_2\rangle = |m_2\rangle - \langle \overline{m}_1 | m_2 \rangle |\overline{m}_1\rangle ,$$

cumple con esos requerimientos. Normalizamos  $|\widetilde{m}_2\rangle$ ,

$$|\widetilde{m}_2\rangle \longrightarrow |\overline{m}_2\rangle = \frac{|\widetilde{m}_2\rangle}{\sqrt{\langle \widetilde{m}_2 | \widetilde{m}_2 \rangle}} .$$

Introducimos ahora  $|\overline{m}_3\rangle$  dado por

$$|\overline{m}_3\rangle = \text{Cte} \cdot [ |m_3\rangle - \langle \overline{m}_1 | m_3 \rangle |\overline{m}_1\rangle - \langle \overline{m}_2 | m_3 \rangle |\overline{m}_2\rangle ] .$$

Este vector es ortogonal a  $|\overline{m}_1\rangle$  y  $|\overline{m}_2\rangle$ , etc...

## 2.8 Norma.

La norma de un vector  $|x\rangle$  viene definida por

$$|x| \equiv \sqrt{\langle x | x \rangle} = \begin{cases} \sqrt{\sum_i |x_i|^2} & \text{caso discreto,} \\ \sqrt{\int dk |x(k)|^2} & \text{caso continuo.} \end{cases}$$

La norma de  $|x\rangle$  es siempre positiva o cero, lo último sólo si  $|x\rangle = |0\rangle$ .

## 2.9 Operadores de proyección $\check{\mathbf{P}}$ .

Consideremos un espacio  $\mathcal{H}$  provisto de una norma. Sea  $|m\rangle \in \mathcal{H}$  y  $\langle m' | \in \mathcal{H}^\dagger$ . Definamos el operador  $\check{\mathbf{P}} = |m\rangle\langle m'|$  como sigue:

$$\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}, \quad \check{\mathbf{P}} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H},$$

$$\check{\mathbf{P}}|\psi\rangle = \underbrace{\{|m\rangle\langle m'|\}}_{\text{operador}} \underbrace{|\psi\rangle}_{\in \mathcal{H}} \equiv \underbrace{|m\rangle}_{\in \mathcal{H}} \underbrace{\{\langle m' | \psi \rangle\}}_{\in \mathbb{C}} \in \mathcal{H} .$$

El operador  $|m\rangle\langle m'|$  es lineal. En efecto

$$\begin{aligned} |m\rangle\langle m'|(\alpha|\phi\rangle + \beta|\psi\rangle) &= (\alpha\langle m'| \phi\rangle + \beta\langle m'| \psi\rangle)|m\rangle \\ &= \alpha(|m\rangle\langle m'|)|\phi\rangle + \beta(|m\rangle\langle m'|)|\psi\rangle. \end{aligned}$$

Demostremos que cualquier operador lineal  $\tilde{\mathbf{A}}$  es una combinación lineal de operadores de proyección. Sea  $\tilde{\mathbf{A}}$  un operador lineal que sobre los vectores de una base ortonormal  $\{|m_k\rangle\}$  actúa de la siguiente forma:

$$\tilde{\mathbf{A}}|m_k\rangle = \sum_{\ell} A_{\ell k}|m_{\ell}\rangle,$$

entonces,  $\tilde{\mathbf{A}}$  se puede expresar en la forma

$$\tilde{\mathbf{A}} = \sum_{\ell j} A_{\ell j}|m_{\ell}\rangle\langle m_j|.$$

En efecto,

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{A}}|m_k\rangle &= \sum_{\ell j} A_{\ell j}|m_{\ell}\rangle\langle m_j|m_k\rangle \\ &= \sum_{\ell j} A_{\ell j}|m_{\ell}\rangle\delta_{jk} = \sum_{\ell} A_{\ell k}|m_{\ell}\rangle. \end{aligned}$$

Los conceptos aquí desarrollados se pueden extender (en la medida que las expresiones involucradas se mantengan con sentido) para casos en que los vectores de la base estén normalizados a la función  $\delta$  de Dirac.

## 2.10 El operador identidad.

Consideremos un vector  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  en la base ortonormal  $\{|m_k\rangle\}$ :

$$|\psi\rangle = \sum_k \psi_k|m_k\rangle. \quad (2.1)$$

Se tiene que

$$\langle m_{\ell}|\psi\rangle = \sum_k \psi_k\langle m_{\ell}|m_k\rangle = \sum_k \psi_k\delta_{\ell k} = \psi_{\ell},$$

o sea,

$$\psi_{\ell} = \langle m_{\ell}|\psi\rangle, \quad (2.2)$$

Reemplazando (2.2) en (2.1), se obtiene

$$\begin{aligned} |\psi\rangle &= \sum_k \underbrace{\langle m_k|\psi\rangle}_{\in\mathbb{C}} \underbrace{|m_k\rangle}_{\in\mathcal{H}} = \sum_k |m_k\rangle\langle m_k|\psi\rangle \\ &= \sum_k \underbrace{\{|m_k\rangle\langle m_k|\}}_{\text{operador}} \underbrace{|\psi\rangle}_{\in\mathcal{H}} \\ &= \left\{ \sum_k |m_k\rangle\langle m_k| \right\} |\psi\rangle = \tilde{\mathbf{I}}|\psi\rangle. \end{aligned}$$

Esto nos permite identificar

$$\boxed{\sum_k |m_k\rangle\langle m_k| = \mathbf{1} \quad \text{Operador identidad.}}$$

Esta última ecuación también se llama relación de completitud o de clausura y es válida al usar una base ortonormal completa.

Si la dimensión del espacio vectorial es continua, el operador identidad se escribe de la forma

$$\int dk |m(k)\rangle\langle m(k)| = \mathbf{1}.$$

## 2.11 Operadores unitarios.

Consideremos los operadores  $\check{U}$  que “preservan” el producto punto, es decir,  $\forall |\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$  cumplen con

$$\langle \psi | \phi \rangle = \langle \bar{\psi} | \bar{\phi} \rangle, \quad (2.3)$$

donde,

$$|\bar{\psi}\rangle = \check{U}|\psi\rangle \quad \text{y} \quad |\bar{\phi}\rangle = \check{U}|\phi\rangle.$$

En tal caso decimos que  $\check{U}$  es un operador unitario. A partir de lo anterior podemos concluir que los operadores unitarios transforman una base ortonormal en otra base ortonormal.

Sea  $\check{A}$  un operador y  $\langle \psi | \in \mathcal{H}^\dagger$ , definimos el vector dual  $\langle \psi | \check{A}$  por

$$\begin{aligned} \langle \psi | \check{A} &= \langle \psi | \left\{ \sum_{\ell_j} A_{\ell_j} |m_\ell\rangle\langle m_j| \right\} \\ &\equiv \sum_{\ell_j} \underbrace{A_{\ell_j}}_{\in \mathbb{C}} \underbrace{\{\langle \psi | m_\ell \rangle\}}_{\in \mathbb{C}} \underbrace{\langle m_j |}_{\in \mathcal{H}^\dagger}. \end{aligned}$$

Sea  $\check{A}$  un operador y  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  y evaluemos  $\{\check{A}|\psi\rangle\}^\dagger$ :

$$\begin{aligned} \{\check{A}|\psi\rangle\}^\dagger &= \left\{ \sum_{\ell_j} A_{\ell_j} |m_\ell\rangle \underbrace{\langle m_j | \psi \rangle}_{\in \mathbb{C}} \right\}^\dagger \\ &= \sum_{\ell_j} A_{\ell_j}^* \{ \langle m_j | \psi \rangle \}^* \langle m_\ell | \\ &= \sum_{\ell_j} A_{\ell_j}^* \langle \psi | m_j \rangle \langle m_\ell | \\ &= \langle \psi | \left\{ \sum_{\ell_j} A_{\ell_j}^* |m_j\rangle\langle m_\ell| \right\}, \end{aligned}$$



es decir,

$$\{\check{\mathbf{A}}|\psi\rangle\}^\dagger = \langle\psi|\check{\mathbf{A}}^\dagger,$$

donde

$$\check{\mathbf{A}}^\dagger = \left\{ \sum_{\ell j} A_{\ell j} |m_\ell\rangle\langle m_j| \right\}^\dagger \equiv \sum_{\ell j} A_{\ell j}^* |m_j\rangle\langle m_\ell|.$$

**Resumen** (del efecto de la operación  $\dagger$ ):

- i)  $\{|\psi\rangle\}^\dagger = \langle\psi|$ .
- ii)  $\{\langle\psi|\}^\dagger = |\psi\rangle$ .
- iii)  $\{|\phi\rangle\langle\psi|\}^\dagger = |\psi\rangle\langle\phi|$ .
- iv)  $\{\langle\phi|\psi\rangle\}^\dagger = \{\langle\phi|\psi\rangle\}^* = \langle\psi|\phi\rangle$ .
- v)  $\{\check{\mathbf{A}}^\dagger\}^\dagger = \check{\mathbf{A}}$ .

Consideremos ahora la expresión  $\langle\psi|\{\check{\mathbf{A}}|\phi\rangle\}$ . Tenemos

$$\begin{aligned} \underbrace{\langle\psi|}_{\in\mathcal{H}^\dagger} \underbrace{\{\check{\mathbf{A}}|\phi\rangle\}}_{\in\mathcal{H}} &= \langle\psi| \left[ \sum_{ij} A_{ij} |m_i\rangle\langle m_j| \right] |\phi\rangle \\ &= \underbrace{\langle\psi|}_{\in\mathcal{H}^\dagger} \left[ \sum_{ij} \underbrace{A_{ij}}_{\in\mathbb{C}} \underbrace{|m_i\rangle}_{\in\mathcal{H}} \underbrace{\langle m_j|\phi\rangle}_{\in\mathbb{C}} \right] = \sum_{ij} A_{ij} \langle\psi|m_i\rangle\langle m_j|\phi\rangle \\ &= \left\{ \sum_{ij} A_{ij} \langle\psi|m_i\rangle\langle m_j| \right\} |\phi\rangle \\ &= \left\{ \langle\psi| \left( \sum_{ij} A_{ij} |m_i\rangle\langle m_j| \right) \right\} |\phi\rangle = \{ \langle\psi|\check{\mathbf{A}} \} |\phi\rangle, \end{aligned}$$

luego

$$\langle\psi|\{\check{\mathbf{A}}|\phi\rangle\} = \{ \langle\psi|\check{\mathbf{A}} \} |\phi\rangle \equiv \langle\psi|\check{\mathbf{A}}|\phi\rangle.$$

El trabajo recién realizado muestra las distintas posibilidades de la notación que se está empleando. Esta poderosa notación, que no presenta ambigüedades, fue introducida en la mecánica cuántica por Paul Dirac.

Evaluemos  $\langle m_i|\check{\mathbf{A}}|m_j\rangle$ . Tenemos

$$\begin{aligned} \langle m_i|\check{\mathbf{A}}|m_j\rangle &= \langle m_i| \left( \sum_{\ell k} A_{\ell k} |m_\ell\rangle\langle m_k| \right) |m_j\rangle \\ &= \sum_{\ell k} A_{\ell k} \langle m_i|m_\ell\rangle\langle m_k|m_j\rangle = \sum_{\ell k} A_{\ell k} \delta_{i\ell} \delta_{kj}, \end{aligned}$$

finalmente,

$$\langle m_i | \check{\mathbf{A}} | m_j \rangle = A_{ij} .$$

Estas son las componentes de un operador en la base  $\{|m_i\rangle\}$ .

Expresemos ahora en componentes la acción de un operador sobre un vector:

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{A}}|\psi\rangle &= \check{\mathbf{I}} \cdot \check{\mathbf{A}} \cdot \check{\mathbf{I}}|\psi\rangle = \check{\mathbf{I}} \cdot \check{\mathbf{A}} \sum_{\ell} |m_{\ell}\rangle \langle m_{\ell} | \psi \rangle \\ &= \sum_{k\ell} |m_k\rangle \langle m_k | \check{\mathbf{A}} | m_{\ell} \rangle \psi_{\ell} = \sum_{k\ell} |m_k\rangle A_{k\ell} \psi_{\ell} \\ &= \sum_k |m_k\rangle \left( \sum_{\ell} A_{k\ell} \psi_{\ell} \right) . \end{aligned}$$

Note que la expresión en el último paréntesis no es otra cosa que un producto matricial.

Evaluemos  $(\langle \psi | \check{\mathbf{A}} | \phi \rangle)^*$ . Se tiene

$$\begin{aligned} (\langle \psi | \check{\mathbf{A}} | \phi \rangle)^* &= (\langle \psi | \{\check{\mathbf{A}} | \phi \rangle\})^* = \{\check{\mathbf{A}} | \phi \rangle\}^{\dagger} | \psi \rangle \\ &= \langle \phi | \check{\mathbf{A}}^{\dagger} | \psi \rangle , \end{aligned}$$

de lo cual concluimos

$$\langle \psi | \check{\mathbf{A}} | \phi \rangle^* = \langle \phi | \check{\mathbf{A}}^{\dagger} | \psi \rangle .$$

Usando esta relación se obtiene

$$A_{ij}^* = \langle m_i | \check{\mathbf{A}} | m_j \rangle^* = \langle m_j | \check{\mathbf{A}}^{\dagger} | m_i \rangle = (A^{\dagger})_{ji} ,$$

es decir,

$$\boxed{(A^{\dagger})_{ji} = A_{ij}^* .}$$

**Ejercicio:** (Problema 2-1) Sean  $\check{\mathbf{A}}$ ,  $\check{\mathbf{B}}$ ,  $\check{\mathbf{C}}$  tres operadores, demuestre que:

- i)  $(\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}})^{\dagger} = \check{\mathbf{B}}^{\dagger}\check{\mathbf{A}}^{\dagger}$ .
- ii)  $(\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}}\check{\mathbf{C}})^{\dagger} = \check{\mathbf{C}}^{\dagger}\check{\mathbf{B}}^{\dagger}\check{\mathbf{A}}^{\dagger}$ .

**Definición 2.1** Un operador  $\check{\mathbf{A}}$  es *autohermítico* si  $\check{\mathbf{A}}^{\dagger} = \check{\mathbf{A}}$ .

Usando componentes se tiene:

$$A_{ij}^* = (A^{\dagger})_{ji} = A_{ji} ,$$

es decir, un operador  $\check{\mathbf{A}}$  es autohermítico sólo si las componentes del operador en una base ortonormal cualquiera cumplen con

$$A_{ij}^* = A_{ji} .$$

Consideremos nuevamente un operador unitario  $\check{U}$  y una base ortonormal  $\{|m_i\rangle\}$ . Denotemos por  $|\bar{m}_i\rangle$  a los vectores que resultan al operar con el operador  $\check{U}$  sobre los vectores de la base, es decir,  $|\bar{m}_i\rangle \equiv \check{U}|m_i\rangle$ . Se tiene:

$$\begin{aligned}\delta_{ij} &= \langle m_i | m_j \rangle \stackrel{(2.3)}{=} \langle \bar{m}_i | \bar{m}_j \rangle \\ &= \{\check{U}|m_i\rangle\}^\dagger \{\check{U}|m_j\rangle\} = \{\langle m_i | \check{U}^\dagger\} \{\check{U}|m_j\rangle\} \\ &= \langle m_i | \check{U}^\dagger \check{U} | m_j \rangle ,\end{aligned}$$

luego,

$$\langle m_i | \check{U}^\dagger \check{U} | m_j \rangle = \delta_{ij} . \quad (2.4)$$

Por otra parte se tiene

$$\begin{aligned}\check{\mathbf{1}} &= \sum_i |m_i\rangle \langle m_i| = \sum_{ij} |m_i\rangle \langle m_i | m_j \rangle \langle m_j | \\ &= \sum_{ij} \delta_{ij} |m_i\rangle \langle m_j| .\end{aligned} \quad (2.5)$$

Reemplazando (2.4) en (2.5), se obtiene

$$\begin{aligned}\check{\mathbf{1}} &= \sum_{ij} |m_i\rangle \langle m_j| (\langle m_i | \check{U}^\dagger \check{U} | m_j \rangle) \\ &= \sum_{ij} |m_i\rangle \langle m_i | \check{U}^\dagger \check{U} | m_j \rangle \langle m_j | \\ &= \left( \sum_i |m_i\rangle \langle m_i| \right) \check{U}^\dagger \check{U} \left( \sum_j |m_j\rangle \langle m_j| \right) \\ &= \check{\mathbf{1}} \check{U}^\dagger \check{U} \check{\mathbf{1}} = \check{U}^\dagger \check{U} .\end{aligned}$$

Concluimos que el inverso  $\check{U}^{-1}$  de un operador unitario  $\check{U}$  es igual a su hermítico conjugado:

$$\check{U}^{-1} = \check{U}^\dagger . \quad (2.6)$$

Recíprocamente, si un operador satisface la relación (2.6), entonces  $\check{U}$  es unitario. En efecto, sea  $|\bar{\psi}\rangle = \check{U}|\psi\rangle$  y  $|\bar{\phi}\rangle = \check{U}|\phi\rangle$ , entonces

$$\langle \bar{\psi} | \bar{\phi} \rangle = \langle \psi | \check{U}^\dagger \check{U} | \phi \rangle = \langle \psi | \check{\mathbf{1}} | \phi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle .$$

## 2.12 Cambio de Base.

El poder de la notación de Dirac se pone de manifiesto al cambiar de base, proceso que en la notación habitual resulta a veces un poco confuso.

Sean  $\{|m_i\rangle\}_i$  y  $\{|t_k\rangle\}_k$  dos bases completas y ortonormales de  $\mathcal{H}$  y  $\check{\mathbf{A}}$  un operador. Entonces se tiene

$$\begin{aligned}\check{\mathbf{A}} &= \check{\mathbf{1}}\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{1}} = \sum_{ij} |m_i\rangle\langle m_i| \check{\mathbf{A}} |m_j\rangle\langle m_j| \\ &= \sum_{ij} |m_i\rangle ({}^m A)_{ij} \langle m_j|\end{aligned}$$

El superíndice  $m$  se usa para recordar que  $({}^m A)_{ij}$  son las componentes de  $\check{\mathbf{A}}$  en la base  $|m_i\rangle$ . Por otra parte,

$$\begin{aligned}\check{\mathbf{A}} &= \check{\mathbf{1}}\check{\mathbf{1}}\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{1}} \\ &= \sum_{ikjl} |t_k\rangle\langle t_k| m_i\rangle\langle m_i| \check{\mathbf{A}} |m_j\rangle\langle m_j| t_l\rangle\langle t_l| \\ &= \sum_{kl} |t_k\rangle \left\{ \sum_{ij} \langle t_k| m_i\rangle ({}^m \check{\mathbf{A}})_{ij} \langle m_j| t_l\rangle \right\} \langle t_l| \\ &= \sum_{kl} |t_k\rangle ({}^t \check{\mathbf{A}})_{kl} \langle t_l| ,\end{aligned}$$

lo que nos permite identificar

$$({}^t A)_{kl} = \sum_{ij} \langle t_k| m_i\rangle ({}^m A)_{ij} \langle m_j| t_l\rangle . \quad (2.7)$$

Analicemos ahora la forma del operador  $\check{\mathbf{U}}$  que realiza el cambio de base. Se tiene

$$\check{\mathbf{U}}|m_k\rangle = |t_k\rangle ,$$

por consiguiente

$$\check{\mathbf{U}}^{-1}|t_k\rangle = |m_k\rangle .$$

Por otra parte

$$\begin{aligned}\check{\mathbf{U}} &= \sum_{ki} |t_k\rangle\langle t_k| \check{\mathbf{U}} |m_i\rangle\langle m_i| \\ &= \sum_{k,i} |t_k\rangle\langle t_k| t_i\rangle\langle m_i| = \sum_{k,i} |t_k\rangle \delta_{ik} \langle m_i| ,\end{aligned}$$

por lo tanto,

$$\check{\mathbf{U}} = \sum_k |t_k\rangle\langle m_k| .$$

El “*ket*”  $|t_k\rangle$  crea un vector  $|t_k\rangle$  mientras que el “*bra*”  $\langle m_k|$  aniquila un vector  $|m_k\rangle$ . Análogamente

$$\check{\mathbf{U}}^{-1} = \sum_k |m_k\rangle\langle t_k| .$$

Adicionalmente, podemos escribir

$$\begin{aligned}\check{\mathbf{U}} &= \check{\mathbf{I}} \check{\mathbf{U}} = \sum_{jk} |m_j\rangle \langle m_j | t_k \rangle \langle m_k | = (\check{\mathbf{U}} \text{ en la base } \{|m_k\rangle\}) , \\ \check{\mathbf{U}} &= \check{\mathbf{U}} \check{\mathbf{I}} = \sum_{k\ell} |t_k\rangle \langle m_k | t_\ell \rangle \langle t_\ell | = (\check{\mathbf{U}} \text{ en la base } \{|t_\ell\rangle\}) .\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\check{\mathbf{U}}^{-1} &= \check{\mathbf{I}} \check{\mathbf{U}}^{-1} = \sum_{jk} |t_j\rangle \langle t_j | m_k \rangle \langle t_k | \\ \check{\mathbf{U}}^{-1} &= \check{\mathbf{U}}^{-1} \check{\mathbf{I}} = \sum_{jk} |m_j\rangle \langle t_j | m_k \rangle \langle m_k | .\end{aligned}$$

De las relaciones anteriores se deduce que

$$({}^m\check{\mathbf{U}})_{jk} = \langle m_j | t_k \rangle = ({}^t\check{\mathbf{U}})_{jk} = U_{jk} , \quad (2.8)$$

y

$$({}^m\check{\mathbf{U}}^{-1})_{jk} = \langle t_j | m_k \rangle = ({}^t\check{\mathbf{U}}^{-1})_{jk} = U_{jk}^{-1} = U_{kj}^* , \quad (2.9)$$

es decir, las componentes del operador unitario  $\check{\mathbf{U}}$  que realiza el cambio de base son las mismas en las dos bases.

Al reemplazar las ecuaciones (2.8) y (2.9) en (2.7) se obtiene

$$({}^t\check{\mathbf{A}})_{k\ell} = \sum_{ij} (\check{\mathbf{U}}^{-1})_{ki} ({}^m\check{\mathbf{A}})_{ij} (\check{\mathbf{U}})_{j\ell} ,$$

recuperando así un resultado conocido del Algebra Lineal.

## 2.13 Notación de Dirac y la notación convencional de matrices.

Consideremos, por simplicidad, un espacio vectorial de dimensión finita  $N$ . Sean los vectores  $\{|1\rangle, |2\rangle, \dots, |N\rangle\} = \{|i\rangle\}$ ,  $i = 1, \dots, N$ , una base ortonormal. Como ya hemos visto, un operador  $\check{\mathbf{A}}$  se puede expresar de la forma

$$\check{\mathbf{A}} = \sum_{ij} a_{ij} |i\rangle \langle j| .$$

Los coeficientes  $a_{ij}$  forman una matriz cuadrada (que es la matriz de  $\check{\mathbf{A}}$  en la base  $\{|i\rangle\}_i$ )

$$\check{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & & & \cdot \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ a_{N1} & \dots & & & a_{NN} \end{pmatrix} .$$

**Ejemplo:** En un espacio de dimensión 2 considere el operador  $\check{\mathbf{A}} = \alpha | 1 \rangle \langle 2 |$ . La matriz de coeficientes en este caso es

$$\check{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 0 & \alpha \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Sean  $\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}$  dos operadores que en la base  $\{|i\rangle\}$  se expresan por

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{A}} &= \sum_{ij} a_{ij} |i\rangle \langle j|, \\ \check{\mathbf{B}} &= \sum_{ij} b_{ij} |i\rangle \langle j|. \end{aligned}$$

Para el operador  $\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}}$  tenemos entonces:

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}} &= \left( \sum_{ij} a_{ij} |i\rangle \langle j| \right) \left( \sum_{k\ell} b_{k\ell} |k\rangle \langle \ell| \right) \\ &= \sum_{ijkl} a_{ij} b_{k\ell} |i\rangle \langle j|k\rangle \langle \ell| \\ &= \sum_{i\ell} \left( \sum_j a_{ij} b_{j\ell} \right) |i\rangle \langle \ell|. \end{aligned}$$

Por otra parte,

$$\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}} \equiv \check{\mathbf{C}} = \sum_{i\ell} c_{i\ell} |i\rangle \langle \ell|.$$

De las expresiones anteriores se deduce que

$$c_{i\ell} = \sum_j a_{ij} b_{j\ell},$$

o sea, la matriz de  $\check{\mathbf{C}}$  es simplemente el producto de la matriz de  $\check{\mathbf{A}}$  y la matriz de  $\check{\mathbf{B}}$ .

## 2.14 Autovalores de un operador.

Dado un operador  $\check{\mathbf{A}}$ , decimos que  $|x\rangle$  es un autovector de  $\check{\mathbf{A}}$  siendo  $\lambda \in \mathbb{C}$  el correspondiente autovalor si

$$\check{\mathbf{A}}|x\rangle = \lambda|x\rangle. \quad (2.10)$$

Si  $|x\rangle$  es un autovector, entonces  $\alpha|x\rangle$ , con  $\alpha \in \mathbb{C}$ , también es un autovector. Usualmente se considera a  $|x\rangle$  y  $\alpha|x\rangle$ , como “un mismo autovector”.

Para el caso de un espacio de dimensión  $n$  finita, usando una base arbitraria del espacio la última ecuación se puede escribir de la forma

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & & & \cdot \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ A_{n1} & \dots & & & A_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} .$$

De acá se deduce la ecuación para  $\lambda$ :

$$\det(\check{\mathbf{A}} - \lambda \check{\mathbf{I}}) = \det(A_{ij} - \lambda \delta_{ij}) = 0 .$$

Esta ecuación, conocida como ecuación secular, da lugar a un polinomio de grado  $n$ , llamado polinomio característico

$$\lambda^n + c_{n-1}\lambda^{n-1} + \dots + c_0 = 0 .$$

En el campo complejo  $\mathbb{C}$ , esta ecuación tiene  $n$  soluciones; cada solución distinta da lugar a un autovector, de modo que si todos los autovalores son distintos también hay  $n$  autovectores. Si hay autovalores que coinciden (en cuyo caso se dice que el autovalor es degenerado), puede ocurrir que el número de autovectores sea menor que la dimensión del espacio. En todo caso, siempre existe al menos un autovector para cada autovalor.

Veamos ahora el problema desde otro ángulo. Partamos con un operador diagonalizable, y por simplicidad elijamos la base en que ya es diagonal, es decir,

$$\check{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \lambda_2 & & \\ \vdots & & \lambda_3 & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} .$$

Tenemos

$$\begin{aligned} \det(\check{\mathbf{A}} - x \check{\mathbf{I}}) &= \begin{vmatrix} \lambda_1 - x & 0 & 0 & & 0 \\ 0 & \lambda_2 - x & 0 & & \\ 0 & 0 & \lambda_3 - x & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ & & & & \lambda_n - x \end{vmatrix} \\ &= (\lambda_1 - x)(\lambda_2 - x) \cdot \dots \cdot (\lambda_n - x) \\ &= P(x) = \text{polinomio de grado } n. \end{aligned}$$

Las raíces del polinomio  $P(x)$  dan los  $n$  autovalores de  $\check{\mathbf{A}}$ .

Si  $\check{\mathbf{A}}$  no es diagonal, pero diagonalizable (luego veremos que todo operador autohermítico es diagonalizable), entonces se tiene que existe un operador  $\check{\mathbf{S}}$  tal que  $\check{\mathbf{S}}\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{S}}^{-1}$  es diagonal, es decir,

$$\check{\mathbf{S}}\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{S}}^{-1} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{pmatrix} .$$

Nuevamente calculemos  $\det(\check{\mathbf{A}} - x\check{\mathbf{I}})$ . Usando dos de las propiedades de los determinantes:  $\det\check{\mathbf{S}}^{-1} = (\det\check{\mathbf{S}})^{-1}$  y  $\det(\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}}) = (\det\check{\mathbf{A}})(\det\check{\mathbf{B}})$ , se obtiene:

$$\begin{aligned} \det(\check{\mathbf{A}} - x\check{\mathbf{I}}) &= (\det\check{\mathbf{S}}) \det(\check{\mathbf{A}} - x\check{\mathbf{I}})(\det\check{\mathbf{S}}^{-1}) \\ &= \det(\check{\mathbf{S}}\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{S}}^{-1} - x\check{\mathbf{I}}) \\ &= \begin{vmatrix} \lambda_1 - x & & & 0 \\ & \lambda_2 - x & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n - x \end{vmatrix} \\ &= (\lambda_1 - x)(\lambda_2 - x) \dots (\lambda_n - x), \end{aligned}$$

o sea,

$$\det(\check{\mathbf{A}} - x\check{\mathbf{I}}) = (\lambda_1 - x)(\lambda_2 - x) \dots (\lambda_N - x) = P(x).$$

Así pues, sea o no sea diagonal, al extraer las raíces del polinomio  $P(x)$  se obtienen los autovalores de  $\check{\mathbf{A}}$ .

**Ejemplo** Encontramos los autovalores y autovectores de

$$\check{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Solución:

$$\det(\check{\mathbf{A}} - x\check{\mathbf{I}}) = \begin{vmatrix} -x & 1/2 \\ 1/2 & -x \end{vmatrix} = x^2 - \frac{1}{4} = \left(x + \frac{1}{2}\right) \left(x - \frac{1}{2}\right),$$

es decir, los dos autovalores son  $\lambda_1 = 1/2$  y  $\lambda_2 = -1/2$ . Para encontrar los autovectores  $|\lambda_1\rangle$  y  $|\lambda_2\rangle$  procedemos de la siguiente manera: Expresemos el vector  $|\lambda_1\rangle = \alpha|1\rangle + \beta|2\rangle$  en notación matricial:

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \text{notación matricial del vector } |\lambda_1\rangle.$$

Entonces la ecuación de autovalores  $\check{\mathbf{A}}|\lambda_1\rangle = \lambda_1|\lambda_1\rangle$  se escribe de la forma

$$\begin{pmatrix} 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = \lambda_1 \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}.$$

Para el autovalor  $\lambda_1 = 1/2$ , la última ecuación da la relación

$$\begin{pmatrix} \beta/2 \\ \alpha/2 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} \implies \alpha = \beta.$$

Como  $|\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1$  (si los  $|\lambda_i\rangle$  están normalizados), se concluye que

$$\alpha = \beta = \frac{1}{\sqrt{2}},$$



o sea,

$$|\lambda_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle + |2\rangle) \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} .$$

Análogamente, para el otro autovalor,  $\lambda_2 = -1/2$ , se obtiene

$$|\lambda_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle - |2\rangle) \longrightarrow \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} .$$

Note que no siempre una matriz no autohermítica es diagonalizable. Por ejemplo

$$\check{M} = \begin{pmatrix} \lambda & b \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} .$$

no es diagonalizable. Demuestre como ejercicio (Problema 2-2) que  $\check{M} \neq \check{M}^\dagger$  y que sólo el vector proporcional a  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  es autovector de  $\check{M}$ .

**Ejercicio :** (Problema 2-3)

Demuestre que si  $\check{A} = \check{A}^\dagger$  y  $\check{B} = \check{B}^\dagger$ , entonces los siguientes operadores son autohermíticos:

- i)  $\check{A}^n$ ,  $\forall n \in \mathbb{N}$ .
- ii)  $\check{C} \equiv -\frac{1}{2}i[\check{A}, \check{B}] = -\frac{1}{2}i(\check{A}\check{B} - \check{B}\check{A})$ .
- iii)  $\check{D} \equiv \frac{1}{2}\{\check{A}, \check{B}\}_+ = \frac{1}{2}(\check{A}\check{B} + \check{B}\check{A})$ .

Concluya de acá que  $\check{A}\check{B} = \check{C} + i\check{D}$  con  $\check{C}$  y  $\check{D}$  autohermíticos, no es autohermítico aun cuando  $\check{A}$  y  $\check{B}$  lo sean.

## 2.15 El caso de operadores autohermíticos.

Si  $\check{A} = \check{A}^\dagger$ , podemos hacer afirmaciones más fuertes que en el caso general; en efecto:

**Proposición 2.1** Los autovalores de  $\check{A}$  son reales.

**Demostración** Tomemos el dual de la relación (2.10)

$$\langle x | \check{A}^\dagger = (\lambda | x \rangle)^\dagger = \lambda^* \langle x | .$$

Realizando el producto punto con  $|x\rangle$  y usando el hecho que  $\check{A} = \check{A}^\dagger$  se deduce que

$$\langle x | \check{A} | x \rangle = \left\{ \begin{array}{lll} \langle x | \check{A}^\dagger | x \rangle & = \lambda^* \langle x | x \rangle & = \lambda^* \\ \langle x | (\check{A} | x \rangle) & = \lambda \langle x | x \rangle & = \lambda \end{array} \right\} \implies \lambda = \lambda^* .$$

q.e.d.

**Proposición 2.2** Si  $\lambda_i$  y  $\lambda_j$  son autovalores de  $\check{\mathbf{A}}$ , y  $\lambda_i \neq \lambda_j$ , entonces los autovectores asociados, digamos  $|a_i\rangle$  y  $|a_j\rangle$ , son ortogonales.

**Demostración**

$$\langle a_i | \check{\mathbf{A}} | a_j \rangle = \langle a_i | \lambda_j | a_j \rangle = \lambda_j \langle a_i | a_j \rangle \quad (2.11)$$

$$(\langle a_j | \check{\mathbf{A}} | a_i \rangle)^\dagger \equiv (\langle a_j | \check{\mathbf{A}} | a_i \rangle)^* = (\langle a_j | \lambda_i | a_i \rangle)^* = (\lambda_i \langle a_j | a_i \rangle)^* = \lambda_i^* (\langle a_j | a_i \rangle)^* = \lambda_i (\langle a_i | a_j \rangle) .$$

Pero

$$(\langle a_j | \check{\mathbf{A}} | a_i \rangle)^\dagger = \langle a_i | \check{\mathbf{A}}^\dagger | a_j \rangle = \langle a_i | \check{\mathbf{A}} | a_j \rangle .$$

De las dos ecuaciones anteriores se deduce que

$$\langle a_i | \check{\mathbf{A}} | a_j \rangle = \lambda_i \langle a_i | a_j \rangle . \quad (2.12)$$

Restando (2.12) de (2.11) se obtiene

$$0 = (\lambda_i - \lambda_j) \langle a_i | a_j \rangle .$$

Como  $\lambda_i \neq \lambda_j$ , se tiene que

$$\langle a_i | a_j \rangle = 0 . \quad (2.13)$$

Autovectores que corresponden a autovalores distintos siempre son ortogonales.

q.e.d.

**Proposición 2.3** Los autovectores de  $\check{\mathbf{A}}$  forman una base completa de  $\mathcal{H}$ .

**Demostración** Sea  $\mathcal{H}_1$  el espacio engendrado por todos los autovectores de  $\check{\mathbf{A}}$  y supongamos que tal espacio no coincide con  $\mathcal{H}$ . Sea  $\mathcal{H}_2$  el complemento, es decir,  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$ . Mostraremos que con esta hipótesis se llega a una contradicción.

Partimos construyendo una base ortonormal en  $\mathcal{H}_1$ , es decir, en el espacio engendrado por los autovectores de  $\check{\mathbf{A}}$ . Si los autovectores corresponden a autovalores distintos, los autovectores ya son ortonormales. Si algunos autovalores coinciden, por ejemplo,  $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_s$ , entonces decimos que el subespacio con base  $\{|a_1\rangle, |a_2\rangle, \dots, |a_s\rangle\}$  es un subespacio de degeneración del autovalor  $\lambda_1$ . Mediante el método de Schmidt, siempre es posible encontrar una base ortonormal de vectores en el subespacio de degeneración. Así pues, todos los  $\{|a_i\rangle\}$  los podemos considerar ortonormalizados.

Usando nuevamente el proceso de Schmidt, completamos ahora la base de  $\mathcal{H}$  con vectores  $\{|b_j\rangle\}$  que sean ortogonales a los  $\{|a_i\rangle\}$ . Tales vectores pertenecen al espacio  $\mathcal{H}_2$ . Mostraremos a continuación que el operador  $\check{\mathbf{A}}$  deja al espacio  $\mathcal{H}_2$  invariante, es decir,

$$\forall |b\rangle \in \mathcal{H}_2, \quad \check{\mathbf{A}}|b\rangle \in \mathcal{H}_2 .$$

En efecto, sea  $|a_j\rangle$  un vector de la base del espacio  $\mathcal{H}_1$ , entonces

$$\begin{aligned}\langle a_j | \check{\mathbf{A}} | b \rangle &= (\langle a_j | \check{\mathbf{A}}) | b \rangle \\ &= \lambda_j^* \langle a_j | b \rangle = 0 ,\end{aligned}$$

o sea,  $\check{\mathbf{A}} | b \rangle$  no tiene componente en el espacio  $\mathcal{H}_1$ . Así pues, tanto  $\mathcal{H}_1$  como  $\mathcal{H}_2$  son espacios invariantes ante  $\check{\mathbf{A}}$ . Esto permite operar con  $\check{\mathbf{A}}$  por separado en ambos espacios. Pero en ese caso, resolviendo la ecuación secular del operador  $\check{\mathbf{A}}$  en el espacio  $\mathcal{H}_2$  podemos encontrar autovalores y, al menos, un autovector. ¡ Contradicción ! con el hecho que todos los autovectores están en  $\mathcal{H}_1$ . Luego la hipótesis inicial, de que  $\mathcal{H}_2 \neq \emptyset$ , es falsa. Concluimos que  $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}$ , y por consiguiente la base  $\{|a_j\rangle\}$  es completa, es decir,

$$\sum_{j=1}^n |a_j\rangle \langle a_j| = \check{\mathbf{1}} .$$

q.e.d.

### Resumen:

La base formada por los de autovectores de un operador autohermítico  $\check{\mathbf{A}}$  es completa y siempre se puede elegir de manera que sea ortonormal.

Los conceptos anteriores, aunque analizados para espacios de dimensión finita, pueden extenderse a espacios de dimensión infinita numerable o no-numerable.

## 2.16 Conmutadores.

**Definición 2.2** El conmutador  $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]$  de dos operadores  $\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}$  viene definido por

$$[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] \equiv \check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}} - \check{\mathbf{B}}\check{\mathbf{A}} .$$

Dos operadores  $\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}$  se dice que conmutan si  $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] = \check{\mathbf{0}}$ .

**Teorema 2.1** Sean  $\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}$  dos operadores autohermíticos, entonces  $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] = \check{\mathbf{0}} \iff$  existe una base en  $\mathcal{H}$  en que ambos operadores son diagonales (es decir, existe una base de  $\mathcal{H}$  cuyos vectores son simultáneamente autovectores de  $\check{\mathbf{A}}$  y  $\check{\mathbf{B}}$ ).

### Demostración

i) Supongamos que  $\{|m_j\rangle\}$  son simultáneamente autovectores de  $\check{\mathbf{A}}$  y  $\check{\mathbf{B}}$ , es decir,

$$\begin{aligned}\check{\mathbf{A}} | m_i \rangle &= a_i | m_i \rangle , \\ \check{\mathbf{B}} | m_i \rangle &= b_i | m_i \rangle .\end{aligned}$$

Entonces

$$\begin{aligned}
\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}}|\psi\rangle &= \check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}}\sum_i\psi_i|m_i\rangle = \sum_i\psi_i\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}}|m_i\rangle \\
&= \sum_i\psi_i\check{\mathbf{A}}b_i|m_i\rangle = \sum_i\psi_ia_ib_i|m_i\rangle \\
&= \sum_i\psi_ia_i\check{\mathbf{B}}|m_i\rangle = \check{\mathbf{B}}\sum_i\psi_ia_i|m_i\rangle \\
&= \check{\mathbf{B}}\sum_i\psi_i\check{\mathbf{A}}|m_i\rangle = \check{\mathbf{B}}\check{\mathbf{A}}\sum_i\psi_i|m_i\rangle \\
&= \check{\mathbf{B}}\check{\mathbf{A}}|\psi\rangle.
\end{aligned}$$

Luego, se deduce que

$$[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]|\psi\rangle = 0, \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H} \implies [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] = \check{\mathbf{0}}.$$

ii) Supongamos que  $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] = \check{\mathbf{0}}$ . Sea  $\{|m_i\rangle\}$  una base en que  $\check{\mathbf{A}}$  es diagonal, es decir,

$$\check{\mathbf{A}}|m_i\rangle = a_i|m_i\rangle.$$

Entonces

$$\left. \begin{aligned} \check{\mathbf{B}}\check{\mathbf{A}}|m_i\rangle &= a_i\check{\mathbf{B}}|m_i\rangle \\ \check{\mathbf{B}}\check{\mathbf{A}}|m_i\rangle &= \check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}}|m_i\rangle \end{aligned} \right\} \implies \check{\mathbf{A}}(\check{\mathbf{B}}|m_i\rangle) = a_i(\check{\mathbf{B}}|m_i\rangle),$$

es decir,  $\check{\mathbf{B}}|m_i\rangle$  también es un autovector de  $\check{\mathbf{A}}$  con el autovalor  $a_i$ . Si el espectro de  $\check{\mathbf{A}}$  no es degenerado se debe tener que  $\check{\mathbf{B}}|m_i\rangle$  es múltiplo de  $|m_i\rangle$ , es decir,

$$\check{\mathbf{B}}|m_i\rangle = b_i|m_i\rangle.$$

Se concluye que  $|m_i\rangle$  también es autovector de  $\check{\mathbf{B}}$ . En el caso en que el espectro de  $\check{\mathbf{A}}$  sea degenerado hay que buscar la combinación lineal adecuada en el subespacio de degeneración.

q.e.d.

### 2.16.1 Propiedades de los conmutadores.

- i)  $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] = -[\check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{A}}]$ .
- ii)  $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{A}}] = \check{\mathbf{0}}$ .
- iii)  $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}} + \check{\mathbf{C}}] = [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] + [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{C}}]$ .
- iv)  $[\check{\mathbf{A}} + \check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{C}}] = [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{C}}] + [\check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{C}}]$ .
- v)  $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}\check{\mathbf{C}}] = [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]\check{\mathbf{C}} + \check{\mathbf{B}}[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{C}}]$ .

- vi)  $[\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{C}}] = \check{\mathbf{A}} [\check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{C}}] + [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{C}}] \check{\mathbf{B}}$ .
- vii)  $[\check{\mathbf{A}}, [\check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{C}}]] + [\check{\mathbf{B}}, [\check{\mathbf{C}}, \check{\mathbf{A}}]] + [\check{\mathbf{C}}, [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]] = \check{\mathbf{0}}$ , Identidad de Jacobi.
- viii) Si  $[\check{\mathbf{A}}, [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]] = \check{\mathbf{0}}$ , entonces se tiene que

$$[\check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{A}}^n] = n\check{\mathbf{A}}^{n-1} [\check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{A}}] . \quad (2.14)$$

- ix)  $[\check{\mathbf{A}}, f(\check{\mathbf{A}})] = \check{\mathbf{0}}$  para toda función analítica  $f$  de  $\check{\mathbf{A}}$ .

¿Qué significa  $f(\check{\mathbf{A}})$ ? Para comprender mejor el significado de esta composición de función y operador, tomemos la expansión de Taylor de  $f$ ,

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} f^{(n)}(0) ,$$

y reemplacemos  $x \longrightarrow x\check{\mathbf{A}}$ , obteniéndose

$$f(x\check{\mathbf{A}}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} f^{(n)}(0) \check{\mathbf{A}}^n .$$

Este operador plantea dudas de existencia, pero supongamos que está bien definido, al menos dentro de cierto radio de convergencia  $|x| < R$ . Sea  $\check{\mathbf{A}}$  un operador autohermítico y consideremos la base que lo hace diagonal. Entonces tenemos

$$\check{\mathbf{A}} = \sum_j a_j |a_j\rangle\langle a_j| \implies \check{\mathbf{A}}^n = \sum_j (a_j)^n |a_j\rangle\langle a_j|$$

y

$$f(x\check{\mathbf{A}}) = \sum_j \sum_n f^{(n)}(0) \frac{(xa_j)^n}{n!} |a_j\rangle\langle a_j| = \sum_j f(xa_j) |a_j\rangle\langle a_j| .$$

Haciendo una prolongación analítica, podemos poner  $x \longrightarrow 1$  y escribir

$$f(\check{\mathbf{A}}) = \sum_j f(a_j) |a_j\rangle\langle a_j| .$$

Ejemplo:

$$e^{i\check{\mathbf{A}}} = \sum_j e^{ia_j} |a_j\rangle\langle a_j| .$$

Si bien la primera parte del análisis parecía delicada, hemos llegado a una forma plenamente satisfactoria que legitima la composición de funciones y operadores.

A continuación, demostraremos algunos resultados importantes que involucran conmutadores y funciones de operadores.

**Proposición 2.4**

$$e^{\check{\mathbf{A}}} \check{\mathbf{B}} e^{-\check{\mathbf{A}}} = \check{\mathbf{B}} + [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] + \frac{1}{2!} [\check{\mathbf{A}}, [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]] + \frac{1}{3!} [\check{\mathbf{A}}, [\check{\mathbf{A}}, [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]]] + \dots .$$

**Demostración** Consideremos el operador

$$\check{\mathbf{f}}(\lambda) = e^{\lambda \check{\mathbf{A}}} \check{\mathbf{B}} e^{-\lambda \check{\mathbf{A}}} . \quad (2.15)$$

Expandimos tal operador en serie de Taylor

$$\check{\mathbf{f}}(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \check{\mathbf{f}}_n , \quad \text{con } \check{\mathbf{f}}_n = \left[ \frac{\partial^n}{\partial \lambda^n} \mathbf{f}(\check{\lambda}) \right]_{\lambda=0} .$$

Tenemos

$$\frac{\partial \check{\mathbf{f}}}{\partial \lambda} = \left( \frac{\partial e^{\lambda \check{\mathbf{A}}}}{\partial \lambda} \right) \check{\mathbf{B}} e^{-\lambda \check{\mathbf{A}}} + e^{\lambda \check{\mathbf{A}}} \check{\mathbf{B}} \left( \frac{\partial e^{-\lambda \check{\mathbf{A}}}}{\partial \lambda} \right) .$$

Pero

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} e^{\lambda \check{\mathbf{A}}} = \check{\mathbf{A}} e^{\lambda \check{\mathbf{A}}} = e^{\lambda \check{\mathbf{A}}} \check{\mathbf{A}} ,$$

luego

$$\frac{\partial \check{\mathbf{f}}}{\partial \lambda} = e^{\lambda \check{\mathbf{A}}} (\check{\mathbf{A}} \check{\mathbf{B}} - \check{\mathbf{B}} \check{\mathbf{A}}) e^{-\lambda \check{\mathbf{A}}} = e^{\lambda \check{\mathbf{A}}} [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] e^{-\lambda \check{\mathbf{A}}} . \quad (2.16)$$

Iterando esta relación, es decir, cambiando  $\check{\mathbf{B}} \rightarrow [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] \rightarrow [\check{\mathbf{A}}, [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]]$  en las relaciones (2.15) y (2.16) sigue:

$$\frac{\partial^2 \check{\mathbf{f}}}{\partial \lambda^2} = \frac{\partial}{\partial \lambda} \left( \frac{\partial \check{\mathbf{f}}}{\partial \lambda} \right) = e^{\lambda \check{\mathbf{A}}} [\check{\mathbf{A}}, [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]] e^{-\lambda \check{\mathbf{A}}} ,$$

etc.. La proposición queda demostrada al reemplazar estas relaciones, con  $\lambda = 1$ , en la expansión de Taylor.

q.e.d.

Supongamos que  $\check{\mathbf{A}}$  y  $\check{\mathbf{B}}$  conmutan con el conmutador de  $\check{\mathbf{A}}$  y  $\check{\mathbf{B}}$ , es decir, supongamos que

$$[\check{\mathbf{A}}, [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]] = [\check{\mathbf{B}}, [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]] = \check{\mathbf{0}} ,$$

e introduzcamos la función de operadores

$$\check{\mathbf{f}}(x) = e^{\check{\mathbf{A}}x} e^{\check{\mathbf{B}}x} .$$

Evaluemos sus derivadas. Tenemos

$$\frac{\partial \check{\mathbf{f}}}{\partial x} = \left( \frac{\partial}{\partial x} e^{\check{\mathbf{A}}x} \right) e^{\check{\mathbf{B}}x} + e^{\check{\mathbf{A}}x} \left( \frac{\partial}{\partial x} e^{\check{\mathbf{B}}x} \right) = e^{\check{\mathbf{A}}x} (\check{\mathbf{A}} + \check{\mathbf{B}}) e^{\check{\mathbf{B}}x} ,$$

es decir,

$$\frac{\partial \check{\mathbf{f}}}{\partial x} = \left[ \check{\mathbf{A}} + e^{\check{\mathbf{A}}x} \check{\mathbf{B}} e^{\check{\mathbf{A}}x} \right] \check{\mathbf{f}}(x) .$$

Usando la proposición anterior se encuentra que

$$\frac{d\check{\mathbf{f}}}{dx} = ((\check{\mathbf{A}} + \check{\mathbf{B}}) + [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] x) \check{\mathbf{f}}(x) . \quad (2.17)$$

Como  $(\check{\mathbf{A}} + \check{\mathbf{B}})$  y  $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]$  conmutan, estos operadores se pueden tratar como números, es decir, la última relación es simplemente una ecuación diferencial del tipo

$$\frac{du(x)}{dx} = (\alpha + \beta x) u(x) ,$$

cuya solución es

$$u(x) = C e^{\alpha x + \frac{1}{2} \beta x^2} .$$

La solución de (2.17) viene, por lo tanto, dada por

$$\check{\mathbf{f}}(x) = C e^{(\check{\mathbf{A}} + \check{\mathbf{B}})x + \frac{1}{2} x^2 [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]} .$$

La constante  $C$  es igual a 1 ya que  $\check{\mathbf{f}}(0) = \check{\mathbf{1}}$ . De esta última relación y la definición de  $f$  se obtiene:

$$e^{\check{\mathbf{A}}x} e^{\check{\mathbf{B}}x} = e^{(\check{\mathbf{A}} + \check{\mathbf{B}})x + \frac{1}{2} x^2 [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]} . \quad (2.18)$$

A partir de este resultado ahora es fácil demostrar las siguientes proposiciones:

**Proposición 2.5** Si  $\check{\mathbf{A}}$  y  $\check{\mathbf{B}}$  conmutan con  $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]$  entonces:

$$e^{\check{\mathbf{A}}} \check{\mathbf{B}} e^{-\check{\mathbf{A}}} = \check{\mathbf{B}} + [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] .$$

**Demostración** Problema 2-4.

**Proposición 2.6** Si  $\check{\mathbf{A}}$  y  $\check{\mathbf{B}}$  conmutan con  $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]$  entonces:

$$e^{\check{\mathbf{A}}} e^{\check{\mathbf{B}}} = e^{\check{\mathbf{A}} + \check{\mathbf{B}} + \frac{1}{2} [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]} = e^{\check{\mathbf{A}} + \check{\mathbf{B}}} e^{\frac{1}{2} [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]} = e^{\check{\mathbf{B}}} e^{\check{\mathbf{A}}} e^{\frac{1}{2} [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]} . \quad (2.19)$$

**Demostración** Problema 2-5.

## 2.17 Valor esperado y varianza.

**Definición 2.3** El valor esperado de un operador  $\check{\mathbf{A}}$  para un estado  $|\psi\rangle$  normalizado esta dado por

$$\langle \check{\mathbf{A}} \rangle_\psi = \langle \psi | \check{\mathbf{A}} | \psi \rangle .$$

Cuando esté claro cual es el estado  $\psi$  que se usa, se puede omitir el rótulo y poner  $\langle \check{\mathbf{A}} \rangle$ .

**Definición 2.4** La varianza  $\langle (\Delta A)^2 \rangle_\psi$  de un operador  $\check{\mathbf{A}}$  para un estado  $|\psi\rangle$  viene dada por

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle_\psi \equiv \langle \check{\mathbf{A}}^2 \rangle_\psi - \langle \check{\mathbf{A}} \rangle_\psi^2 . \quad (2.20)$$

Sea  $\check{\mathbf{A}}$  un operador autohermítico,  $\{|a_n\rangle\}$  una base ortonormal completa de autovectores y  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ , entonces

$$\begin{aligned} \langle \check{\mathbf{A}} \rangle_\psi &= \langle \psi | \check{\mathbf{A}} | \psi \rangle = \sum_j \langle \psi | \check{\mathbf{A}} | a_j \rangle \langle a_j | \psi \rangle , \\ &= \sum_j \langle \psi | a_j \rangle a_j \langle a_j | \psi \rangle , \end{aligned}$$

es decir,

$$\langle \check{\mathbf{A}} \rangle_\psi = \sum_j a_j |\langle a_j | \psi \rangle|^2 \in \mathbb{R} .$$

El valor esperado de un operador hermítico es real.

Evaluemos  $\langle (\check{\mathbf{A}} - \langle \check{\mathbf{A}} \rangle_\psi \check{\mathbf{1}})^2 \rangle_\psi$ . Se tiene:

$$\begin{aligned} \langle (\check{\mathbf{A}} - \langle \check{\mathbf{A}} \rangle_\psi \check{\mathbf{1}})^2 \rangle_\psi &= \langle \check{\mathbf{A}}^2 - 2\check{\mathbf{A}}\langle \check{\mathbf{A}} \rangle_\psi + \langle \check{\mathbf{A}} \rangle_\psi^2 \check{\mathbf{1}} \rangle_\psi \\ &= \langle \check{\mathbf{A}}^2 \rangle - \langle 2\check{\mathbf{A}}\langle \check{\mathbf{A}} \rangle \rangle + \langle \langle \check{\mathbf{A}} \rangle^2 \rangle . \end{aligned}$$

Pero  $\langle \check{\alpha} \rangle_\psi = \langle \psi | \alpha \check{\mathbf{1}} | \psi \rangle = \alpha \langle \psi | \psi \rangle = \alpha$ , si  $\alpha \in \mathbb{C}$ , luego

$$\langle (\check{\mathbf{A}} - \langle \check{\mathbf{A}} \rangle)^2 \rangle = \langle \check{\mathbf{A}}^2 \rangle - \langle \check{\mathbf{A}} \rangle^2 .$$

De esta última ecuación y la definición (2.20), se obtiene la importante expresión

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle (\check{\mathbf{A}} - \langle \check{\mathbf{A}} \rangle)^2 \rangle .$$

La varianza de un operador autohermítico es siempre mayor o igual a cero.

Cuando no haya duda para qué estado se están evaluando los valores esperados, se usa también la siguiente notación:

$$\Delta A = \sqrt{\langle (\Delta A)^2 \rangle} = \sqrt{\langle (\check{\mathbf{A}} - \langle \check{\mathbf{A}} \rangle)^2 \rangle} .$$



## 2.18 Desigualdad de Schwartz.

**Teorema 2.2** Sean  $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$  y  $\langle\psi|, \langle\phi| \in \mathcal{H}^\dagger$  los vectores duales respectivos, entonces

$$\langle\psi|\psi\rangle\langle\phi|\phi\rangle \geq |\langle\psi|\phi\rangle|^2 .$$

**Demostración** Consideremos el vector  $|f\rangle = |\phi\rangle + \lambda|\psi\rangle$ . Como  $\langle f|f\rangle \geq 0$  se tiene

$$\begin{aligned} 0 \leq I &\equiv \langle f|f\rangle \\ &= (\langle\phi| + \lambda^*\langle\psi|)(|\phi\rangle + \lambda|\psi\rangle) \\ &= \langle\phi|\phi\rangle + \lambda^*\langle\psi|\phi\rangle + \lambda\langle\phi|\psi\rangle + \lambda^*\lambda\langle\psi|\psi\rangle . \end{aligned} \quad (2.21)$$

Minimicemos  $I$  con respecto a  $\lambda$  y  $\lambda^*$ :

$$\frac{\partial I}{\partial \lambda} = 0 = \langle\phi|\psi\rangle + \lambda^*\langle\psi|\psi\rangle , \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial I}{\partial \lambda^*} = 0 = \langle\psi|\phi\rangle + \lambda\langle\psi|\psi\rangle . \quad (2.23)$$

Luego el mínimo de  $I$  se obtiene al reemplazar en (2.21) los valores de  $\lambda^*$  y  $\lambda$  que se deducen de (2.22) y (2.23):

$$I_{\min} = \langle\phi|\phi\rangle + \left(-\frac{\langle\phi|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\right)\langle\psi|\phi\rangle + \left(-\frac{\langle\psi|\phi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\right)\langle\phi|\psi\rangle + \left(-\frac{\langle\phi|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\right)\left(-\frac{\langle\psi|\phi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\right)\langle\psi|\psi\rangle .$$

Multiplicando por  $\langle\psi|\psi\rangle$  se obtiene:

$$\begin{aligned} 0 &\leq I_{\min} \cdot \langle\psi|\psi\rangle \\ &\leq \langle\phi|\phi\rangle\langle\psi|\psi\rangle - \langle\psi|\phi\rangle^*\langle\psi|\phi\rangle - \langle\psi|\phi\rangle\langle\psi|\phi\rangle^* + \langle\psi|\phi\rangle^*\langle\psi|\phi\rangle \\ &\leq \langle\phi|\phi\rangle\langle\psi|\psi\rangle - |\langle\psi|\phi\rangle|^2 . \end{aligned}$$

q.e.d.

**Ejercicio:** (Problema 2-6) Poner  $\lambda = a + ib$ , ( $\lambda^* = a - ib$ ), con  $a, b \in \mathbb{R}$  y, en lugar de (2.22) y (2.23), exigir  $\partial I/\partial a = \partial I/\partial b = 0$ . Mostrar que el resultado final es el mismo.

## 2.19 Teorema: “Principio de Incerteza”.

**Teorema 2.3** Sean  $\check{\mathbf{A}}$  y  $\check{\mathbf{B}}$  dos operadores autohermíticos cuyo conmutador es  $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] = i\hbar\check{\mathbf{C}}$ . Sea  $|\psi\rangle$  un vector arbitrario, pero normalizado, de  $\mathcal{H}$ . Entonces

$$\boxed{(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{\hbar}{2}\langle\check{\mathbf{C}}\rangle .}$$

**Demostración** Consideremos los operadores  $\check{\mathbf{a}}$ ,  $\check{\mathbf{b}}$  definidos por

$$\begin{aligned}\check{\mathbf{a}} &\equiv \check{\mathbf{A}} - \langle \check{\mathbf{A}} \rangle_{\psi} \check{\mathbf{1}} = \check{\mathbf{A}} - \langle \check{\mathbf{A}} \rangle, \\ \check{\mathbf{b}} &\equiv \check{\mathbf{B}} - \langle \check{\mathbf{B}} \rangle_{\psi} \check{\mathbf{1}} = \check{\mathbf{B}} - \langle \check{\mathbf{B}} \rangle.\end{aligned}$$

Si  $\check{\mathbf{A}}$  y  $\check{\mathbf{B}}$  son autohermíticos, también lo serán  $\check{\mathbf{a}}$  y  $\check{\mathbf{b}}$ . Más aún, tienen el mismo conmutador, en efecto,

$$\begin{aligned}[\check{\mathbf{a}}, \check{\mathbf{b}}] &= [\check{\mathbf{A}} - \langle \check{\mathbf{A}} \rangle \check{\mathbf{1}}, \check{\mathbf{B}} - \langle \check{\mathbf{B}} \rangle \check{\mathbf{1}}] \\ &= [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] - \langle \check{\mathbf{B}} \rangle [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{1}}] - \langle \check{\mathbf{A}} \rangle [\check{\mathbf{1}}, \check{\mathbf{B}}] + \langle \check{\mathbf{A}} \rangle \langle \check{\mathbf{B}} \rangle [\check{\mathbf{1}}, \check{\mathbf{1}}] \\ &= [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] = i\hbar \check{\mathbf{C}}\end{aligned}$$

Evaluemos  $\langle (\Delta A)^2 \rangle$  y  $\langle (\Delta B)^2 \rangle$ :

$$\begin{aligned}\langle (\Delta A)^2 \rangle &= \langle \psi | (\check{\mathbf{A}} - \langle \check{\mathbf{A}} \rangle \check{\mathbf{1}})^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \check{\mathbf{a}}^2 | \psi \rangle \\ &= (\langle \psi | \check{\mathbf{a}}^\dagger) (\check{\mathbf{a}} | \psi \rangle) = \langle \phi | \phi \rangle,\end{aligned}$$

donde  $|\phi\rangle \equiv \check{\mathbf{a}} | \psi \rangle$ . Análogamente,

$$\langle (\Delta B)^2 \rangle = (\langle \psi | \check{\mathbf{b}}^\dagger) (\check{\mathbf{b}} | \psi \rangle) = \langle \chi | \chi \rangle,$$

con  $|\chi\rangle \equiv \check{\mathbf{b}} | \psi \rangle$ . Usando la desigualdad de Schwartz se encuentra que

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle = \langle \phi | \phi \rangle \langle \chi | \chi \rangle \geq |\langle \phi | \chi \rangle|^2. \quad (2.24)$$

Evaluemos  $\langle \phi | \chi \rangle$ ,

$$\begin{aligned}\langle \phi | \chi \rangle &= (\check{\mathbf{a}} | \psi \rangle)^\dagger (\check{\mathbf{b}} | \psi \rangle) = \langle \psi | \check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{b}} | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \check{\mathbf{a}} \check{\mathbf{b}} | \psi \rangle = \langle \psi | \left( \frac{\check{\mathbf{a}} \check{\mathbf{b}} - \check{\mathbf{b}} \check{\mathbf{a}}}{2} + \frac{\check{\mathbf{a}} \check{\mathbf{b}} + \check{\mathbf{b}} \check{\mathbf{a}}}{2} \right) | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \left( \frac{\check{\mathbf{a}} \check{\mathbf{b}} - \check{\mathbf{b}} \check{\mathbf{a}}}{2} \right) | \psi \rangle + \langle \psi | \left( \frac{\check{\mathbf{a}} \check{\mathbf{b}} + \check{\mathbf{b}} \check{\mathbf{a}}}{2} \right) | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle \psi | [\check{\mathbf{a}}, \check{\mathbf{b}}] | \psi \rangle + \Gamma\end{aligned}$$

donde  $2\Gamma \equiv \langle \psi | (\check{\mathbf{a}} \check{\mathbf{b}} + \check{\mathbf{b}} \check{\mathbf{a}}) | \psi \rangle$ . Supongamos que  $\Gamma$  es un número real (lo demostraremos a la brevedad), entonces

$$\langle \phi | \chi \rangle = \frac{1}{2} \langle [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] \rangle + \Gamma = \frac{i\hbar}{2} \langle \check{\mathbf{C}} \rangle + \Gamma.$$

Sustituyendo esta última relación en (2.24), obtenemos

$$\begin{aligned}\langle (\Delta A)^2 \rangle \langle (\Delta B)^2 \rangle &\geq |\langle \phi | \chi \rangle|^2 = \left| \frac{i\hbar}{2} \langle \check{\mathbf{C}} \rangle + \Gamma \right|^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \langle \check{\mathbf{C}} \rangle^2 + \Gamma^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \langle \check{\mathbf{C}} \rangle^2,\end{aligned}$$

y, extrayendo raíz cuadrada en esta expresión,

$$(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{\hbar}{2} \langle \check{C} \rangle .$$

Aún falta demostrar que  $\Gamma$  es efectivamente real. Se tiene:

$$\begin{aligned} \langle \psi | \check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{b}} | \psi \rangle &= (\langle \psi | \check{\mathbf{a}}) (\check{\mathbf{b}} | \psi \rangle) \\ &= \{(\langle \psi | \check{\mathbf{b}}^\dagger) (\check{\mathbf{a}}^\dagger | \psi \rangle)\}^* \\ &= (\langle \psi | \check{\mathbf{b}}\check{\mathbf{a}} | \psi \rangle)^* , \end{aligned}$$

luego,

$$\begin{aligned} 2\Gamma &= \langle \psi | (\check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{b}} + \check{\mathbf{b}}\check{\mathbf{a}}) | \psi \rangle = \langle \psi | \check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{b}} | \psi \rangle + \langle \psi | \check{\mathbf{b}}\check{\mathbf{a}} | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \check{\mathbf{b}}\check{\mathbf{a}} | \psi \rangle^* + \langle \psi | \check{\mathbf{b}}\check{\mathbf{a}} | \psi \rangle \in \mathbb{R} \end{aligned}$$

q.e.d.

## 2.20 Problemas

2-1) Sean  $\check{\mathbf{A}}$ ,  $\check{\mathbf{B}}$ ,  $\check{\mathbf{C}}$  tres operadores, demuestre que:

- i)  $(\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}})^\dagger = \check{\mathbf{B}}^\dagger\check{\mathbf{A}}^\dagger$ .
- ii)  $(\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}}\check{\mathbf{C}})^\dagger = \check{\mathbf{C}}^\dagger\check{\mathbf{B}}^\dagger\check{\mathbf{A}}^\dagger$ .

2-2) Considere la siguiente matriz

$$\check{\mathbf{M}} = \begin{pmatrix} \lambda & b \\ 0 & \lambda \end{pmatrix} .$$

Demuestre que  $\check{\mathbf{M}} \neq \check{\mathbf{M}}^\dagger$  y que sólo el vector proporcional a  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  es autovector de  $\check{\mathbf{M}}$ .

2-3) Demuestre que si  $\check{\mathbf{A}} = \check{\mathbf{A}}^\dagger$  y  $\check{\mathbf{B}} = \check{\mathbf{B}}^\dagger$ , entonces los siguientes operadores son autohermíticos:

- i)  $\check{\mathbf{A}}^n$ ,  $\forall n \in \mathbb{N}$ .
- ii)  $\check{\mathbf{C}} \equiv -\frac{1}{2}i[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] = -\frac{1}{2}i(\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}} - \check{\mathbf{B}}\check{\mathbf{A}})$ .
- iii)  $\check{\mathbf{D}} \equiv \frac{1}{2}\{\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}\}_+ = \frac{1}{2}(\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}} + \check{\mathbf{B}}\check{\mathbf{A}})$ .

Concluya de acá que  $\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}} = \check{\mathbf{C}} + i\check{\mathbf{D}}$  con  $\check{\mathbf{C}}$  y  $\check{\mathbf{D}}$  autohermíticos, no es autohermítico aun cuando  $\check{\mathbf{A}}$  y  $\check{\mathbf{B}}$  lo sean.

2-4) Demuestre que si  $\check{\mathbf{A}}$  y  $\check{\mathbf{B}}$  conmutan con  $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]$  entonces:

$$e^{\check{\mathbf{A}}}\check{\mathbf{B}}e^{-\check{\mathbf{A}}} = \check{\mathbf{B}} + [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] .$$

2-5) Demuestre que si  $\check{\mathbf{A}}$  y  $\check{\mathbf{B}}$  conmutan con  $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]$  entonces:

$$e^{\check{\mathbf{A}}}\check{\mathbf{B}}e^{\check{\mathbf{A}}} = e^{\check{\mathbf{A}}+\check{\mathbf{B}}+\frac{1}{2}[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]} = e^{\check{\mathbf{A}}+\check{\mathbf{B}}}e^{\frac{1}{2}[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]} = e^{\check{\mathbf{B}}}\check{\mathbf{A}}e^{[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]} . \quad (2.19)$$

2-6) Poner  $\lambda = a + ib$ , ( $\lambda^* = a - ib$ ), con  $a, b \in \mathbb{R}$  y, en lugar de (2.22) y (2.23), exigir  $\partial I/\partial a = \partial I/\partial b = 0$ . Mostrar que el resultado final es el mismo en la demostración de la desigualdad de Schwartz.

2-7) Considerar los polinomios con coeficientes reales de grado menor o igual que 4, definidos en  $-1 \leq x \leq 1$ , para los cuales se define el producto interno:

$$(P(x), Q(x)) = \int_{-1}^1 P(x) Q(x) dx .$$

A partir de la base  $\{1, x, x^2, x^3, x^4\}$  obtener una base ortonormal y representar el vector  $\psi(x) = x^2 - 1$  respecto de ella.

2-8) En el espacio vectorial del problema anterior, considere el operador

$$\check{\mathbf{A}}P_n(x) = \frac{dP_n}{dx}.$$

Encontrar la matriz  $\mathcal{A}$  que representa a  $\check{\mathbf{A}}$  en la base  $\{\phi_n = x^n/n!\}$ .

Encontrar la matriz  $\mathcal{B}$  del operador  $\check{\mathbf{A}}^2 = d^2/dx^2$  y verificar que  $\mathcal{B} = \mathcal{A}^2$ .

2-9) Sea  $\check{\mathbf{H}}$  un operador autohermítico definido positivo, *i.e.*

$$\langle u | \check{\mathbf{H}} | u \rangle \geq 0 \quad \forall |u\rangle.$$

Demostrar que cualesquiera que sean  $|u\rangle$  y  $|v\rangle$ ,

$$|\langle u | \check{\mathbf{H}} | v \rangle|^2 \leq \langle u | \check{\mathbf{H}} | u \rangle \langle v | \check{\mathbf{H}} | v \rangle,$$

y que la igualdad  $\langle u | \check{\mathbf{H}} | u \rangle = 0$  implica necesariamente  $\check{\mathbf{H}}|u\rangle = 0$ . Demostrar, por otra parte, que  $\text{Tr}(\check{\mathbf{H}}) \geq 0$  y que la igualdad no se cumple más que si  $\check{\mathbf{H}} = \check{\mathbf{0}}$ .

2-10) Sean  $\check{\mathbf{A}}$  y  $\check{\mathbf{B}}$  dos operadores hermíticos que satisfacen la relación de conmutación

$$[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] = i\check{\mathbf{C}},$$

en que  $\check{\mathbf{C}}$  es también un operador autoadjunto. Sea  $|\psi\rangle$  un estado arbitrario, definimos los operadores  $\check{\mathbf{A}}' = \check{\mathbf{A}} - \langle \check{\mathbf{A}} \rangle_\psi$  y  $\check{\mathbf{B}}' = \check{\mathbf{B}} - \langle \check{\mathbf{B}} \rangle_\psi$ , en que  $\langle \check{\mathbf{A}} \rangle_\psi = \langle \psi | \check{\mathbf{A}} | \psi \rangle$ .

Considere la función del parámetro real  $\alpha$ ,  $I(\alpha) = \langle \varphi | \varphi \rangle$ , con  $|\varphi\rangle = (\alpha\check{\mathbf{A}}' - i\check{\mathbf{B}}')|\psi\rangle$ .

(a) Demuestre que

$$I(\alpha) = \langle \check{\mathbf{A}}' \rangle^2 \left\{ \alpha + \frac{\langle \check{\mathbf{C}} \rangle}{2\langle \check{\mathbf{A}}' \rangle^2} \right\}^2 + \langle \check{\mathbf{B}}' \rangle^2 - \frac{\langle \check{\mathbf{C}} \rangle^2}{4\langle \check{\mathbf{A}}' \rangle^2}, \quad \forall \alpha \text{ real.}$$

Use esto para redescubrir la relación de Heisenberg:

$$\langle \check{\mathbf{A}}'^2 \rangle \langle \check{\mathbf{B}}'^2 \rangle \geq \frac{\langle \check{\mathbf{C}}^2 \rangle}{4}.$$

(b) Si  $\alpha = -\langle \check{\mathbf{C}} \rangle / (2\langle \check{\mathbf{A}}'^2 \rangle)$ , demuestre que

$$I(\alpha) = \int \left| \frac{\langle \check{\mathbf{C}} \rangle \check{\mathbf{A}}'}{2\langle \check{\mathbf{A}}'^2 \rangle} + i\check{\mathbf{B}}' \right|^2 |\psi(\vec{r})|^2 d\vec{r},$$

(donde los operadores están en representación de coordenadas), y que por lo tanto la relación de Heisenberg se reduce a una igualdad en aquellos estados que satisfacen la ecuación

$$\left\{ \frac{\langle \check{\mathbf{C}} \rangle \check{\mathbf{A}}'}{2\langle \check{\mathbf{A}}'^2 \rangle} + i\check{\mathbf{B}}' \right\} |\psi\rangle = 0.$$

Determine estos estados en representación de coordenadas si  $\check{\mathbf{A}} = \check{\mathbf{x}}$  y  $\check{\mathbf{B}} = \check{\mathbf{p}}$  (una dimensión). Defina  $x_0 = \langle \check{\mathbf{x}} \rangle$  y  $p_0 = \langle \check{\mathbf{p}} \rangle$ .

# Capítulo 3

## Las ecuaciones básicas de la Mecánica Cuántica.

### 3.1 Introducción Semiclásica para partículas libres.

En esta sección mencionaremos algunos resultados de la Electrodinámica Clásica y de la así llamada Física Moderna (la Mecánica Cuántica Antigua), resultados que motivarán los postulados de la Mecánica Cuántica desarrollados en la sección siguiente.

Los trabajos de Max Planck sobre la radiación del cuerpo negro (1900) y Albert Einstein (1905) sobre el efecto fotoeléctrico llevaron a la conclusión de que la radiación electromagnética (luz) posee ambas, propiedades ondulatorias y corpusculares. La emisión y absorción de radiación ocurre en *quanta*, llamados fotones.

Analicemos brevemente las ecuaciones básicas que se tienen para las ondas electromagnéticas y/o los fotones.

La propagación de las ondas electromagnéticas (luz), viene determinada por la ecuación de onda

$$\nabla^2 \psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(\vec{r}, t) . \quad (3.1)$$

Una onda electromagnética monocromática de frecuencia  $\nu$  que se propaga en la dirección  $\hat{k}$  viene representada por una onda plana del tipo

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} . \quad (3.2)$$

Aquí  $\omega = 2\pi\nu$  es la frecuencia angular y  $\vec{k} = k\hat{k}$  el vector de onda. De (3.2) se deduce que la magnitud del vector de onda  $\vec{k}$  está relacionada con la longitud de onda  $\lambda$  por

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} , \quad k = \left| \vec{k} \right| . \quad (3.3)$$

Para las ondas electromagnéticas, cada componente del campo eléctrico y magnético viene dada por una onda del tipo (3.2). Las densidades de energía y de momento lineal vienen dadas respectivamente por

$$u(\vec{r}, t) = \frac{1}{8\pi} [E^2(\vec{r}, t) + B^2(\vec{r}, t)] ,$$

y

$$\vec{S}(\vec{r}, t) = \frac{1}{4\pi c} \vec{B} \times \vec{E} , \quad \text{Vector de Poynting .}$$

Como  $\vec{E}$  es normal a  $\vec{B}$  y el promedio temporal de la magnitud del campo eléctrico es igual a la del campo magnético, se tiene que

$$u(\vec{r}) = c \left| \vec{S}(\vec{r}) \right| .$$

Si suponemos que la realidad subyacente a estos flujos de energía y momento son unas partículas llamadas fotones, esta última relación implica que

$$E_{\text{fotón}} = p_{\text{fotón}} c . \quad (3.4)$$

Este resultado es consistente con la mecánica relativista. Los fotones viajan siempre con velocidad  $c$ , y por consiguiente deben tener una masa en reposo nula. La relación general entre la energía y el momento para una partícula con masa en reposo  $m$ , en la mecánica relativista, es

$$E = c\sqrt{p^2 + m^2c^2} .$$

Para partículas de masa en reposo nula (en nuestro caso, los fotones) se obtiene precisamente la ecuación (3.4).

De acuerdo a Einstein, la energía de un “quantum” de luz de frecuencia  $\nu$  viene dada por

$$E = \hbar\omega = h\nu , \quad \text{Relación de Planck-Einstein} \quad (3.5)$$

Al sustituir la función de onda dada por (3.2) en la ecuación diferencial, se obtiene

$$k = \frac{\omega}{c} , \quad (3.6)$$

resultado conocido con el nombre de *relación de dispersión*. El hecho que la relación entre  $k$  y  $\omega$  para las ondas electromagnéticas sea lineal implica que la propagación de las ondas es no dispersiva.

De las ecuaciones (3.5) y (3.6) se deduce que

$$E = c(\hbar k) ,$$

o sea,

$$p = \hbar k .$$

Vectorialmente esta última ecuación queda como:

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} , \quad \text{Relación de Compton.}$$

Las magnitudes  $\{E, \vec{p}c\}$  y  $\{\omega, \vec{k}c\}$  son cuadvectores. Las relaciones de Planck-Einstein y de Compton simplemente dicen que estos cuadvectores son proporcionales:

$$\{E, \vec{p}c\} = \hbar c \{\omega/c, \vec{k}\} . \quad (3.7)$$

De la relación de Compton y ecuación (3.3) se deduce que

$$p = \frac{h}{\lambda}, \quad \text{Relación de de Broglie.} \quad (3.8)$$

Veamos cuál es la situación que se tiene para las partículas con masa no nula  $m$ . Numerosos experimentos mostraron que partículas como los electrones, los protones, etc., bajo ciertas circunstancias manifestaban un comportamiento ondulatorio. El experimento de Davisson y Germer demostró claramente la hipótesis de de Broglie, es decir, mostró claramente que una partícula de masa  $m$  manifiesta un comportamiento ondulatorio, con longitud de onda

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

cuando interactúa con un dispositivo intermedio que pone de manifiesto propiedades ondulatorias. Pero

$$\lambda = \frac{2\pi}{k}, \quad (k = |\vec{k}|),$$

luego la relación

$$\vec{p} = \hbar\vec{k},$$

también es válida para partículas con  $m \neq 0$ .

Aun cuando en estos apuntes comenzaremos desarrollando la mecánica cuántica no-relativista, para no imposibilitar un posterior desarrollo de una teoría relativista, es sensato postular también la proporcionalidad de la energía con la frecuencia angular, es decir,

$$E = \hbar\omega.$$

Partiendo de la idea vaga de que la materia tiene propiedades ondulatorias, supongamos que para el caso de *partículas libres* masivas la *función de onda* que las describe, igual que para los fotones, viene dada por una onda plana del tipo

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = A e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}. \quad (3.9)$$

Guiado por ideas vagas, supondremos, igual que en el caso electromagnético, que el módulo cuadrado de la función de onda será proporcional a la densidad de probabilidad de encontrar la partícula en un punto  $\vec{r}$ :

$$\rho(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t)^* \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = |A|^2. \quad (3.10)$$

La relación entre  $\vec{p}$  y  $E$  para partículas masivas, en el límite no relativista, es

$$E = \frac{p^2}{2m}.$$

Luego la relación de dispersión para partículas materiales toma la forma

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar} \omega. \quad (3.11)$$



La dependencia cuadrática de  $\omega$  con  $k$  implica que la propagación de la onda de la partícula será dispersiva.

¿Cuál será la ecuación de onda, análoga a la ecuación (3.1) que determina la evolución temporal de la onda de una partícula no relativista de masa  $m$ ? Para encontrarla, procedamos en la forma lo más análoga posible al bien conocido caso de las ondas electromagnéticas. Para obtener la ecuación dinámica para las ondas de partículas, derivemos (3.9) con respecto al tiempo  $t$  y a las coordenadas  $\vec{r}$ . Se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = -i\omega \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) , \quad (3.12)$$

$$\vec{\nabla} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = +i\vec{k} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) , \quad (3.13)$$

$$\nabla^2 \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = -k^2 \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) . \quad (3.14)$$

Sustituyendo (3.11) en (3.14) y usando (3.12) se obtiene la ecuación buscada:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) .} \quad (3.15)$$

Esta es la *Ecuación de Schrödinger* para la partícula libre.

Analicemos brevemente las diferencias más importantes que tenemos entre las ondas electromagnéticas y las ondas de partícula.

Una diferencia importante entre (3.1) y (3.15) reside en que en (3.1) aparecen segundas derivadas con respecto al tiempo, mientras que en (3.15) sólo aparecen sus primeras derivadas. Así, para obtener la evolución de un sistema gobernado por la ecuación (3.15) basta con conocer  $\psi(\vec{r}, t)$  en un instante  $t = t_o$ . Para un sistema gobernado por la ecuación (3.1), además de conocer  $\psi(\vec{r}, t_o)$ , también se requiere conocer  $(\partial\psi(\vec{r}, t)/\partial t)_{t=t_o}$ ,  $\forall \vec{r}$ .

Para las ondas electromagnéticas ambas, las velocidades de fase  $v_f = \omega/k$  y de grupo  $v_g = d\omega/dk$ , son iguales a la velocidad de la luz  $c$ . Para las ondas de partículas se tiene que

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{1}{k} \left( \frac{\hbar k^2}{2m} \right) = \frac{p}{2m} = \frac{v}{2} ,$$

y

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk} \left( \frac{\hbar k^2}{2m} \right) = \frac{p}{m} = v ,$$

donde  $v$  es la velocidad de las partículas. La velocidad de fase no transporta información, por lo tanto, no importa que no coincida con la velocidad de la partícula; lo importante es que la velocidad de grupo coincida. Que  $v_f$  sea distinto a  $v_g$  para las ondas de partículas es justamente el origen de que la propagación de la función de onda  $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t)$  sea dispersiva (como veremos más adelante).

Especifiquemos algunas ideas que emergen de (o sugieren) los resultados anteriores.

1. Igual que en el caso electromagnético, en que se pueden construir paquetes de onda, se espera que también con las ondas planas de de Broglie se puedan construir paquetes de

ondas que permitan localizar (dentro de ciertos límites) a una partícula. Igual que en el caso electromagnético, se espera que la probabilidad de encontrar una partícula en un volumen de tamaño  $d^3r$  centrado en  $\vec{r}$ , sea proporcional al cuadrado de la función de onda en ese lugar. (Lo anterior prepara el terreno para el postulado de Born).

2. La ecuación (3.13) la podemos reescribir de la forma

$$-i\hbar\vec{\nabla}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \hbar\vec{k}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \vec{p}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) .$$

El momento  $\vec{p}$  es un observable, mientras que  $-i\hbar\vec{\nabla} \equiv \vec{p}^{(op)}$  es un operador diferencial. Algo parecido ocurre con la ecuación (3.12). Al reescribirla queda como

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \hbar\omega\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = E\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) . \quad (3.16)$$

La energía  $E$  es un observable mientras que  $-i\hbar\partial/\partial t$  es un operador diferencial. Lo anterior prepara el terreno para el postulado 2 de la Mecánica Cuántica: A cada observable hay asociado un operador.

3. Si el Hamiltoniano coincide con la energía (es decir, si  $\partial H/\partial t = 0$ ), entonces la ecuación (3.16) puede escribirse como sigue

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = H\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) ,$$

preparando el terreno para el postulado 5.

4. La relación

$$(\text{Operador}) \cdot \psi = (\text{Observable}) \cdot \psi ,$$

sugiere que un *observable* es siempre un autovalor del operador asociado a tal observable. Esta observación prepara el terreno para el postulado 3.

5. Sea  $\vec{r}^{(op)} = (x^{(op)}, y^{(op)}, z^{(op)})$  un operador que actúa en el espacio de funciones simplemente multiplicando tal función por  $\vec{r}$ . Evaluemos el conmutador  $[x^{(op)}, p_x^{(op)}]$ . Se tiene

$$\begin{aligned} [x^{(op)}, p_x^{(op)}] f(x) &= (x^{(op)}p_x^{(op)} - p_x^{(op)}x^{(op)}) f(x) \\ &= x \left( -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \right) f(x) - \left( -i\hbar\frac{\partial}{\partial x} \right) [x f(x)] \\ &= -i\hbar f(x) . \end{aligned}$$

Procediendo de manera análoga para los otros conmutadores se demuestra que

$$\frac{-i}{\hbar} [x_{\alpha}^{(op)}, p_{\beta}^{(op)}] = \delta_{\alpha\beta} .$$

Este es el mismo resultado que se encuentra en la mecánica clásica para el corchete de Poisson de  $x_{\alpha}$  y  $p_{\beta}$ . Este comentario prepara el terreno para el postulado 4.

## 3.2 Los postulados.

### Postulado 1:

Cada sistema tiene asociado un determinado espacio vectorial  $\mathcal{H}$  sobre los complejos; a cada estado posible del sistema le corresponde un vector de dicho espacio; a tal vector lo llamaremos “función de estado”. Recíprocamente, cada vector de  $\mathcal{H}$  tiene asociado un estado físico posible del sistema. Dos vectores  $|\psi\rangle$  y  $|\phi\rangle \in \mathcal{H}$  corresponden al mismo estado físico si y sólo si  $|\psi\rangle = \alpha|\phi\rangle$ , con  $\alpha \in \mathbb{C}$ . La función de estado de un sistema contiene el máximo grado posible de información sobre el sistema. Usualmente se eligen normalizados los vectores de estado,  $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ .

### Postulado 2:

Cada observable físico  $Q$  tiene asociado un operador autohermítico  $\check{Q}$ . Los únicos resultados posibles de la medición  $Q$  son los autovalores del operador  $\check{Q}$ . Denotemos tales autovalores por  $\{q_n\}$ . Como efecto de la medición, el sistema queda representado por el autovector  $|q_n\rangle$  del operador  $\check{Q}$ , teniéndose

$$\check{Q}|q_n\rangle = q_n|q_n\rangle .$$

Postulado de Werner Heisenberg. Si el sistema se encontraba “preparado” ya en un autoestado de  $\check{Q}$ , digamos  $|q_m\rangle$ , entonces el proceso de medición no alterará su estado, de modo que el resultado de tal proceso de medición será  $q_m$ .

Notar que los autoestados  $\{|q_n\rangle\}$  del operador  $\check{Q}$  constituyen un conjunto completo, es decir,

$$\sum_n |q_n\rangle\langle q_n| = \mathbf{1} .$$

### Postulado 3:

Consideremos un sistema en el estado  $\Psi$  y sea  $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$  su vector asociado. Sea  $A$  un observable físico y  $\check{A} = \sum_n a_n |a_n\rangle\langle a_n|$  el operador asociado; (acá  $a_n$  y  $|a_n\rangle$  son los autovalores y autovectores de  $\check{A}$ ). Elijamos el vector correspondiente al estado inicial  $\Psi$  normalizado, *i.e.*  $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$ . Entonces la probabilidad de obtener  $a_n$  como resultado de la medición es (Postulado de Max Born).

$$P_n = |\langle a_n | \Psi \rangle|^2 . \quad (3.17)$$

Observación:

$$\begin{aligned} \sum_n P_n &= \sum_n |\langle a_n | \psi \rangle|^2 = \sum_n \langle \psi | a_n \rangle \langle a_n | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \left( \sum_n |a_n\rangle\langle a_n| \right) | \psi \rangle = \langle \psi | \psi \rangle = 1 , \end{aligned}$$

es decir, la suma de todas las probabilidades parciales de los posibles resultados es 1.

Si  $\langle\psi|\psi\rangle \neq 1$ , entonces (3.17) se reemplaza por

$$P_n = \frac{|\langle a_n | \psi \rangle|^2}{\sum_n |\langle a_n | \psi \rangle|^2} = \frac{|\langle a_n | \psi \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} .$$

Si el espectro de  $\check{\mathbf{A}}$  es continuo, es decir,  $\check{\mathbf{A}} = \int dk a(k) |k\rangle \langle k|$  y  $|\Psi\rangle = \int dk |k\rangle \langle k|\Psi\rangle$ , entonces el rol de un aparato de medición es seleccionar estados en un margen  $(k, k + dk)$ . Piénsese, por ejemplo, en un imán selector de velocidades de un haz de protones. En tal caso  $dk$  depende de la colimación elegida para el haz emergente, la cual no puede ser arbitrariamente chica. La probabilidad de observar los protones vendrá dada por

$$P(k, k + dk) = \int_k^{k+dk} dk' |\langle k' | \psi \rangle|^2 .$$

Luego resulta natural extender el postulado de Born a este caso como sigue: Para el caso de un operador con espectro continuo, la probabilidad de que, como resultado de la medición, se obtenga un valor entre  $k$  y  $k + dk$  es

$$|\langle k | \psi \rangle|^2 dk = P(k) dk .$$

#### Postulado 4:

Consideremos dos observables clásicos  $\mathcal{A}(q_j, p_j)$ ,  $\mathcal{B}(q_j, p_j)$ , cualesquiera. Acá  $q_j$  son las coordenadas y  $p_j$  los respectivos momentos canónicamente conjugados, con  $j = 1, 2, 3, \dots, N$ , donde  $N$  es el número de grados de libertad del sistema. La asignación de operadores  $\check{\mathbf{A}}$ ,  $\check{\mathbf{B}}$  a los observables cuánticos asociados se efectúa de modo que en el límite de condiciones macroscópicas del sistema (es decir, para  $\hbar \rightarrow 0$ ) se tenga la siguiente correspondencia:

$$-\frac{i}{\hbar} [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} \{\mathcal{A}, \mathcal{B}\} ,$$

donde  $\{\mathcal{A}, \mathcal{B}\}$  es el corchete de Poisson de las variables clásicas, es decir,

$$\{\mathcal{A}, \mathcal{B}\} = \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial q_j} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial p_j} - \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial p_j} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial q_j} \right\} .$$

#### Postulado 5:

Sean  $|\psi(t)\rangle$  la función de estado y  $\check{\mathbf{H}}$  el operador Hamiltoniano de un sistema físico. La evolución temporal de la función de estado está gobernada por la ecuación

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \check{\mathbf{H}} |\psi(t)\rangle .}$$

#### Comentarios:

Los postulados 1 y 2 establecen el marco formal de la Teoría Cuántica, el cual se sitúa en un espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$  complejo, en general de dimensión infinita no numerable. Esto contrasta enormemente con el marco formal de la Mecánica Clásica, que se sitúa en el espacio de fase  $\{q_j, p_j\}$  de dimensión  $2N$ , donde  $N$  es el número de grados de libertad del sistema.

También es destacable que la Mecánica Cuántica trabaje en forma *necesaria* con números complejos. A nivel de teorías clásicas el uso de los complejos es simplemente un artificio cómodo, pero no es una necesidad ineludible.

La relación entre el formalismo cuántico y los observables físicos se hace en los postulados 2 y 3. Los postulados 4 y 5 tienen por objeto asegurar el *Principio de Correspondencia* de

Niels Bohr, entregando al mismo tiempo prescripciones precisas para asociar operadores con observables.

Adicionalmente el postulado 5 indica la ley de evolución temporal del vector de estado *en ausencia de medición*. En tal caso existe una ley perfectamente *determinista* que, conociendo el estado en  $t = 0$ , permite predecir el estado del sistema en el instante  $t$ . En contraste a esta ley determinista, el postulado 3 (parte b) de Born habla de una variación brusca de la función de estado al hacerse una medición ( $|\Psi\rangle \longrightarrow |a_n\rangle$ ); tal cambio no es determinista sino que de naturaleza estadística.

Este “doble standard” de la teoría cuántica causó en un comienzo diversas controversias, presentándose hipótesis sobre “variables escondidas” inobservables. El matemático von Neumann probó luego que tales variables no pueden aparecer si mantenemos el marco formal de la Mecánica Cuántica. Hoy en día la controversia ha cesado casi del todo, pues la Física tiene por objeto central la descripción de los observables (si bien puede retener objetos inobservables directamente, como la función de onda o el potencial, en la medida que le den elegancia al formalismo).

### 3.3 Conjunto completo de observables compatibles.

Consideremos un sistema cuántico cualquiera y sea  $\mathcal{H}$  el espacio de Hilbert asociado. Sea  $\check{\mathbf{A}}$  un operador asociado a un observable  $A$ . Como hemos señalado ya anteriormente, es posible elegir la base de  $\mathcal{H}$  de modo que  $\check{\mathbf{A}}$  sea diagonal. Sin embargo, en general, existen varios vectores bases con un mismo autovalor para  $\check{\mathbf{A}}$ , digamos

$$\check{\mathbf{A}}|\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle = \alpha |\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle,$$

siendo  $\beta, \gamma$ , etc. índices adicionales, índices de degeneración, que permiten especificar unívocamente cada autovector de  $\check{\mathbf{A}}$ . De este modo  $\{|\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle\}$  es una base de  $\mathcal{H}$  rotulada de un modo unívoco.

Definimos operadores  $\check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{C}}, \dots$ , como sigue:

$$\begin{aligned}\check{\mathbf{A}} &= \sum_{\alpha\beta\gamma\dots} \alpha |\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle \langle \alpha, \beta, \gamma, \dots|, \\ \check{\mathbf{B}} &= \sum_{\alpha\beta\gamma\dots} \beta |\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle \langle \alpha, \beta, \gamma, \dots|, \\ \check{\mathbf{C}} &= \sum_{\alpha\beta\gamma\dots} \gamma |\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle \langle \alpha, \beta, \gamma, \dots|, \dots \text{ etc.}\end{aligned}$$

Denominamos por *conjunto completo de observables compatibles* al conjunto

$$\{\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{C}}, \dots\} \text{ cumpliéndose } \begin{cases} \check{\mathbf{A}}|\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle = \alpha |\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle, \\ \check{\mathbf{B}}|\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle = \beta |\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle, \\ \check{\mathbf{C}}|\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle = \gamma |\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle, \\ \text{etc.} \end{cases}$$

Mediante tal conjunto podemos rotular unívocamente los vectores bases del espacio de Hilbert. Por otro lado es obvio que

$$[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] = 0, \quad [\check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{C}}] = 0, \quad [\check{\mathbf{C}}, \check{\mathbf{A}}] = 0, \quad \text{etc.}$$

Podemos pensar el problema al revés (esto es, del modo como se presenta en la práctica): Conocemos los observables físicos del sistema. Buscamos el máximo conjunto de observables físicos que conmutan entre sí, de modo de rotular con ellos en forma unívoca la base del espacio de Hilbert. De acuerdo a la sección 2.15, existe una base del espacio de Hilbert en que tal conjunto es diagonal. Si todavía queda alguna ambigüedad en la rotulación de tal base, es porque se puede insertar un nuevo operador asociado a los índices que remueven tal ambigüedad. Sin embargo, deben evitarse redundancias; por ejemplo, al incluir  $\check{\mathbf{B}}$  no debe incluirse  $\check{\mathbf{B}}^2$ , con autovalor  $\beta^2$ .

Veamos un ejemplo concreto: consideremos un sistema de una sola partícula sin estructura interna (es decir, no posee spin ni se trata de una partícula compuesta <sup>1</sup>). En tal caso todo observable físico  $A$  es función de las variables canónicas conjugadas  $\vec{r}$  y  $\vec{p}$  (afirmación válida tanto clásica como cuánticamente). Estos dos observables dan origen a seis operadores:  $\check{\mathbf{r}} = (\check{x}, \check{y}, \check{z})$  y  $\check{\mathbf{p}} = (\check{p}_x, \check{p}_y, \check{p}_z)$ . Sin embargo, al retener  $(\check{x}, \check{y}, \check{z})$  dentro del *conjunto completo de observables compatibles*, ya no podemos incluir ni  $\check{p}_x$ , ni  $\check{p}_y$ , ni  $\check{p}_z$ . (Efectivamente, como en la mecánica clásica el paréntesis de Poisson entre  $x$  y  $p_x$  es no nulo, de acuerdo al principio de correspondencia se tiene entonces que los operadores cuánticos asociados  $\check{x}$  y  $\check{p}_x$  no conmutan). Por lo tanto  $\check{\mathbf{r}}$  constituye un conjunto completo de observables compatibles del sistema.

Así pues, para una partícula sin estructura interna, una base completa del espacio de Hilbert es  $\{|\vec{r}\rangle = |x, y, z\rangle \text{ con } \vec{r} \in \mathbb{R}^3\}$ , con  $\check{x}_j |\vec{r}\rangle = x_j |\vec{r}\rangle$ ,  $j = 1, 2, 3$ . Otras posibles bases de  $\mathcal{H}$  que se usan en ocasiones son: la base de momento  $\{|p_x, p_y, p_z\rangle\}$  y la base  $\{\check{\mathbf{p}}^2, \check{\mathbf{L}}^2, \check{\mathbf{L}}_z\}$ , donde  $\check{\mathbf{L}}$  es el operador asociado al momento angular  $\check{\mathbf{L}} = \check{\mathbf{r}} \times \check{\mathbf{p}}$ . Otra opción, algo artificial, pero útil si  $\partial H / \partial z = 0$ , es  $\{\check{x}, \check{y}, \check{p}_z\}$ .

Generalizando el razonamiento anterior a un sistema de  $N$  partículas sin spin, tendremos que  $\{\check{\mathbf{r}}_1, \check{\mathbf{r}}_2, \dots, \check{\mathbf{r}}_N\}$  es un posible conjunto completo de observables compatibles, siendo la base asociada de  $\mathcal{H}$ :  $\{|\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N\rangle \text{ con } (\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \in \mathbb{R}^N\}$ .

### 3.4 Los operadores $\check{\mathbf{p}}$ y $\check{\mathbf{r}}$ .

Los observables  $\vec{p}$  y  $\vec{r}$  tienen asociados, de acuerdo al postulado 2, operadores autohermíticos  $\check{\mathbf{p}}$  y  $\check{\mathbf{r}}$ . Cada uno de estos operadores posee un conjunto completo ortonormal de autoestados. Sean  $\{|\vec{r}\rangle\}_{\vec{r} \in \mathbb{R}^3}$  y  $\{|\vec{p}\rangle\}_{\vec{p} \in \mathbb{R}^3}$  estos autoestados, es decir

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{p}}|\vec{p}\rangle &= \vec{p}|\vec{p}\rangle, \\ \check{\mathbf{r}}|\vec{r}\rangle &= \vec{r}|\vec{r}\rangle. \end{aligned}$$

<sup>1</sup>En realidad diversas partículas compuestas se pueden tratar como *simples* mientras las condiciones de energía disponibles no pongan de manifiesto tal estructura. Tal es el caso, por ejemplo, de las partículas  $\alpha$ ; para energías bastante menores que 20.1 [MeV] (la energía del primer estado excitado) la partícula no revelará su estructura interna.

Ambos conjuntos de vectores son conjuntos completos del espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$  asociado al sistema de una partícula sin spin. Es importante darse cuenta que la dimensión de  $\mathcal{H}$  no es 3 sino que, abusando un poco del lenguaje, “corresponde a  $\mathbb{R}^3$ ”; es decir, así como el conjunto  $\{1, 2, 3\}$  sirve de rótulos para una base completa del espacio tridimensional ordinario, el conjunto  $\{\mathbb{R}^3 = \text{los puntos del espacio ordinario}\}$ , sirve de rótulos a  $\mathcal{H}$ . También es importante darse cuenta que tanto  $\{|\vec{r}\rangle\}$  como  $\{|\vec{p}\rangle\}$  son bases del **mismo espacio**  $\mathcal{H}$ , por lo tanto  $|\vec{r}\rangle$  se puede expresar en términos de combinaciones lineales de los  $|\vec{p}\rangle$  y viceversa. La completitud de estas bases la podemos expresar como sigue:

$$\int_{\mathbb{R}^3} d^3r |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}| = \mathbf{1} = \int_{\mathbb{R}^3} d^3p |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}| .$$

Los vectores los supondremos ortonormalizados, es decir,

$$\langle\vec{r}|\vec{r}'\rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}') ,$$

y

$$\langle\vec{p}|\vec{p}'\rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}') .$$

Si la partícula tiene un momento  $\vec{p}_o$  bien definido, entonces el sistema estará representado por el vector  $|\vec{p}_o\rangle$ . Esto concuerda con el postulado de Born, pues

$$\langle\vec{p}|\vec{p}_o\rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}_o) , \quad (3.18)$$

de modo que la densidad de probabilidad  $|\langle\vec{p}|\vec{p}_o\rangle|^2$  de obtener un valor  $\vec{p} \neq \vec{p}_o$  es nula. Al efectuar una medición del momento se obtendrá con certeza el valor  $\vec{p}_o$ .

Si la partícula tiene un momentum  $\vec{p} = \vec{p}_o$  bien definido, la densidad de probabilidad de encontrar la partícula en el lugar  $\vec{r}$  vendrá dada por  $|\langle\vec{r}|\vec{p}_o\rangle|^2$  (postulado 3). De acuerdo a la sección (3.1), es razonable el *ansatz*:

$$\langle\vec{r}|\vec{p}_o\rangle = A e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}_o \cdot \vec{r}} = \psi_{\vec{p}_o}(\vec{r}) . \quad (3.19)$$

Podemos verificar que (3.19) es una elección correcta, reproduciendo (3.18)

$$\begin{aligned} \langle\vec{p}|\vec{p}'\rangle &= \delta(\vec{p} - \vec{p}') = \int d^3r \langle\vec{p}|\vec{r}\rangle \langle\vec{r}|\vec{p}'\rangle \\ &= \int d^3r \langle\vec{r}|\vec{p}\rangle^* \langle\vec{r}|\vec{p}'\rangle \\ &= |A|^2 \int d^3r e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}' - \vec{p}) \cdot \vec{r}} \\ &= |A|^2 (2\pi)^3 \delta\left(\frac{\vec{p}' - \vec{p}}{\hbar}\right) = |A|^2 (2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p} - \vec{p}') . \end{aligned}$$

De paso, este resultado fija la constante  $A$ . Eligiendo la constante de normalización de manera que sea real y positiva se obtiene

$$A = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} .$$

Resumiendo: La función de onda de una partícula libre con un momento bien definido  $\vec{p}_o$  viene dada por

$$\langle \vec{r} | \vec{p}_o \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}_o \cdot \vec{r}} = \psi_{\vec{p}_o}(\vec{r}) . \quad (3.20)$$

Las expresiones (3.18) y (3.20) corresponden a representaciones concretas de la función de estado  $|\vec{p}_o\rangle$ , en el espacio de momento y el espacio de coordenadas, respectivamente. Ambas funciones tienen el mismo contenido físico: son la función de onda de una partícula con momento lineal bien definido  $\vec{p}_o$ . Nótese que cada una de las funciones es la transformada de Fourier de la otra.

Si una partícula libre tiene la posición bien definida, por ejemplo, si se tiene la certeza de que la partícula se encuentra en el punto  $\vec{r} = \vec{r}_o$ , entonces el sistema viene descrito por el vector  $|\vec{r}_o\rangle \in \mathcal{H}$ . La densidad de probabilidad de obtener el valor  $\vec{p}$  al medir el momento de la partícula, de acuerdo al postulado 3, es proporcional a  $|\langle \vec{p} | \vec{r}_o \rangle|^2$ . A partir de (3.20) se obtiene que

$$\langle \vec{p} | \vec{r}_o \rangle = \langle \vec{r}_o | \vec{p} \rangle^* = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p} \cdot \vec{r}_o} .$$

Sea  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  una función de estado arbitraria y consideremos el estado  $|\phi\rangle = \check{\mathbf{P}}|\psi\rangle$ . Conocido  $|\psi\rangle$  en una representación concreta, ¿qué podemos decir de  $|\phi\rangle$  en tal representación? En la representación de coordenadas se tiene:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \phi \rangle &= \langle \vec{r} | \check{\mathbf{P}} | \psi \rangle \\ &= \int d^3p' \langle \vec{r} | \check{\mathbf{P}} | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \psi \rangle \\ &= \int d^3p' \vec{p}' \langle \vec{r} | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \psi \rangle \\ &= \int d^3p' \frac{\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}' \cdot \vec{r}} \langle \vec{p}' | \psi \rangle \\ &= \int d^3p' \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} (-i\hbar\vec{\nabla}) e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}' \cdot \vec{r}} \langle \vec{p}' | \psi \rangle \\ &= -i\hbar\vec{\nabla} \int d^3p' \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}' \cdot \vec{r}} \langle \vec{p}' | \psi \rangle \\ &= -i\hbar\vec{\nabla} \int d^3p' \langle \vec{r} | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \psi \rangle \\ &= (-i\hbar\vec{\nabla}) \langle \vec{r} | \psi \rangle , \end{aligned}$$

o sea,

$$\langle \vec{r} | \check{\mathbf{P}} | \psi \rangle = (-i\hbar\vec{\nabla}) \langle \vec{r} | \psi \rangle . \quad (3.21)$$

El operador  $\check{\mathbf{P}}$  opera sobre funciones complejas de  $\vec{r}$  como el operador  $-i\hbar\vec{\nabla}$ .



Repitamos el análisis, pero ahora en la representación de momento. El operador  $\check{\mathbf{p}}$  es autohermítico, ya que corresponde a un observable físico (postulado 2), luego:

$$\begin{aligned}\langle \check{\mathbf{p}} | \check{\mathbf{p}} | \psi \rangle &= (\check{\mathbf{p}} | \check{\mathbf{p}} \rangle)^\dagger | \psi \rangle = (\check{\mathbf{p}} | \check{\mathbf{p}} \rangle)^\dagger | \psi \rangle \\ &= \check{\mathbf{p}} (| \check{\mathbf{p}} \rangle)^\dagger | \psi \rangle = \check{\mathbf{p}} \langle \check{\mathbf{p}} | \psi \rangle ,\end{aligned}$$

resultando,

$$\langle \check{\mathbf{p}} | \check{\mathbf{p}} | \psi \rangle = \check{\mathbf{p}} \langle \check{\mathbf{p}} | \psi \rangle , \quad (3.22)$$

El operador  $\check{\mathbf{p}}$  opera sobre funciones complejas de  $\vec{p}$  simplemente multiplicándolas por  $\vec{p}$ .

Podemos repetir lo anterior, pero ahora para el operador  $\check{\mathbf{r}}$ . Sea  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  una función de estado arbitraria y consideremos el estado  $|\varphi\rangle = \check{\mathbf{r}}|\psi\rangle$ . Conocido  $|\psi\rangle$  en una representación concreta, ¿qué podemos decir de  $|\varphi\rangle$  en tal representación? En la representación de coordenadas se tiene:

$$\begin{aligned}\langle \check{\mathbf{r}} | \varphi \rangle &= \langle \check{\mathbf{r}} | \check{\mathbf{r}} | \psi \rangle = (\check{\mathbf{r}}^\dagger | \check{\mathbf{r}} \rangle)^\dagger | \psi \rangle \\ &= (\check{\mathbf{r}} | \check{\mathbf{r}} \rangle)^\dagger | \psi \rangle = (\check{\mathbf{r}} | \check{\mathbf{r}} \rangle)^\dagger | \psi \rangle \\ &= \check{\mathbf{r}} (| \check{\mathbf{r}} \rangle)^\dagger | \psi \rangle = \check{\mathbf{r}} \langle \check{\mathbf{r}} | \psi \rangle ,\end{aligned}$$

o sea,

$$\langle \check{\mathbf{r}} | \check{\mathbf{r}} | \psi \rangle = \check{\mathbf{r}} \langle \check{\mathbf{r}} | \psi \rangle . \quad (3.23)$$

El operador  $\check{\mathbf{r}}$  opera sobre funciones complejas de  $\vec{r}$  simplemente multiplicándolas por  $\vec{r}$ .

Finalmente, evaluemos  $\langle \vec{p} | \varphi \rangle = \langle \vec{p} | \check{\mathbf{r}} | \psi \rangle$ , con  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ . Se tiene,

$$\begin{aligned}\langle \vec{p} | \check{\mathbf{r}} | \psi \rangle &= \int d^3 r' \langle \vec{p} | \check{\mathbf{r}} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \psi \rangle \\ &= \int d^3 r' \vec{r}' \langle \vec{p} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3 r' \vec{r}' e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}'} \langle \vec{r}' | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3 r' (i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{p}}) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}'} \langle \vec{r}' | \psi \rangle \\ &= (i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{p}}) \int d^3 r' \langle \vec{p} | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \psi \rangle = (i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{p}}) \langle \vec{p} | \psi \rangle ,\end{aligned}$$

finalmente obtenemos

$$\langle \vec{p} | \check{\mathbf{r}} | \psi \rangle = (i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{p}}) \langle \vec{p} | \psi \rangle . \quad (3.24)$$

En (3.24) el operador diferencial  $\vec{\nabla}_{\vec{p}}$  viene dado por

$$\vec{\nabla}_{\vec{p}} \equiv \hat{x} \frac{\partial}{\partial p_x} + \hat{y} \frac{\partial}{\partial p_y} + \hat{z} \frac{\partial}{\partial p_z} .$$

El operador  $\check{\mathbf{r}}$  opera sobre funciones complejas de  $\vec{p}$  como el operador  $+i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{p}}$ .

### 3.4.1 El conmutador $[\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}]$ .

Denotemos por  $\check{\mathbf{p}}_i$ , con  $i = 1, 2, 3$ , a las componentes cartesianas del operador  $\check{\mathbf{p}}$ , y análogamente para  $\check{\mathbf{r}}$ :

$$\check{\mathbf{p}} = (\check{\mathbf{p}}_1, \check{\mathbf{p}}_2, \check{\mathbf{p}}_3) , \quad \check{\mathbf{r}} = (\check{\mathbf{r}}_1, \check{\mathbf{r}}_2, \check{\mathbf{r}}_3) .$$

Evaluemos el conmutador  $[\check{\mathbf{r}}_i, \check{\mathbf{p}}_j]$ . Sea  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  un vector arbitrario. Se tiene:

$$\langle \check{\mathbf{r}} | [\check{\mathbf{r}}_i, \check{\mathbf{p}}_j] | \psi \rangle = \langle \check{\mathbf{r}} | \check{\mathbf{r}}_i \check{\mathbf{p}}_j | \psi \rangle - \langle \check{\mathbf{r}} | \check{\mathbf{p}}_j \check{\mathbf{r}}_i | \psi \rangle . \quad (3.25)$$

Evaluemos separadamente los dos términos del lado derecho de esta ecuación:

$$\langle \check{\mathbf{r}} | \check{\mathbf{r}}_i \check{\mathbf{p}}_j | \psi \rangle = r_i \langle \check{\mathbf{r}} | \check{\mathbf{p}}_j | \psi \rangle = -i\hbar r_i \frac{\partial}{\partial r_j} \langle \check{\mathbf{r}} | \psi \rangle . \quad (3.26)$$

El otro término

$$\begin{aligned} \langle \check{\mathbf{r}} | \check{\mathbf{p}}_j \check{\mathbf{r}}_i | \psi \rangle &= \langle \check{\mathbf{r}} | \check{\mathbf{p}}_j (\check{\mathbf{r}}_i | \psi \rangle) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_j} (\langle \check{\mathbf{r}} | \check{\mathbf{r}}_i | \psi \rangle) \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_j} (r_i \langle \check{\mathbf{r}} | \psi \rangle) \\ &= -i\hbar \left\{ \left( \frac{\partial r_i}{\partial r_j} \right) \langle \check{\mathbf{r}} | \psi \rangle + r_i \frac{\partial}{\partial r_j} \langle \check{\mathbf{r}} | \psi \rangle \right\} \\ &= -i\hbar \delta_{ij} \langle \check{\mathbf{r}} | \psi \rangle - i\hbar r_i \frac{\partial}{\partial r_j} \langle \check{\mathbf{r}} | \psi \rangle . \end{aligned} \quad (3.27)$$

Sustituyendo (3.26) y (3.27) en (3.25) se obtiene

$$\begin{aligned} \langle \check{\mathbf{r}} | [\check{\mathbf{r}}_i, \check{\mathbf{p}}_j] | \psi \rangle &= i\hbar \delta_{ij} \langle \check{\mathbf{r}} | \psi \rangle \\ &= \langle \check{\mathbf{r}} | (i\hbar \delta_{ij} \check{\mathbf{1}}) | \psi \rangle . \end{aligned}$$

Como  $\langle \check{\mathbf{r}} |$  es arbitrario, se sigue que el efecto del operador  $[\check{\mathbf{r}}_i, \check{\mathbf{p}}_j]$  es igual al del operador  $i\hbar \delta_{ij} \check{\mathbf{1}}$ :

$$\boxed{[\check{\mathbf{r}}_i, \check{\mathbf{p}}_j] = i\hbar \delta_{ij} \check{\mathbf{1}}} . \quad (3.28)$$

Este resultado es consistente con el postulado 4. En efecto, en la mecánica clásica el corchete de Poisson de  $r_i$  y  $p_j$  es

$$\{r_i, p_j\} = \sum_k \left( \frac{\partial r_i}{\partial r_k} \frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial r_i}{\partial p_k} \frac{\partial p_j}{\partial r_k} \right) = \delta_{ij} .$$

En vista de este resultado queda plenamente justificado el *ansatz* (3.12) sobre las autofunciones de momento así como los resultados (3.21) – (3.24) para las representaciones de los operadores de posición y momento, respectivamente.

Las relaciones de conmutación, en forma explícita, son

$$[\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}}_y] = [\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}}_z] = [\check{\mathbf{y}}, \check{\mathbf{p}}_x] = [\check{\mathbf{y}}, \check{\mathbf{p}}_z] = [\check{\mathbf{z}}, \check{\mathbf{p}}_x] = [\check{\mathbf{z}}, \check{\mathbf{p}}_y] = \check{\mathbf{0}} ,$$

y

$$[\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}}_x] = [\check{\mathbf{y}}, \check{\mathbf{p}}_y] = [\check{\mathbf{z}}, \check{\mathbf{p}}_z] = i\hbar .$$

### 3.4.2 El conmutador $[\check{\mathbf{x}}_i, \check{\mathbf{x}}_j]$ y $[\check{\mathbf{p}}_i, \check{\mathbf{p}}_j]$ .

El operador  $\check{\mathbf{r}} = (\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{y}}, \check{\mathbf{z}}) = (\check{\mathbf{x}}_1, \check{\mathbf{x}}_2, \check{\mathbf{x}}_3)$  es un trío de operadores que es diagonal en una misma base, luego cada uno de estos operadores conmuta con los demás. Es decir,

$$[\check{\mathbf{x}}_i, \check{\mathbf{x}}_j] = 0 .$$

Esta relación por supuesto es consistente con el postulado 4, ya que el paréntesis de Poisson clásico de dos componentes de la posición es nulo.

Por las mismas razones también las distintas componentes del operador momento conmutan, teniéndose

$$[\check{\mathbf{p}}_i, \check{\mathbf{p}}_j] = 0 .$$

Note que no siempre las distintas componentes de un operador vectorial conmutan entre sí. Por ejemplo, definamos el operador *Momento Angular* por  $\check{\mathbf{L}} \equiv \check{\mathbf{r}} \times \check{\mathbf{p}} = (\check{\mathbf{L}}_1, \check{\mathbf{L}}_2, \check{\mathbf{L}}_3)$ , para este operador se cumple que (Problema 3-1):

$$[\check{\mathbf{L}}_i, \check{\mathbf{L}}_j] = i\epsilon_{ijk}\hbar\check{\mathbf{L}}_k .$$

### 3.4.3 Otras relaciones que involucran a $\check{\mathbf{r}}$ y $\check{\mathbf{p}}$ .

A continuación encontraremos otras expresiones útiles que involucran a los operadores posición y momento. Consideremos una función de estado  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ , normalizada (es decir, con  $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ ).

Evaluemos el efecto del operador  $\check{\mathbf{p}}$  sobre el vector  $|\psi\rangle$ . Se tiene:

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{p}}|\psi\rangle &= \check{\mathbf{p}} \int d^3p' |\vec{p}'\rangle \langle\vec{p}'|\psi\rangle \\ &= \int d^3p' \check{\mathbf{p}} |\vec{p}'\rangle \langle\vec{p}'|\psi\rangle \\ &= \int d^3p' \vec{p}' |\vec{p}'\rangle \langle\vec{p}'|\psi\rangle , \end{aligned}$$

es decir, se puede hacer la identificación

$$\check{\mathbf{p}} = \int d^3p' |\vec{p}'\rangle \vec{p}' \langle\vec{p}'| . \quad (3.29)$$

Otra expresión se obtiene al expandir  $|\psi\rangle$  en términos de los autovectores del operador posición. En ese caso se tiene:

$$\check{\mathbf{p}}|\psi\rangle = \check{\mathbf{p}} \int d^3r |\vec{r}\rangle \langle\vec{r}|\psi\rangle ,$$

de donde,

$$\begin{aligned}
 \langle \check{\mathbf{p}}' | \check{\mathbf{P}} | \psi \rangle &= \int d^3 r \langle \check{\mathbf{p}}' | \check{\mathbf{P}} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \psi \rangle \\
 &= \int d^3 r \check{\mathbf{p}}' \langle \check{\mathbf{p}}' | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \psi \rangle \\
 &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3 r \check{\mathbf{p}}' e^{-\frac{i}{\hbar} \check{\mathbf{p}}' \cdot \vec{r}} \langle \vec{r} | \psi \rangle \\
 &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3 r \left\{ (i\hbar \vec{\nabla}) e^{-\frac{i}{\hbar} \check{\mathbf{p}}' \cdot \vec{r}} \right\} \langle \vec{r} | \psi \rangle .
 \end{aligned}$$

Integrando por partes se obtiene

$$\langle \check{\mathbf{p}}' | \check{\mathbf{P}} | \psi \rangle = \frac{i\hbar}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[ e^{-\frac{i}{\hbar} \check{\mathbf{p}}' \cdot \vec{r}} \langle \vec{r} | \psi \rangle \Big|_{\vec{r}=\infty} - \int d^3 r e^{-\frac{i}{\hbar} \check{\mathbf{p}}' \cdot \vec{r}} \vec{\nabla} \langle \vec{r} | \psi \rangle \right] .$$

Pero  $\langle \vec{r} | \psi \rangle \Big|_{\vec{r}=\infty} = 0$ , de lo contrario  $|\psi\rangle$  no estaría normalizada), por lo tanto,

$$\begin{aligned}
 \langle \check{\mathbf{p}}' | \check{\mathbf{P}} | \psi \rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3 r e^{-\frac{i}{\hbar} \check{\mathbf{p}}' \cdot \vec{r}} (-i\hbar \vec{\nabla}) \langle \vec{r} | \psi \rangle \\
 &= \int d^3 r \langle \check{\mathbf{p}}' | \vec{r} \rangle (-i\hbar \vec{\nabla}) \langle \vec{r} | \psi \rangle \\
 &= \langle \check{\mathbf{p}}' | \left\{ \int d^3 r | \vec{r} \rangle (-i\hbar \vec{\nabla}) \langle \vec{r} | \right\} | \psi \rangle ,
 \end{aligned}$$

es decir, podemos hacer la identificación

$$\check{\mathbf{P}} = -i\hbar \int d^3 r | \vec{r} \rangle \vec{\nabla} \langle \vec{r} | , \quad (3.30)$$

Análogamente, para el operador  $\check{\mathbf{R}}$  se obtienen las relaciones

$$\check{\mathbf{R}} = i\hbar \int d^3 p | \vec{p} \rangle \vec{\nabla}_{\vec{p}} \langle \vec{p} | \quad (3.31)$$

y

$$\check{\mathbf{R}} = \int d^3 r | \vec{r} \rangle \vec{r} \langle \vec{r} | . \quad (3.32)$$

Como ejercicio, usemos la ecuación (3.31) y deduzcamos nuevamente la ecuación (3.24). Tenemos:

$$\begin{aligned}
 \langle \vec{p} | \check{\mathbf{R}} | \psi \rangle &= \langle \vec{p} | \left( i\hbar \int d^3 p' | \vec{p}' \rangle \vec{\nabla}_{\vec{p}'} \right) \langle \vec{p}' | | \psi \rangle \\
 &= i\hbar \int d^3 p' \langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle \vec{\nabla}_{\vec{p}'} \langle \vec{p}' | \psi \rangle \\
 &= i\hbar \int d^3 p' \delta(\vec{p} - \vec{p}') \vec{\nabla}_{\vec{p}'} \langle \vec{p}' | \psi \rangle = (i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{p}}) \langle \vec{p} | \psi \rangle .
 \end{aligned}$$

### 3.5 Uso del principio de correspondencia.

En esta sección usaremos el principio de correspondencia (postulado 4) para construir los operadores cuánticos a partir de un observable clásico. Por simplicidad, sólo consideremos un grado de libertad en una primera etapa.

Supongamos que tenemos los operadores cuánticos asociados a las variables canónicas conjugadas  $x \longrightarrow \check{\mathbf{x}}, p \longrightarrow \check{\mathbf{p}}$ , cumpliéndose

$$[\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}}] = i\hbar \check{\mathbf{1}} . \quad (3.33)$$

#### Proposición 3.1

$$\check{\mathbf{p}}\check{\mathbf{x}}^n = \check{\mathbf{x}}^n\check{\mathbf{p}} + \mathcal{O}(\hbar) .$$

La demostración de esta proposición es directa.

**Proposición 3.2** Análogamente a la proposición anterior se tiene que

$$\check{\mathbf{x}}\check{\mathbf{p}}^m = \check{\mathbf{p}}^m\check{\mathbf{x}} + \mathcal{O}(\hbar) ,$$

o más general:

$$\check{\mathbf{x}}^k\check{\mathbf{p}}^m = \check{\mathbf{p}}^m\check{\mathbf{x}}^k + \mathcal{O}(\hbar) .$$

#### Proposición 3.3

$$\check{\mathbf{p}} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}^j] = [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}^j] \check{\mathbf{p}} + \mathcal{O}(\hbar^2) .$$

**Demostración** Por inducción, para  $j = 1$  se tiene

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{p}} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}] &= \check{\mathbf{p}}\check{\mathbf{p}}\check{\mathbf{x}} - \check{\mathbf{p}}\check{\mathbf{x}}\check{\mathbf{p}} \\ &= \check{\mathbf{p}}(\check{\mathbf{x}}\check{\mathbf{p}} - i\hbar\check{\mathbf{1}}) - (\check{\mathbf{x}}\check{\mathbf{p}} - i\hbar\check{\mathbf{1}})\check{\mathbf{p}} \\ &= [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}] \check{\mathbf{p}} \end{aligned}$$

o sea, la hipótesis se cumple para  $j = 1$ . Supongamos que la proposición es cierta para  $j = n$ , es decir, que se cumple

$$\check{\mathbf{p}} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}^n] = [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}^n] \check{\mathbf{p}} + \mathcal{O}(\hbar^2) ,$$

y demostremos que entonces también es válida para  $j = n + 1$ . Se tiene:

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{p}} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}^{n+1}] &= \check{\mathbf{p}} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}^n \check{\mathbf{x}}] \\ &= \check{\mathbf{p}}\check{\mathbf{x}}^n [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}] + \check{\mathbf{p}} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}^n] \check{\mathbf{x}} \\ &= \check{\mathbf{p}}\check{\mathbf{x}}^n (-i\hbar\check{\mathbf{1}}) + ([\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}^n] \check{\mathbf{p}} + \mathcal{O}(\hbar^2))\check{\mathbf{x}} \end{aligned} \quad (3.34)$$

Por otra parte

$$\begin{aligned}
[\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}^{n+1}] \check{\mathbf{p}} &= [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}^n \check{\mathbf{x}}] \check{\mathbf{p}} \\
&= \check{\mathbf{x}}^n [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}] \check{\mathbf{p}} + [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}^n] \check{\mathbf{x}} \check{\mathbf{p}} \\
&= (-i\hbar) \check{\mathbf{x}}^n \check{\mathbf{p}} + [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}^n] (\check{\mathbf{p}} \check{\mathbf{x}} + i\hbar \mathbf{1}) \\
&= -i\hbar \check{\mathbf{x}}^n \check{\mathbf{p}} + [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}^n] \check{\mathbf{p}} \check{\mathbf{x}} + (\check{\mathbf{p}} \check{\mathbf{x}}^n - \check{\mathbf{x}}^n \check{\mathbf{p}}) i\hbar
\end{aligned}$$

Pero

$$-i\hbar \check{\mathbf{x}}^n \check{\mathbf{p}} + (\check{\mathbf{p}} \check{\mathbf{x}}^n - \check{\mathbf{x}}^n \check{\mathbf{p}}) i\hbar = -i\hbar \check{\mathbf{p}} \check{\mathbf{x}}^n + \mathcal{O}(\hbar^2) ,$$

luego

$$[\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}^{n+1}] \check{\mathbf{p}} = \check{\mathbf{p}} \check{\mathbf{x}}^n (-i\hbar \mathbf{1}) + ([\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}^n] \check{\mathbf{p}} + \mathcal{O}(\hbar^2)) \check{\mathbf{x}} . \quad (3.35)$$

Comparando las ecuaciones (3.34) y (3.35) se demuestra la proposición.

q.e.d.

**Proposición 3.4** Sea  $\mathcal{B}(x, p)$  un observable clásico con el desarrollo

$$\mathcal{B}(x, p) = \sum_{k, \ell} B_{k\ell} x^k p^\ell .$$

Introduzcamos el operador  $\check{\mathbf{B}} = \mathcal{B}(\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}})$ . Entonces

$$[\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] \check{\mathbf{p}} = \check{\mathbf{p}} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) .$$

Demostración queda como ejercicio.(Problema 3-2):

**Proposición 3.5** Sea  $\mathcal{B}(x, p)$  un observable clásico con el desarrollo

$$\mathcal{B}(x, p) = \sum_{k, \ell} B_{k\ell} x^k p^\ell .$$

Introduzcamos el operador  $\check{\mathbf{B}} = \mathcal{B}(\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}})$ . Entonces

$$[\check{\mathbf{p}}^\ell, \check{\mathbf{B}}] = \ell \check{\mathbf{p}}^{\ell-1} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) .$$

Note que esta última ecuación también puede ser escrita en la forma

$$[\check{\mathbf{p}}^\ell, \check{\mathbf{B}}] = \left[ \frac{\partial}{\partial p} (p)^\ell \right]_{\check{\mathbf{p}}} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) . \quad (3.36)$$

**Demostración** Por inducción, es evidente que la proposición se cumple para  $\ell = 1$ . Supongamos entonces que la proposición se cumple para  $\ell = n$ , es decir, que

$$[\check{\mathbf{p}}^n, \check{\mathbf{B}}] = n \check{\mathbf{p}}^{n-1} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) .$$

y demostremos que entonces se cumple también para  $\ell = n + 1$ . Se tiene:

$$\begin{aligned}
[\check{\mathbf{p}}^{n+1}, \check{\mathbf{B}}] &= [\check{\mathbf{p}}^n \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] \\
&= \check{\mathbf{p}}^n [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + [\check{\mathbf{p}}^n, \check{\mathbf{B}}] \check{\mathbf{p}} \\
&= \check{\mathbf{p}}^n [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + (n \check{\mathbf{p}}^{n-1} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2)) \check{\mathbf{p}} \\
&= \check{\mathbf{p}}^n [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + n \check{\mathbf{p}}^{n-1} \check{\mathbf{p}} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) \\
&= (n + 1) \check{\mathbf{p}}^n [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) .
\end{aligned}$$

q.e.d.

Se tiene también una ecuación análoga a la ecuación (3.36) para el operador  $\check{\mathbf{x}}$ :

$$[\check{\mathbf{x}}^\ell, \check{\mathbf{B}}] = \left[ \frac{\partial}{\partial x} (x)^\ell \right]_{\check{\mathbf{x}}} [\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) . \quad (3.37)$$

**Proposición 3.6** Sean  $\mathcal{A}(x, p)$  y  $\mathcal{B}(x, p)$  dos observables clásicos con los desarrollos

$$\mathcal{A}(x, p) = \sum_{k, \ell} A_{k\ell} x^k p^\ell ,$$

y

$$\mathcal{B}(x, p) = \sum_{k, \ell} B_{k\ell} x^k p^\ell .$$

Introduzcamos los operadores  $\check{\mathbf{A}} = \mathcal{A}(\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}})$  y  $\check{\mathbf{B}} = \mathcal{B}(\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}})$ . Entonces

$$[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] = \frac{\partial \check{\mathbf{A}}}{\partial p} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + \frac{\partial \check{\mathbf{A}}}{\partial x} [\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) \quad (3.38)$$

**Demostración**

$$\begin{aligned}
[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] &= \left[ \sum_{k, \ell} A_{k\ell} \check{\mathbf{x}}^k \check{\mathbf{p}}^\ell, \check{\mathbf{B}} \right] \\
&= \sum_{k, \ell} A_{k\ell} (\check{\mathbf{x}}^k [\check{\mathbf{p}}^\ell, \check{\mathbf{B}}] + [\check{\mathbf{x}}^k, \check{\mathbf{B}}] \check{\mathbf{p}}^\ell) \\
&= \sum_{k, \ell} A_{k\ell} \left\{ \check{\mathbf{x}}^k \left( \frac{\partial}{\partial p} (p^\ell) \right)_{\check{\mathbf{p}}} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + \left( \frac{\partial}{\partial x} (x^k) \right)_{\check{\mathbf{x}}} \check{\mathbf{p}}^\ell [\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) \right\} \\
&= \left( \sum_{k, \ell} A_{k\ell} x^k \frac{\partial p^\ell}{\partial p} \right)_{\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}}} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + \left( \sum_{k, \ell} A_{k\ell} \frac{\partial x^k}{\partial x} p^\ell \right)_{\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}}} [\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) \\
&= \left( \frac{\partial \check{\mathbf{A}}}{\partial p} \right) [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + \left( \frac{\partial \check{\mathbf{A}}}{\partial x} \right) [\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) ,
\end{aligned}$$

donde

$$\frac{\partial \check{\mathbf{A}}}{\partial p} \equiv \left( \frac{\partial \mathcal{A}(x, p)}{\partial p} \right)_{x \rightarrow \check{\mathbf{x}}, p \rightarrow \check{\mathbf{p}}}, \quad \frac{\partial \check{\mathbf{A}}}{\partial x} \equiv \left( \frac{\partial \mathcal{A}(x, p)}{\partial x} \right)_{x \rightarrow \check{\mathbf{x}}, p \rightarrow \check{\mathbf{p}}}$$

q.e.d.

Usando la ecuación (3.38) con  $\check{\mathbf{A}} = \check{\mathbf{x}}$  y  $\check{\mathbf{A}} = \check{\mathbf{p}}$  se obtiene que

**Corolario 1:**

$$[\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{B}}] = i\hbar \frac{\partial \check{\mathbf{B}}}{\partial p}, \quad (3.39)$$

**Corolario 2:**

$$[\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] = -i\hbar \frac{\partial \check{\mathbf{B}}}{\partial x}. \quad (3.40)$$

Para magnitudes vectoriales las últimas relaciones quedan de la forma

$$[\check{\vec{r}}, f(\check{\vec{r}}, \check{\vec{p}})] = +i\hbar \left( \vec{\nabla}_{\check{\vec{p}}} f(\check{\vec{r}}, \check{\vec{p}}) \right) \check{\mathbf{1}}$$

y

$$[\check{\vec{p}}, f(\check{\vec{r}}, \check{\vec{p}})] = -i\hbar \left( \vec{\nabla} f(\check{\vec{r}}, \check{\vec{p}}) \right) \check{\mathbf{1}}.$$

Sea  $\mathcal{A}(x, p)$  un observable clásico con el desarrollo

$$\mathcal{A}(x, p) = \sum_{k, \ell} A_{k\ell} x^k p^\ell,$$

y consideremos el operador  $\check{\mathbf{A}}$  que se obtiene al reemplazar los escalares  $x$  y  $p$  por los operadores  $\check{\mathbf{x}}$  y  $\check{\mathbf{p}}$  en el argumento. Note que al seguir este procedimiento, para un mismo operador clásico se pueden obtener distintos operadores cuánticos. Ejemplo: Sea  $\mathcal{A}(x, p) = xp = px$ ; clásicamente el orden de los dos escalares  $p$  y  $x$  no importa. Sin embargo, al sustituir  $x$  y  $p$  por los respectivos operadores se encuentran dos operadores cuánticos distintos:

$$\check{\mathbf{A}}_1 = \check{\mathbf{x}}\check{\mathbf{p}},$$

y

$$\check{\mathbf{A}}_2 = \check{\mathbf{p}}\check{\mathbf{x}} = \check{\mathbf{x}}\check{\mathbf{p}} - i\hbar\check{\mathbf{1}} = \check{\mathbf{A}}_1 - i\hbar\check{\mathbf{1}}.$$

Los dos operadores difieren en un término del orden de  $\hbar$ .

El ejemplo anterior es un caso particular de un resultado general: Los distintos operadores cuánticos que se pueden obtener al reemplazar en un operador clásico  $\mathcal{A}(x, p)$ , los escalares  $x$  y  $p$  por los respectivos operadores cuánticos  $\check{\mathbf{x}}$  y  $\check{\mathbf{p}}$  son iguales, excepto por términos del orden de  $\hbar$ .



**Teorema 3.1** Sean  $\mathcal{A}(x, p)$  y  $\mathcal{B}(x, p)$  dos observables clásicos, con corchete de Poisson

$$\{ \mathcal{A}, \mathcal{B} \} = \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial p} - \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial p} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial x} = \{ \mathcal{A}, p \} \{ x, \mathcal{B} \} - \{ x, \mathcal{A} \} \{ \mathcal{B}, p \} . \quad (3.41)$$

Para cuantizar  $\mathcal{A}$  y  $\mathcal{B}$ , es decir, para asociarles los respectivos operadores autohermíticos, basta con reemplazar los escalares  $x$  y  $p$  por los operadores  $\check{x}$  y  $\check{p}$  en el argumento, y posteriormente asegurar hermiticidad:

$$\mathcal{A}(x, p) \longrightarrow \mathcal{A}(\check{x}, \check{p}) \longrightarrow \check{\mathbf{A}} = \frac{1}{2} [ \mathcal{A}(\check{x}, \check{p}) + \mathcal{A}^\dagger(\check{x}, \check{p}) ] . \quad (3.42)$$

(Idem para el operador  $\mathcal{B}$ ).

**Demostración** Reemplazando (3.39) y (3.40) en (3.38) se obtiene

$$\begin{aligned} [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] &= i\hbar \left[ -\frac{\partial \check{\mathbf{A}}}{\partial p} \frac{\partial \check{\mathbf{B}}}{\partial x} + \frac{\partial \check{\mathbf{A}}}{\partial x} \frac{\partial \check{\mathbf{B}}}{\partial p} + \mathcal{O}(\hbar^2) \right] \\ &= i\hbar \{ \mathcal{A}(x, p), \mathcal{B}(x, p) \}_{x \rightarrow \check{x}, p \rightarrow \check{p}} . \end{aligned}$$

q.e.d.

Hemos demostrado que al sustituir en un observable clásico los escalares  $x$  y  $p$  por los operadores cuánticos  $\check{x}$  y  $\check{p}$ , entonces el operador cuántico cumplirá, excepto por términos del orden de  $\hbar^2$  con el principio de correspondencia.

Como ya hemos visto, a partir de un observable clásico, en ocasiones, se pueden obtener varios operadores cuánticos que satisfacen el principio de correspondencia. Los distintos operadores difieren en términos del orden de  $\hbar$ . El hecho que el operador asociado a un observable tenga que ser autohermítico frecuentemente (pero no siempre) restringe la elección a un operador único. No obstante, en los casos de interés real (y no meramente académico) este tipo de ambigüedades no se dan, al menos para el tipo de sistemas considerados en este curso.

En la mecánica clásica la energía cinética viene dada por  $T = p^2/(2m)$ . Esto sugiere usar en la mecánica cuántica no relativista, para el operador asociado a la energía cinética, la expresión

$$\check{\mathbf{T}} = \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2m} .$$

Cuando  $\check{\mathbf{T}}$  opera sobre funciones complejas de  $\vec{r}$  hay que sustituir  $\check{\mathbf{p}}$  por el operador diferencial  $(-i\hbar\vec{\nabla})$ , obteniéndose

$$\check{\mathbf{T}} \longrightarrow \frac{(-i\hbar\vec{\nabla})^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 .$$

Note que con esta prescripción la ecuación de evolución temporal del postulado 5, en la representación de coordenadas, para la partícula libre, lleva a la ecuación de Schrödinger dada por (3.15).

**Resumen:**

Variable dinámica	Operador	Operador en el espacio $\vec{r}$	Operador en el espacio $\vec{p}$
Posición	$\check{\mathbf{r}}$	$\vec{r}$	$i\hbar\vec{\nabla}_{\vec{p}}$
Momento	$\check{\mathbf{p}}$	$-i\hbar\vec{\nabla}$	$\vec{p}$
Energía Cinética	$\check{\mathbf{T}}$	$-\hbar^2\nabla^2/(2m)$	$p^2/(2m)$

### 3.6 Ilustraciones.

Para familiarizarnos con los conceptos desarrollados en las secciones anteriores, usémoslos para obtener los siguientes resultados:

#### 3.6.1 Teorema del virial.

Sea  $\check{\mathbf{A}}$  un operador arbitrario y  $\check{\mathbf{H}}$  el hamiltoniano del sistema, con  $\check{\mathbf{H}}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle$ . Entonces

$$\begin{aligned} \langle \Psi_n | [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{H}}] | \Psi_m \rangle &= \langle \Psi_n | (\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{H}} - \check{\mathbf{H}}\check{\mathbf{A}}) | \Psi_m \rangle \\ &= (E_m - E_n) \langle \Psi_n | \check{\mathbf{A}} | \Psi_m \rangle \\ &= (E_m - E_n) A_{nm} \end{aligned}$$

Consideremos el caso particular en que  $\check{\mathbf{A}} = -i\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}}/\hbar$ . Para el conmutador de  $\check{\mathbf{A}}$  con  $\check{\mathbf{H}}$  se obtiene:

$$\begin{aligned} [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{H}}] &= -\frac{i}{\hbar} [\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{H}}] \\ &= -\frac{i}{\hbar} [\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{H}}] \cdot \check{\mathbf{p}} - \frac{i}{\hbar} \check{\mathbf{r}} \cdot [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{H}}] \\ &= \left( \vec{\nabla}_{\vec{p}} \check{\mathbf{H}} \right) \cdot \check{\mathbf{p}} - \check{\mathbf{r}} \cdot \vec{\nabla} \check{\mathbf{H}} \\ &= \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{m} - \check{\mathbf{r}} \cdot \vec{\nabla} \check{\mathbf{V}} = 2\check{\mathbf{T}} + \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{F}}, \end{aligned}$$

donde  $\check{\mathbf{F}}$  es el operador asociado al observable *fuerza*. Evaluamos ahora el valor esperado del conmutador para autoestados del Hamiltoniano. Se tiene

$$\begin{aligned} 0 &= \langle \Psi_n | [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{H}}] | \Psi_n \rangle \\ &= \langle \Psi_n | (2\check{\mathbf{T}} + \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{F}}) | \Psi_n \rangle, \end{aligned}$$

es decir,

$$2\langle \check{\mathbf{T}} \rangle_{\Psi_n} = -\langle \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{F}} \rangle_{\Psi_n}.$$

Este resultado es conocido con el nombre de *Teorema del Virial*.

### 3.6.2 Regla de suma de Thomas-Reine-Kuhn.

Considere una partícula de masa  $m$  que se mueve, en una dimensión, bajo la influencia de un potencial  $V(x)$  arbitrario. El Hamiltoniano en este caso es

$$\check{H} = \frac{\check{p}^2}{2m} + V(\check{x}) .$$

Los niveles de energía de la partícula se obtienen resolviendo la ecuación de Schrödinger

$$\check{H}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle , \quad n = 0, 1, 2, \dots .$$

Definamos

$$f_{0 \rightarrow n} \equiv \frac{2m}{\hbar^2} (E_n - E_0) |\langle \Psi_n | \check{x} | \Psi_0 \rangle|^2 .$$

Demostraremos que

$$\sum_n f_{0 \rightarrow n} = 1 .$$

Este resultado es conocido por el nombre de *Regla de suma de Thomas-Reine-Kuhn*.

**Demostración**

$$\begin{aligned} \sum_n f_{0 \rightarrow n} &= \frac{2m}{\hbar^2} \sum_n (E_n - E_0) |\langle \Psi_n | \check{x} | \Psi_0 \rangle|^2 \\ &= \frac{m}{\hbar^2} \sum_n 2(E_n - E_0) \langle \Psi_0 | \check{x} | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \check{x} | \Psi_0 \rangle \\ &= \frac{m}{\hbar^2} \sum_n ((E_n - E_0) \langle \Psi_0 | \check{x} | \Psi_n \rangle) \langle \Psi_n | \check{x} | \Psi_0 \rangle + \\ &\quad + \frac{m}{\hbar^2} \sum_n \langle \Psi_0 | \check{x} | \Psi_n \rangle ((E_n - E_0) \langle \Psi_n | \check{x} | \Psi_0 \rangle) . \end{aligned}$$

Pero

$$\begin{aligned} (E_n - E_0) \langle \Psi_0 | \check{x} | \Psi_n \rangle &= -\langle \Psi_0 | (E_0 \check{x} - \check{x} E_n) | \Psi_n \rangle \\ &= -\langle \Psi_0 | \check{H} \check{x} - \check{x} \check{H} | \Psi_n \rangle = -\langle \Psi_0 | [\check{H}, \check{x}] | \Psi_n \rangle . \end{aligned}$$

Análogamente,

$$(E_n - E_0) \langle \Psi_n | \check{x} | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_n | [\check{H}, \check{x}] | \Psi_0 \rangle .$$

Luego para la sumatoria se obtiene

$$\begin{aligned} \sum_n f_{0 \rightarrow n} &= -\frac{m}{\hbar^2} \sum_n \langle \Psi_0 | [\check{H}, \check{x}] | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \check{x} | \Psi_0 \rangle \\ &\quad + \frac{m}{\hbar^2} \sum_n \langle \Psi_0 | \check{x} | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | [\check{H}, \check{x}] | \Psi_0 \rangle \\ &= -\frac{m}{\hbar^2} \langle \Psi_0 | [\check{H}, \check{x}] \check{x} | \Psi_0 \rangle + \frac{m}{\hbar^2} \langle \Psi_0 | \check{x} [\check{H}, \check{x}] | \Psi_0 \rangle \\ &= \frac{m}{\hbar^2} \langle \Psi_0 | [\check{x}, [\check{H}, \check{x}]] | \Psi_0 \rangle . \end{aligned}$$

Evaluemos el conmutador que aparece en la última ecuación. Se tiene

$$[\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{x}}] = [\check{\mathbf{T}}, \check{\mathbf{x}}] = \frac{1}{2m} [\check{\mathbf{p}}^2, \check{\mathbf{x}}] = -i\hbar \frac{\check{\mathbf{p}}}{m},$$

luego,

$$[\check{\mathbf{x}}, [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{x}}]] = -\frac{i\hbar}{m} [\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}}] = \frac{\hbar^2}{m}.$$

Con este resultado se obtiene, finalmente,

$$\sum_n f_{0 \rightarrow n} = \frac{m}{\hbar^2} \langle \Psi_o | \frac{\hbar^2}{m} | \Psi_o \rangle = 1.$$

q.e.d.

## 3.7 Paquetes de ondas y transformada de Fourier.

### 3.7.1 Superposición de ondas planas.

La evolución temporal de las funciones de estado  $|\psi(t)\rangle$  viene dada por la ecuación del postulado 5:

$$\check{\mathbf{H}}|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle.$$

Para la partícula libre

$$\check{\mathbf{H}} = \check{\mathbf{T}} = \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2m}.$$

Tomando la ecuación de evolución temporal y realizando el producto interno con  $\langle \vec{r} |$  se obtiene

$$\langle \vec{r} | \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2m} | \psi(t) \rangle = i\hbar \langle \vec{r} | \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle.$$

Pero

$$\langle \vec{r} | \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2m} | \psi(t) \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle,$$

y

$$\langle \vec{r} | \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle,$$

luego, introduciendo la notación

$$\psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle,$$

se obtiene

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{r},t) ,}$$

que es la ecuación de Schrödinger para la partícula libre.

Soluciones particulares de esta ecuación son las ondas planas monocromáticas

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r},t) = \langle \vec{r} | \vec{k}, t \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} .$$

Note que  $\omega = \omega(k)$  es una función de  $k$ . En efecto,  $\omega$  está relacionada con  $\vec{k}$  a través de la relación de dispersión de la partícula libre (ecuación 3.11)

$$\omega = \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} .$$

La relación de normalización  $\langle \vec{k}' | \vec{k} \rangle = \delta(\vec{k} - \vec{k}')$ , en términos de las funciones  $\varphi_{\vec{k}}$ , es

$$\begin{aligned} \delta(\vec{k} - \vec{k}') &= \langle \vec{k}', t | \vec{k}, t \rangle \\ &= \int d^3r \langle \vec{k}', t | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \vec{k}, t \rangle \\ &= \int d^3r \varphi_{\vec{k}'}^*(\vec{r},t) \varphi_{\vec{k}}(\vec{r},t) . \end{aligned}$$

Como la ecuación de Schrödinger es *lineal*, una combinación lineal o superposición de soluciones también será solución.

Las funciones  $\varphi_{\vec{k}}(\vec{r},t) = \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle e^{-i\omega t}$  son soluciones de la ecuación de Schrödinger  $\forall \vec{k}$ . Construyamos una superposición de tales ondas planas:

$$\int d^3k \Psi(\vec{k}) \left( \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle e^{-i\omega(k)t} \right) = \Psi(\vec{r},t) . \quad (3.43)$$

Estamos usando la misma letra  $\Psi$  para denotar a dos funciones distintas: la función  $\Psi(\vec{k})$ , que da las amplitudes de las distintas componentes de la superposición, y  $\Psi(\vec{r},t)$ , que es la función de estado resultante en la representación de coordenadas. Como veremos en estas notas, usar el mismo símbolo para estas dos funciones resultará muy cómodo. De hecho, las dos funciones simbolizan el mismo estado físico. (En la práctica las dos funciones sólo se distinguirán por su argumento).

Si la función  $\Psi(\vec{k})$  es continua (y tiende a 0 para  $|k| \rightarrow \infty$ ) entonces el resultado de la superposición de ondas planas da origen a un *paquete de ondas* de “ancho” finito, es decir,  $\Psi(\vec{r},t)$  tendrá una distribución espacial en cierto modo localizada.

Como  $\Psi(\vec{r},t)$  es la expresión en la representación de coordenadas de una función de estado  $|\Psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$ , podemos para ella usar la notación  $\Psi(\vec{r},t) = \langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle$ .

Para  $t = 0$  queda

$$\langle \vec{r} | \Psi(0) \rangle = \int d^3k \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle \Psi(\vec{k}) .$$

Por otra parte, introduciendo el operador identidad, se tiene

$$\langle \vec{r} | \Psi(0) \rangle = \int d^3k \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | \Psi(0) \rangle .$$

De las dos últimas ecuaciones se deduce que los coeficientes de expansión (o de superposición)  $\Psi(\vec{k})$  no son otra cosa que la función de estado  $|\Psi\rangle$  en la representación de momento, es decir,

$$\Psi(\vec{k}) = \langle \vec{k} | \Psi(0) \rangle .$$

Así pues, para  $t = 0$ , en las dos notaciones, la convencional y la de Dirac, tenemos respectivamente

$$\langle \vec{r} | \Psi(0) \rangle = \int d^3k \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | \Psi(0) \rangle ,$$

y

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \Psi(\vec{k}) .$$

Note que  $\Psi(\vec{k})$  es la transformada de Fourier de  $\Psi(\vec{r}, 0)$ , luego también se tiene la relación inversa

$$\langle \vec{k} | \Psi(0) \rangle = \int d^3r \langle \vec{k} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi(0) \rangle ,$$

o, en la notación convencional,

$$\Psi(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3r e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \Psi(\vec{r}, 0) .$$

Obviamente ambas funciones, tanto  $\Psi(\vec{k})$  como  $\Psi(\vec{r})$ , poseen la misma información acerca del sistema. De hecho, toda la información está contenida en el vector  $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ .  $\Psi(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \Psi \rangle$  es la expresión explícita del vector  $|\Psi\rangle$  en el espacio de coordenadas (es decir, son los coeficientes de expansión de  $|\Psi\rangle$  en la base  $\{|\vec{r}\rangle\}$ ) y  $\Psi(\vec{k}) = \langle \vec{k} | \Psi \rangle$  es la expresión explícita del vector  $|\Psi\rangle$  en la representación de momento.  $\Psi(\vec{k})$  y  $\Psi(\vec{r})$  son las componentes del **mismo vector**  $|\Psi\rangle$  en dos bases distintas.

### 3.7.2 Transformada de Fourier.

La transformada de Fourier juega un rol de gran importancia en la mecánica cuántica. Recordamos aquí algunas de sus características.

Sea  $f(x)$  una función compleja y  $f(k)$  su transformada de Fourier (insistimos en usar el mismo símbolo para las dos funciones distintas, cuál es cuál se deduce del argumento). Entonces  $f(x)$  y  $f(k)$  están relacionadas por

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dk f(k) e^{ikx} ,$$

y

$$f(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) e^{-ikx} .$$

En la figura 3.1 se muestran algunos pares de funciones, tales que una es la transformada de Fourier de la otra.

Propiedades importantes de la transformada de Fourier:

1. Tanto más continua es la función  $f(x)$ , tanto más rápido decrece a cero su transformada de Fourier  $f(k)$  para  $k \rightarrow \infty$ . Recíprocamente, tanto más rápido decrece  $f(k)$  para  $k \rightarrow \infty$  tanto más continua es  $f(x)$ .
  - Si  $f(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0$  como  $1/x$  entonces  $f(k)$  es discontinua (pero con un salto de tamaño finito).
  - Si  $f(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0$  como  $1/x^2$  entonces  $f(k)$  es continua, pero su derivada  $f'(k)$  es discontinua.
  - Si  $f(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0$  como  $1/x^3$  entonces  $f(k)$  y  $f'(k)$  son continuas, pero  $f''(k)$  es discontinua.
  - Si la función  $f(x)$  **no** tiende a cero, pero es acotada para  $|x| \rightarrow \infty$ , entonces  $f(k)$  es una función (distribución) que tiene discontinuidades del tipo  $\delta$  de Dirac.
  - Si  $\exists (\partial/\partial k)^n f(k)$ , entonces  $x^n f(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$ .
  - Si  $f(k) \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \mathcal{O}(1/k)^{n+1}$ , entonces  $\exists (\partial/\partial x)^n f(x)$ .
2. Tanto más angosta es la función  $f(x)$ , tanto más ancha es su transformada de Fourier  $f(k)$  y viceversa. Esto está vinculado con el *Principio de Incerteza*. Para una función  $f(x)$  y su transformada de Fourier se cumple rigurosamente que  $\Delta x \Delta k \geq \frac{1}{2}$ , donde

$$(\Delta x)^2 = \langle f | (x - \langle x \rangle)^2 | f \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx (x - \langle x \rangle)^2 |f(x)|^2 ,$$

con

$$\langle x \rangle = \langle f | x | f \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x |f(x)|^2 .$$

y expresiones análogas para  $k$ .

### 3.7.3 Teorema de Parseval.

**Teorema 3.2** Si un paquete de ondas  $\Psi(\vec{r}, t)$  está normalizado en cierto instante  $t = 0$ , entonces estará *siempre* normalizado, o sea,

$$\int d^3r |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \int d^3r |\Psi(\vec{r}, 0)|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle = \int d^3k |\Psi(\vec{k})|^2 .$$

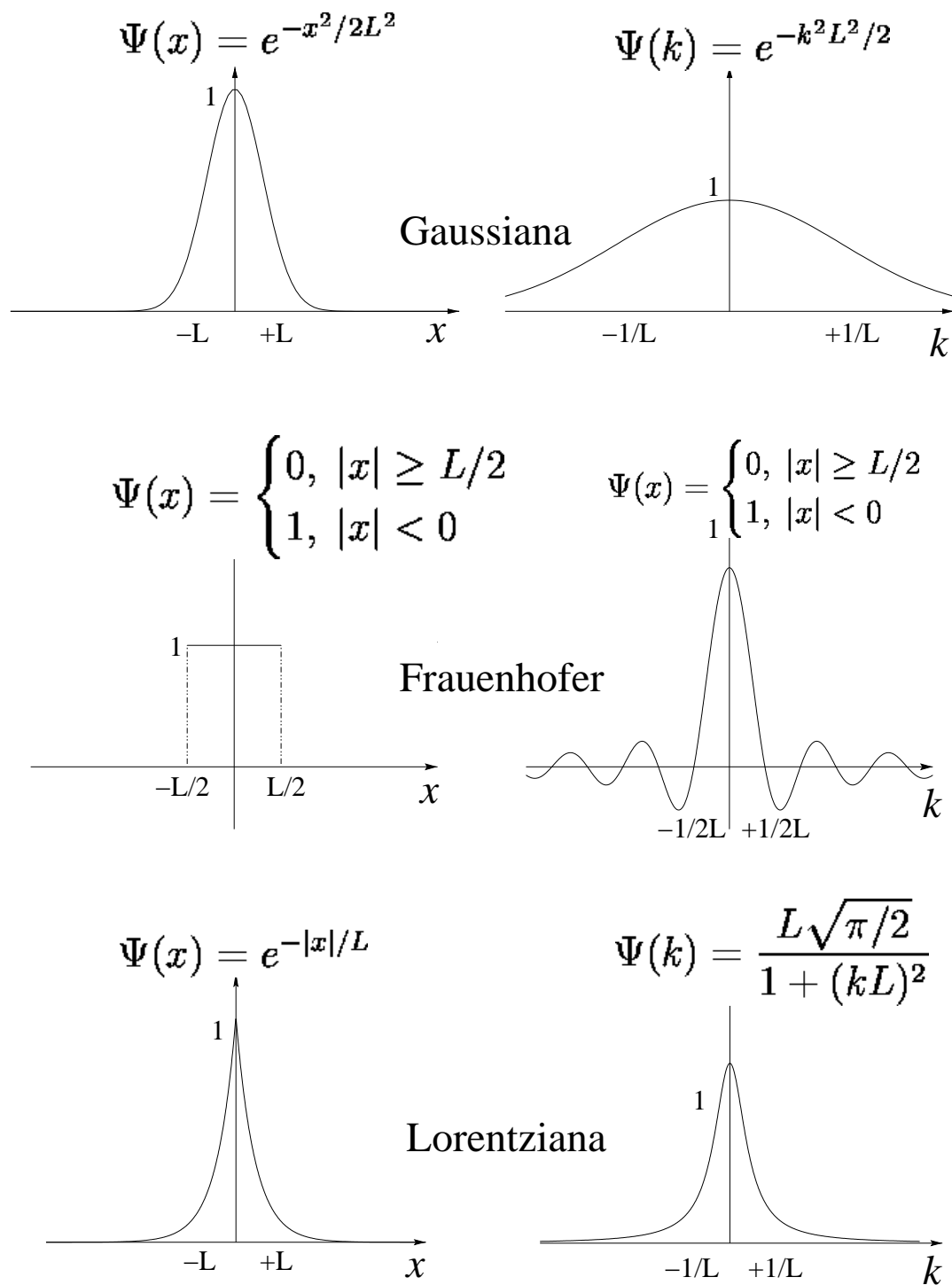


Figura 3.1: Transformada de Fourier de algunas funciones.



**Demostración**

$$\begin{aligned}
\int d^3r |\Psi(\vec{r}, t)|^2 &= \int d^3r \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \\
&= \int d^3r \int d^3k \int d^3k' \left( \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | \Psi \rangle e^{-i\omega(k)t} \right)^* \cdot \left( \langle \vec{r} | \vec{k}' \rangle \langle \vec{k}' | \Psi \rangle e^{-i\omega(k')t} \right) \\
&= \int d^3k' \int d^3k \int d^3r \langle \vec{k} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \vec{k}' \rangle \langle \Psi | \vec{k} \rangle \langle \vec{k}' | \Psi \rangle e^{i(\omega(k) - \omega(k'))t} \\
&= \int d^3k' \int d^3k \langle \vec{k} | \vec{k}' \rangle \langle \Psi | \vec{k} \rangle \langle \vec{k}' | \Psi \rangle e^{i(\omega(k) - \omega(k'))t} \\
&= \int d^3k' \int d^3k \delta(\vec{k} - \vec{k}') \langle \Psi | \vec{k} \rangle \langle \vec{k}' | \Psi \rangle e^{i(\omega(k) - \omega(k'))t} \\
&= \int d^3k \langle \Psi | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | \Psi \rangle = \int d^3k |\Psi(\vec{k})|^2 \\
&= \langle \Psi | \Psi \rangle = \int d^3r \langle \Psi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi \rangle = \int d^3r |\Psi(\vec{r})|^2 .
\end{aligned}$$

q.e.d.

Una demostración alternativa es:

$$\begin{aligned}
\hbar \frac{d}{dt} \langle \Psi | \Psi \rangle &= \hbar \left[ \left( \frac{\partial}{\partial t} \langle \Psi | \right) | \Psi \rangle + \langle \Psi | \left( \frac{\partial}{\partial t} | \Psi \rangle \right) \right] \\
&= \left[ \left( \hbar \frac{\partial}{\partial t} | \Psi \rangle \right)^\dagger | \Psi \rangle + \langle \Psi | \left( \hbar \frac{\partial}{\partial t} | \Psi \rangle \right) \right] \\
&= (-i\check{\mathbf{H}} | \Psi \rangle)^\dagger | \Psi \rangle + \langle \Psi | (-i\check{\mathbf{H}} | \Psi \rangle) \\
&= i \langle \Psi | \check{\mathbf{H}}^\dagger | \Psi \rangle - i \langle \Psi | \check{\mathbf{H}} | \Psi \rangle = 0 ,
\end{aligned}$$

ya que  $\check{\mathbf{H}}^\dagger = \check{\mathbf{H}}$ .

**3.7.4 Propagación de un paquete de ondas.**

Volvamos a la ecuación (3.43) que define la función  $\Psi(\vec{r}, t)$ . Definamos  $\Psi(\vec{k}, t)$  por

$$\Psi(\vec{k}, t) \equiv \langle \vec{k} | \Psi \rangle e^{-i\omega(k)t} ,$$

entonces (3.43) queda

$$\Psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \Psi(\vec{k}, t) ,$$

es decir,  $\Psi(\vec{k}, t)$  es la transformada de Fourier de  $\Psi(\vec{r}, t)$ . La relación inversa es

$$\Psi(\vec{k}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3r e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \Psi(\vec{r}, t) .$$

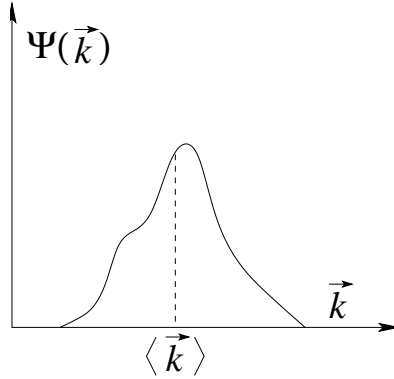


Figura 3.2: Distribución en el espacio de momento de las amplitudes de las distintas componentes de un paquete de ondas.

Supongamos que  $\Psi(\vec{k})$  tiene la forma mostrada en la figura 3.2, y estudiemos cómo el paquete de ondas se propaga en el tiempo.

Expandamos  $\omega(\vec{k})$  en torno a  $\langle \vec{k} \rangle$ :

$$\omega(\vec{k}) = \omega(\langle \vec{k} \rangle) + \vec{\nabla}_{\vec{k}} \omega(\vec{k}) \Big|_{\vec{k}=\langle \vec{k} \rangle} \cdot (\vec{k} - \langle \vec{k} \rangle) + \dots$$

Usando esta expansión se obtiene para el paquete de ondas la expresión:

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \Psi(\vec{k}) e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega(\vec{k}))t} e^{-i(\vec{\nabla}_{\vec{k}} \omega) \cdot (\vec{k} - \langle \vec{k} \rangle)t} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i(\vec{\nabla}_{\vec{k}} \omega(\langle \vec{k} \rangle) \langle \vec{k} \rangle - \omega(\langle \vec{k} \rangle))t} \int d^3k e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \vec{\nabla}_{\vec{k}} \omega(\langle \vec{k} \rangle) \vec{k}t)} \Psi(\vec{k}) \\ &= (\text{factor de fase}) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \Psi(\vec{k}) e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{\nabla}_{\vec{k}} \omega t)} \\ &= (\text{factor de fase}) \Psi(\vec{r} - \vec{\nabla}_{\vec{k}} \omega(\vec{k}) \Big|_{\vec{k}=\langle \vec{k} \rangle} t, 0), \end{aligned}$$

o sea,

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 \approx |\Psi(\vec{r} - (\vec{\nabla}_{\vec{k}} \omega)t, 0)|^2.$$

Para tiempos  $t$  no muy grandes, la función de onda al cuadrado en un punto  $\vec{r}$  es igual a la función de onda en el instante  $t = 0$  pero desplazada en  $(\vec{\nabla}_{\vec{k}} \omega(\vec{k}))_{\vec{k}=\langle \vec{k} \rangle} t = \vec{v}_g \cdot t$ , ver figura 3.3. En la última ecuación,  $\vec{v}_g$  es la velocidad de grupo

$$\vec{v}_g \equiv (\vec{\nabla}_{\vec{k}} \omega(\vec{k}))_{\vec{k}=\langle \vec{k} \rangle}.$$

Despreciar el término cuadrático en la expansión de la frecuencia angular  $\omega(\vec{k})$  es equivalente a despreciar la dispersión del paquete de ondas.

Un análisis crudo del rango de validez de la presente aproximación es el siguiente: En la expansión de la frecuencia angular el término despreciado es

$$\frac{\hbar(\Delta k)^2}{m} \approx \frac{\Delta v}{\Delta x} t,$$

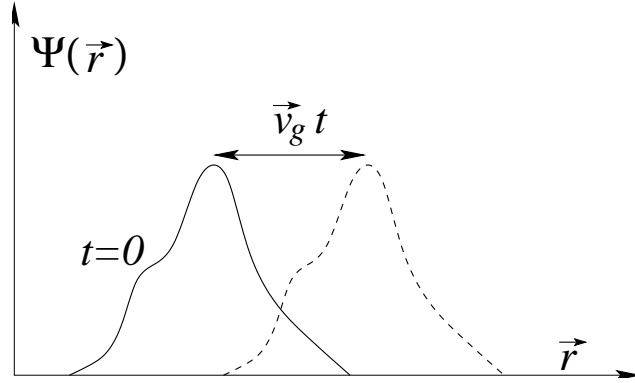


Figura 3.3: Propagación de un paquete de ondas para tiempos no muy grandes.

donde  $\Delta v = \hbar \Delta k / m$  es la dispersión en velocidades y  $\Delta x \sim 1 / \Delta k$  es la dispersión en posición. Para que el término dispersivo sea pequeño debe imponerse  $\Delta x \gg \Delta v t$ . Esto es un resultado bastante natural, pues podemos concebir que la dispersión espacial se incrementa en  $\Delta v t$  para un tiempo  $t$ . Esta conjetura se verificará a continuación para el paquete Gaussiano.

### 3.7.5 Dispersión de un paquete de ondas gaussiano.

Consideremos un paquete de ondas gaussiano:

$$\Psi(\vec{r}) = \Psi(\vec{r}, t = 0) = C e^{-r^2 / (2\sigma_0)^2} = \langle \vec{r} | \Psi \rangle .$$

La transformada de Fourier, que nos da la distribución de momentos del paquete de ondas, también es una gaussiana:

$$\Psi(\vec{k}) = C' e^{-\sigma_0^2 k^2} = \langle \vec{k} | \Psi \rangle .$$

Evaluando las varianzas para la componente  $x$  de este paquete de ondas, se obtiene:

$$\langle (\Delta \check{\mathbf{x}})^2 \rangle = \langle \check{\mathbf{x}}^2 \rangle - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle^2 = \sigma_0^2 ,$$

y

$$\langle (\Delta \check{\mathbf{k}}_x)^2 \rangle = \langle \check{\mathbf{k}}_x^2 \rangle - \langle \check{\mathbf{k}}_x \rangle^2 = \frac{1}{4\sigma_0^2} .$$

Se observa que tanto más ancho es el paquete en el espacio de coordenadas, tanto más angosto es en el espacio de momentos. Para paquetes de ondas gaussianos se cumple que

$$\Delta x \Delta k_x = \sqrt{\langle (\Delta \check{\mathbf{x}})^2 \rangle} \sqrt{\langle (\Delta \check{\mathbf{k}}_x)^2 \rangle} = \frac{1}{2} ,$$

o sea, ocurre justamente el valor mínimo que puede tener este producto de acuerdo al principio de incerteza.

Demostraremos luego que el paquete de ondas gaussiano es el único para el cual se satisface  $\Delta x \Delta k_x = 1/2$ ; para todos los demás se tiene siempre  $\Delta x \Delta k_x > 1/2$ .

Para el paquete de ondas en tres dimensiones se obtiene

$$\langle (\Delta \vec{r})^2 \rangle = \langle (\Delta \vec{x})^2 \rangle + \langle (\Delta \vec{y})^2 \rangle + \langle (\Delta \vec{z})^2 \rangle = 3\sigma_o^2 ,$$

y

$$\langle (\Delta \vec{k})^2 \rangle = \frac{3}{4\sigma_o^2} .$$

Conociendo  $\Psi(\vec{r}, 0)$  en un cierto instante podemos obtener  $\Psi(\vec{r}, t)$  para cualquier instante  $t$ :

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \Psi(\vec{k}) e^{-i\omega(\vec{k})t} \\ &= \frac{C'}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \hbar k^2 t / (2m))} e^{-\sigma_o^2 k^2} . \end{aligned}$$

Al evaluar esta integral (y también la relación entre  $C$  y  $C'$ ) se obtiene el siguiente resultado (demostración queda como el Problema 3-3):

$$\Psi(\vec{r}, t) = C \left( \frac{m}{2\pi \hbar i t} \right)^{3/2} \gamma^{-3} \exp \left( \frac{i\beta r^2}{4\sigma_o^2 \gamma} \right) , \quad (3.44)$$

donde  $\beta$  y  $\gamma$  vienen definidas por

$$\beta \equiv \frac{m}{2\hbar t} ,$$

y

$$\gamma = \frac{1}{4\sigma_o^2} - i\beta .$$

Para el módulo cuadrado de la función de onda, es decir, para la densidad de probabilidad  $\rho(\vec{r}, t) = |\Psi(\vec{r}, t)|^2$ , se obtiene

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 \propto \frac{1}{\sigma^3(t)} e^{-r^2/(2\sigma^2(t))} . \quad (3.45)$$

Note que la densidad de probabilidad es una gaussiana para todo  $t$ , aún cuando la función de onda  $\Psi(\vec{r}, t)$  no lo es (tiene un factor de fase que depende de  $\vec{r}$ ). Al evaluar las varianzas para  $\Psi(\vec{r}, t)$ , por no ser gaussiana, se obtiene que  $(\Delta x(t)) (\Delta k_x(t)) > 1/2$  ,  $\forall t \neq 0$ .

En (3.45) el ancho  $\sigma(t)$  viene dado por (demuéstrelo como Problema 3-4)

$$\sigma^2(t) = \sigma_o^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma_o^2} .$$

Esta ecuación muestra claramente que el paquete de ondas (para la partícula libre) se dispersa. La figura 3.4 muestra el comportamiento del ancho del paquete de ondas en función del

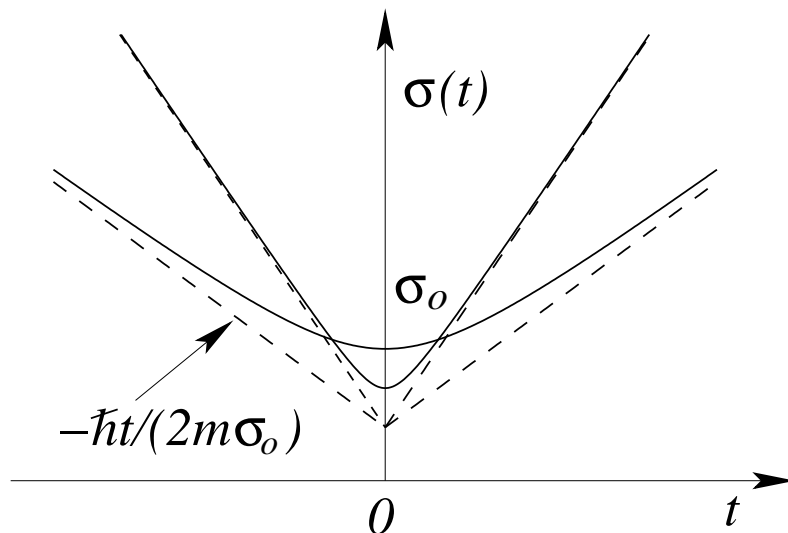


Figura 3.4: Ancho de un paquete de ondas gaussiano en función del tiempo.

tiempo para varios valores de  $\sigma_0$ . Para tiempos grandes, la dispersión es proporcional a  $t$ . Específicamente

$$\sigma(t) \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{\hbar t}{2m\sigma_0} \sim \Delta v_0 t ,$$

es decir, el ancho crece en forma proporcional a la dispersión de velocidades, como es natural esperar semiclásicamente. Tanto más pequeño es el valor de  $\sigma_0$ , tanto más rápidamente ocurre posteriormente la dispersión (principio de incerteza).

Partiendo con un paquete de ondas gaussiano, ¿qué elección de  $\sigma_0$  minimiza  $\sigma(t)$  a un tiempo  $t = t^*$  dado? Para responder esta interrogante derivemos la expresión para  $\sigma(t)$  con respecto a  $\sigma_0$  e igualémosla a cero. De esta manera se obtiene que el valor de  $\sigma$  en  $t = 0$  que genera el mínimo ancho en  $t^*$  es  $\sigma_{\min}^2 = \hbar t^*/(2m)$ , estando el ancho en el instante  $t^*$  dado por

$$\sigma^2(t^*)|_{\sigma_{\min}} = \frac{\hbar t^*}{m} .$$

La figura 3.5 muestra una representación gráfica de estas relaciones.

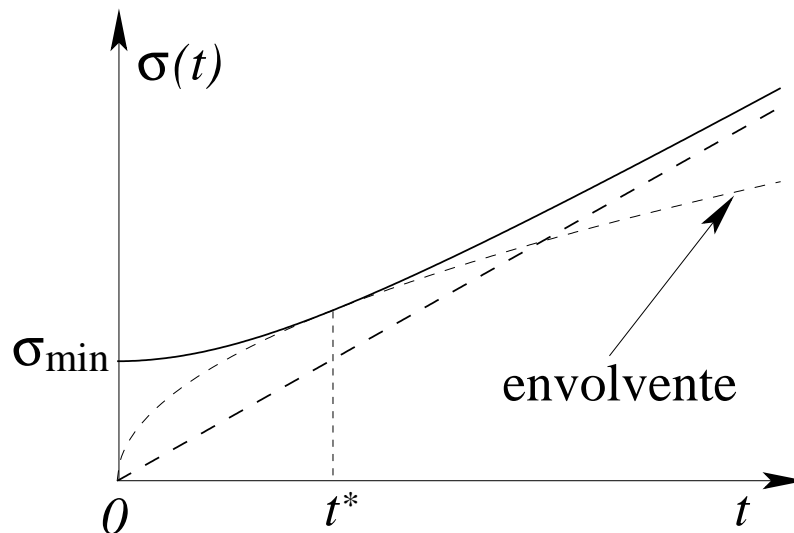
### Ilustraciones:

1. Consideremos un paquete de ondas que se traslada a lo largo de una órbita circular. Para que el concepto clásico de trayectoria tenga algún sentido se debe tener que durante una vuelta completa el paquete de ondas no se disperse por sobre toda la órbita, es decir, si  $T$  es el período, se debe tener

$$\sigma^2(T) \ll r^2 .$$

Partiendo de un paquete de ondas gaussiano, después de una vuelta el ancho mínimo es  $\sqrt{\hbar T/m}$ . Este ancho debe ser mucho menor que el radio de la órbita, o sea,

$$\frac{\hbar T}{m} \ll r^2 .$$

Figura 3.5: Gráfico de la envolvente  $\sigma(t^*)$ .

Multiplicando por  $2\pi m/T$  se obtiene

$$\frac{2\pi m}{T} \cdot \frac{\hbar T}{m} = h \ll \frac{2\pi m}{T} r^2 = mr^2\omega = L = \text{momento angular} ,$$

o sea, se debe tener

$$L \gg h .$$

El concepto de trayectoria clásica de un objeto en movimiento circular sólo tiene sentido si el momento angular  $L$  es mucho mayor que la constante de Planck.

2. Debido a la rápida dispersión de los paquetes de ondas, no es posible identificar a las partículas atómicas y subatómicas con paquetes de onda. Estimemos el tiempo que tarda un paquete de ondas en duplicar su ancho si representa a un electrón localizado en una región del tamaño de  $0.1 \text{ [Å]}$ . Se tiene  $\hbar t / (2m\sigma_0) \sim 10^{-9} \text{ [cm]}$ , o sea, el tiempo que tarda en duplicar su ancho es de aproximadamente  $t \sim 3 \times 10^{-18} \text{ [s]}$ . Un electrón que se traslada con una velocidad  $v = c/10$ , alcanza a recorrer en ese tiempo una distancia de aproximadamente  $6 \text{ [Å]}$ .
3. Para una partícula microscópica de  $10^{-3} \text{ [g]}$  y localizada en una región del tamaño de  $0.1 \text{ [mm]}$ , el resultado es bastante distinto. En ese caso el tiempo que tarda el paquete de ondas en duplicar su ancho es de aproximadamente  $2 \times 10^{20} \text{ [s]}$ , o sea,  $\sim 6 \times 10^{13}$  años.

Para concluir esta sección demostraremos que sólo para paquetes de ondas gaussianos se cumple que  $(\Delta x)(\Delta k_x) = \frac{1}{2}$ . De la demostración del principio de incerteza (capítulo 2) se observa que la igualdad se obtiene sólo si se cumplen las siguientes relaciones:

i)  $2\Gamma = \langle \psi | (\check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{b}} + \check{\mathbf{b}}\check{\mathbf{a}}) | \psi \rangle = 0$ .

ii)  $|\phi\rangle = \lambda|\chi\rangle$ ,  $\lambda \in \mathbb{C}$ .

En estas ecuaciones y en lo que sigue usaremos la misma notación usada en la demostración del principio de incerteza (capítulo 2). La condición ii) nos dice que los vectores  $|\phi\rangle = \check{\mathbf{a}}|\psi\rangle$  y  $|\chi\rangle = \check{\mathbf{b}}|\psi\rangle$  deben ser “paralelos”, pues en ese caso la desigualdad del Schwartz se transforma en igualdad. En lugar de  $\lambda$  introducimos  $c \in \mathbb{C}$  definida por

$$\lambda = -\frac{2i}{c\hbar}.$$

Entonces la condición ii) se puede escribir de la forma

$$(\check{\mathbf{x}} - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle)|\psi\rangle = \check{\mathbf{a}}|\psi\rangle = -\frac{2i}{c\hbar}(\check{\mathbf{p}}_x - \langle \check{\mathbf{p}}_x \rangle)|\psi\rangle = \lambda \check{\mathbf{b}}|\psi\rangle.$$

Realizando el producto punto de esta última ecuación con  $\langle x | \in \mathcal{H}^\dagger$  se obtiene

$$\langle x | (\check{\mathbf{x}} - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle) |\psi\rangle = -\frac{2i}{c\hbar} \langle x | (\check{\mathbf{p}}_x - \langle \check{\mathbf{p}}_x \rangle) |\psi\rangle,$$

$$(x - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle) \langle x | \psi \rangle = -\frac{2i}{c\hbar} \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \langle \check{\mathbf{p}}_x \rangle \right) \langle x | \psi \rangle,$$

$$(x - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle) \psi(x) = -\frac{2}{c} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} + \frac{2i}{c\hbar} \langle \check{\mathbf{p}}_x \rangle \psi(x),$$

de lo cual se concluye,

$$\frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = -\frac{c}{2} (x - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle) \psi(x) + \frac{i}{\hbar} \langle \check{\mathbf{p}}_x \rangle \psi(x).$$

Esta es una ecuación diferencial para  $\psi(x)$ ; probemos una solución del tipo

$$\psi(x) = e^{f(x)}.$$

Derivando

$$\frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = e^{f(x)} f'(x) = \psi(x) f'(x).$$

Reemplazando las dos últimas expresiones en la ecuación diferencial se encuentra que  $f(x)$  debe cumplir con

$$f'(x) = -\frac{c}{2} (x - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle) + \frac{i}{\hbar} \langle \check{\mathbf{p}}_x \rangle.$$

Integrando resulta

$$f(x) = -\frac{c}{4} (x - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle)^2 + \frac{i}{\hbar} \langle \check{\mathbf{p}}_x \rangle x + (\text{Cte.}).$$

Luego, para  $\psi(x)$  se obtiene

$$\psi(x) = (\text{Cte.}) \exp \left( -\frac{c}{4}(x - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle)^2 + \frac{i}{\hbar} \langle \check{\mathbf{p}}_x \rangle x \right) .$$

A continuación evaluamos el valor de la constante  $c$  usando la condición i). Para ello evaluemos previamente  $\langle x | \check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{b}} | \psi \rangle$  y  $\langle x | \check{\mathbf{b}}\check{\mathbf{a}} | \psi \rangle$ :

$$\begin{aligned} \langle x | \check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{b}} | \psi \rangle &= \langle x | (\check{\mathbf{x}} - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle)(\check{\mathbf{p}}_x - \langle \check{\mathbf{p}}_x \rangle) | \psi \rangle \\ &= (x - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle) \langle x | (\check{\mathbf{p}}_x - \langle \check{\mathbf{p}}_x \rangle) | \psi \rangle \\ &= (x - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle) \left( -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \langle \check{\mathbf{p}}_x \rangle \right) \psi(x) \\ &= i\hbar \frac{c}{2} (x - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle)^2 \psi(x) , \end{aligned}$$

y por otra parte

$$\begin{aligned} \langle x | \check{\mathbf{b}}\check{\mathbf{a}} | \psi \rangle &= \langle x | (\check{\mathbf{b}}\check{\mathbf{a}} - \check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{b}} + \check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{b}}) | \psi \rangle \\ &= -\langle x | [\check{\mathbf{a}}, \check{\mathbf{b}}] | \psi \rangle + \langle x | \check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{b}} | \psi \rangle \\ &= -\langle x | i\hbar \check{\mathbf{1}} | \psi \rangle + i\hbar \frac{c}{2} (x - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle)^2 \psi(x) \\ &= -i\hbar \psi(x) + i\hbar \frac{c}{2} (x - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle)^2 \psi(x) . \end{aligned}$$

De estas expresiones se deduce que

$$\begin{aligned} 2\Gamma &= \langle \psi | (\check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{b}} + \check{\mathbf{b}}\check{\mathbf{a}}) | \psi \rangle \\ &= \int dx \langle \psi | x \rangle \langle x | (\check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{b}} + \check{\mathbf{b}}\check{\mathbf{a}}) | \psi \rangle \\ &= \int dx \langle \psi | x \rangle \{ -i\hbar + i\hbar c (x - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle)^2 \} \langle x | \psi \rangle \\ &= -i\hbar \int dx \langle \psi | x \rangle \langle x | \psi \rangle + i\hbar c \int dx (x - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle)^2 |\psi(x)|^2 \\ &= -i\hbar (1 - c(\Delta\check{\mathbf{x}})^2) . \end{aligned}$$

Luego,  $2\Gamma = 0$  sólo si

$$c = \frac{1}{(\Delta x)^2} .$$

Con este valor para  $c$  se obtiene

$$\psi(x) = A \exp \left\{ -\frac{(x - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle)^2}{(2\Delta x)^2} + i \frac{\langle \check{\mathbf{p}}_x \rangle x}{\hbar} \right\} . \quad (3.46)$$

La constante  $A$  se determina normalizando  $\psi(x)$ .

El paquete de ondas dado por la última expresión es el único para el cual  $\Delta p_x \Delta x = \hbar/2$ . Paquetes de ondas de esa forma son los que llamaremos paquetes de ondas gaussianos o *paquetes de Kennard*.



### 3.8 Normalización de una función de estado.

Si bien frecuentemente no es necesario trabajar con funciones de estado explícitamente normalizadas, en ocasiones este requerimiento puede ser útil.

Sea  $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$  un vector asociado a un cierto estado de una partícula. Deseamos normalizar  $|\Psi\rangle$ . Si  $\langle\Psi|\Psi\rangle = A$  con  $A$  finito, entonces el vector  $|\tilde{\Psi}\rangle = |\Psi\rangle/\sqrt{\langle\Psi|\Psi\rangle}$  sí estará normalizado. En el caso en que  $\langle\Psi|\Psi\rangle = \infty$ , por ejemplo, si  $|\Psi\rangle = |\vec{p}\rangle$  ó  $|\Psi\rangle = |\vec{r}\rangle$ , entonces hay que proceder con algo de cuidado.

Una manera de resolver este problema consiste en suponer que la partícula no es libre sino que se encuentra en el interior de una gran caja de paredes impenetrables (cuyas dimensiones posteriormente hacemos tender al infinito). Con este “truco”, el espectro del Hamiltoniano se hace discreto y las funciones de estado son normalizables.

Otra manera consiste en suponer que la partícula no es libre sino que se encuentra en el interior de una gran caja de tamaño  $L$  e imponer condiciones de borde periódicas, es decir,  $\psi(x) = \psi(x + L)$ . Con esta imposición el espectro del Hamiltoniano nuevamente se vuelve discreto y las funciones de estado son normalizables. Luego  $L$  se hace tender hacia  $\infty$ .

Una tercera forma de proceder consiste en usar “sucesiones a la delta”. Por ejemplo, supongamos que  $|\Psi\rangle = |\vec{r}\rangle$ . Entonces

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \int d^3r' |\vec{r}'\rangle \langle \vec{r}' | \Psi \rangle = \int d^3r' |\vec{r}'\rangle \delta(\vec{r} - \vec{r}') \\ &= \int d^3r' |\vec{r}'\rangle \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(\pi\epsilon)^{3/2}} \exp\left(-\frac{|\vec{r}' - \vec{r}|^2}{\epsilon}\right) \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(\pi\epsilon)^{3/2}} \int d^3r' |\vec{r}'\rangle \exp\left(-\frac{|\vec{r}' - \vec{r}|^2}{\epsilon}\right). \end{aligned}$$

Pongamos  $\epsilon = \epsilon_0$  fijo, muy chico, pero distinto de cero. Entonces

$$|\Psi\rangle \approx \frac{1}{(\pi\epsilon_0)^{3/2}} \int d^3r' |\vec{r}'\rangle \exp\left(-\frac{|\vec{r}' - \vec{r}|^2}{\epsilon_0}\right).$$

Esta expresión tiene la ventaja de que sí es normalizable, en efecto

$$\begin{aligned} \langle\Psi|\Psi\rangle &\approx \frac{1}{(\pi\epsilon_0)^3} \int d^3r' \int d^3r'' \langle \vec{r}'' | \vec{r}' \rangle \exp\left(-\frac{|\vec{r}' - \vec{r}|^2 + |\vec{r}'' - \vec{r}|^2}{\epsilon_0}\right) \\ &= \frac{1}{(\pi\epsilon_0)^3} \int d^3r' \int d^3r'' \delta(\vec{r}' - \vec{r}'') \exp\left(-\frac{|\vec{r}' - \vec{r}|^2 + |\vec{r}'' - \vec{r}|^2}{\epsilon_0}\right) \\ &= \frac{1}{(\pi\epsilon_0)^3} \int d^3r' \exp\left(-\frac{2}{\epsilon_0}|\vec{r}' - \vec{r}|^2\right) = \frac{1}{(\pi\epsilon_0)^3} \int d^3r' \exp\left(-\frac{2}{\epsilon_0}r'^2\right) \\ &= \frac{4\pi}{\pi^3\epsilon_0^3} \int_0^\infty dr r^2 \exp\left(-\frac{2}{\epsilon_0}r^2\right) = \frac{4}{\pi^2\epsilon_0^3} \frac{1}{2} \left(\frac{\epsilon_0^2}{2}\right)^{3/2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{(2\pi\epsilon_0)^{3/2}}. \end{aligned}$$

Definamos

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \frac{|\Psi\rangle}{\sqrt{\langle\Psi|\Psi\rangle}} = \left(\frac{2}{\pi\epsilon_0}\right)^{3/4} \int d^3r' |\vec{r}'\rangle \exp\left(-\frac{|\vec{r}' - \vec{r}|^2}{\epsilon_0}\right).$$

Esta expresión, con  $\epsilon_0 \rightarrow 0$ , representa bastante bien al vector  $|\vec{r}\rangle$  normalizado a 1.

### 3.9 La función de Green para la partícula libre.

Consideremos un vector  $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$  y expresémoslo en la forma

$$|\psi(t)\rangle = \int d^3k |\vec{k}\rangle \langle \vec{k} | |\psi(t)\rangle .$$

Note que

$$\langle \vec{k} | \psi(t)\rangle = \langle \vec{k} | \psi(0)\rangle e^{-i\omega(k)t} ,$$

o también

$$\langle \vec{k} | \psi(t)\rangle = \langle \vec{k} | \psi(t')\rangle e^{-i\omega(k)(t-t')} .$$

Sustituyendo la última ecuación en la expresión para  $|\psi(t)\rangle$  se obtiene

$$|\psi(t)\rangle = \int d^3k e^{-i\omega(k)(t-t')} |\vec{k}\rangle \langle \vec{k} | \psi(t')\rangle .$$

Definimos el *operador de Green* o *propagador* por:

$$\check{\mathbf{G}}_0(t_0) \equiv \int d^3k e^{-i\omega(k)t_0} |\vec{k}\rangle \langle \vec{k} | ,$$

entonces

$$|\psi(t)\rangle = \check{\mathbf{G}}(t-t') |\psi(t')\rangle .$$

Debido a esta relación, también  $\check{\mathbf{G}}(t-t')$  se denomina “operador de evolución temporal”.

Realizando el producto interno con  $\langle \vec{r} |$  se obtiene

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \psi(t)\rangle &= \langle \vec{r} | \check{\mathbf{G}}(t-t') |\psi(t')\rangle \\ &= \int d^3r' \langle \vec{r} | \check{\mathbf{G}}(t-t') | \vec{r}'\rangle \langle \vec{r}' | \psi(t')\rangle . \end{aligned}$$

Definimos la *Función de Green* o *Núcleo* o *Kernel* para la partícula libre por:

$$G(\vec{r}-\vec{r}', t-t') \equiv \langle \vec{r} | \check{\mathbf{G}}(t-t') | \vec{r}'\rangle .$$

Como luego constataremos, la función de Green depende de  $\vec{r}$  y  $\vec{r}'$  sólo a través de  $\vec{r}-\vec{r}'$ , y otro tanto ocurre con el tiempo. Esto es una consecuencia del hecho que el espacio y el tiempo son isotrópicos, no hay puntos  $\vec{r}$  “privilegiados” pues no hay potencial; tampoco hay fuerzas tiempo-dependientes. Para la función de onda se obtiene

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) \equiv \langle \vec{r} | \psi(t)\rangle &= \int d^3r' G(\vec{r}-\vec{r}', t-t') \psi(\vec{r}', t') \\ &= G(\vec{r}, t-t') * \psi(\vec{r}, t') , \end{aligned}$$

donde con el símbolo “\*” se ha denotado al producto de convolución.

La última ecuación muestra que, una vez conocida la función de Green, se puede obtener la función de onda  $\psi(\vec{r}, t)$  para todo  $t$  si se la conoce para  $t = 0$ ; simplemente hay que evaluar

$$\psi(\vec{r}, t) = \int d^3r' G(\vec{r} - \vec{r}', t) \psi(\vec{r}', 0) . \quad (3.47)$$

Si  $\psi(\vec{r}, 0) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$ , es decir, si tenemos la certeza de que para  $t = 0$  la partícula se encuentra en el lugar  $\vec{r} = \vec{r}_0$ , entonces para la función de onda  $\psi(\vec{r}, t)$  se obtiene

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) &= \int d^3r' G(\vec{r} - \vec{r}', t) \delta(\vec{r}' - \vec{r}_0) \\ &= G(\vec{r} - \vec{r}_0, t) , \end{aligned}$$

o sea, la función de Green es la función de onda para la propagación de una fuente puntual. Desde este punto de vista la ecuación (3.47) no es otra cosa que la superposición de numerosas fuentes puntuales, cada una de ellas con el peso  $\psi(\vec{r}, 0)$ .

Evaluemos la función de Green para la partícula libre explícitamente:

$$\begin{aligned} G(\vec{r} - \vec{r}', t - t') &= \langle \vec{r} | \check{\mathbf{G}}(t - t') | \vec{r}' \rangle \\ &= \langle \vec{r} | \int d^3k e^{-i\omega(t-t')} | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | | \vec{r}' \rangle \\ &= \int d^3k e^{-i\omega(t-t')} \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | \vec{r}' \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k \exp \left( i \left[ \vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') + \frac{\hbar k^2}{2m} (t' - t) \right] \right) . \end{aligned}$$

Completando el cuadrado en el numerador, sigue

$$G(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = \left( \frac{m}{2\pi\hbar i(t - t')} \right)^{3/2} \exp \left( \frac{im}{2\hbar(t - t')} |\vec{r} - \vec{r}'|^2 \right) ,$$

de donde, finalmente

$$G(\vec{r}, t) = \left( \frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{3/2} \exp \left( i \frac{mr^2}{2\hbar t} \right) .$$

Analizamos lo que ocurre con esta última ecuación en el límite  $t \rightarrow 0^+$ ; recuerde que la función de Green corresponde a la función de onda de una partícula que en el instante  $t = 0$ , con certeza, se encuentra en  $\vec{r} = 0$ .

Para concluir esta sección, mostremos brevemente la analogía que existe entre lo anterior y el problema de difusión del calor.

La ecuación de difusión del calor en un cuerpo tridimensional homogéneo es

$$D \nabla^2 T(\vec{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} T(\vec{r}, t) .$$

Aquí  $T(\vec{r}, t)$  es la temperatura en el lugar  $\vec{r}$  en el instante  $t$  y  $D$  es el coeficiente de difusión. La función de Green para esta ecuación diferencial es

$$G_D(\vec{r}, t) = \left( \frac{1}{4\pi Dt} \right)^{3/2} \exp \left( -\frac{r^2}{4Dt} \right) .$$

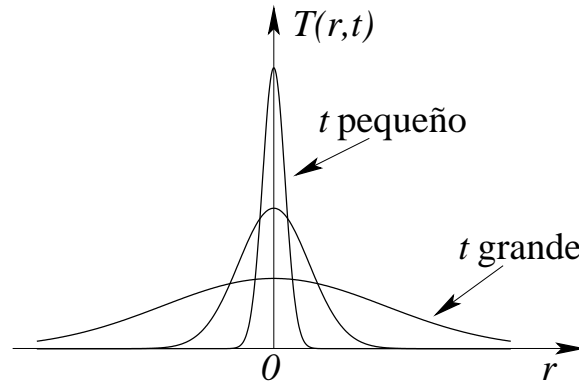


Figura 3.6: Evolución temporal de la temperatura en un sólido al depositar cierta cantidad de energía en  $\vec{r} = 0$ .

$G_D(\vec{r}, t)$  da la temperatura en el lugar  $\vec{r}$  en el instante  $t$  si para  $t = 0$  se coloca una cierta cantidad de energía en el origen, ver figura 3.6.

La ecuación de difusión y su función de Green se transforman en la ecuación de Schrödinger con su respectivo núcleo si el coeficiente  $D$  se sustituye por  $i\hbar/(2m)$ .

### 3.10 La ecuación de onda en presencia de fuerzas externas.

Pretendemos generalizar la ecuación de Schrödinger para la partícula libre, para el caso en que sobre la partícula actúan fuerzas externas. Para ello procedemos como sigue:

- Consideramos el problema de una partícula sin spin que además no posee “grados internos de libertad”.
- Suponemos que las fuerzas son conservativas, de modo de apuntar al problema clásico con  $\vec{F} = -\vec{\nabla}V(\vec{r})$  y un Hamiltoniano dado por  $H = T + V$ .
- Usamos el postulado 4 y los teoremas asociados para obtener el Hamiltoniano cuántico

$$H_{\text{clásico}}(\vec{r}, \vec{p}) \longrightarrow \check{H}_{\text{cuántico}} = H_{\text{clásico}}(\check{\vec{r}}, \check{\vec{p}}) = \frac{\check{\vec{p}}^2}{2m} + V(\check{\vec{r}}) .$$

Nosotros supondremos (postulado 5) que la evolución temporal de un vector  $|\Psi(t)\rangle$  viene gobernada por la ecuación

$$\check{H}|\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle .$$

En analogía con lo que se tiene en la mecánica clásica, el operador Hamiltoniano  $\check{H}$  lo escribimos como

$$\check{H} = \check{T} + \check{V} .$$

Escribamos la ecuación de evolución en la representación de coordenadas. Al realizar el producto interno con  $\langle \vec{r} |$  se obtiene

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \check{\mathbf{H}} | \Psi(t) \rangle &= i\hbar \langle \vec{r} | \frac{d}{dt} | \Psi(t) \rangle \\ \langle \vec{r} | \check{\mathbf{T}} | \Psi(t) \rangle + \langle \vec{r} | V(\check{\mathbf{r}}) | \Psi(t) \rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle, \end{aligned}$$

de donde

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle + V(\vec{r}) \langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle,$$

es decir,

$$\boxed{\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) .}$$

Esta es la ecuación de Schrödinger en la representación de coordenadas.

Para obtener la ecuación de propagación en la representación de momento se realiza el producto interno con  $\langle \vec{p} |$ . De esta manera se obtiene

$$\begin{aligned} \langle \vec{p} | \check{\mathbf{H}} | \Psi(t) \rangle &= i\hbar \langle \vec{p} | \frac{d}{dt} | \Psi(t) \rangle \\ \langle \vec{p} | \check{\mathbf{T}} | \Psi(t) \rangle + \langle \vec{p} | V(\check{\mathbf{r}}) | \Psi(t) \rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{p} | \Psi(t) \rangle \\ \frac{p^2}{2m} \langle \vec{p} | \Psi(t) \rangle + \langle \vec{p} | V(\check{\mathbf{r}}) | \Psi(t) \rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{p} | \Psi(t) \rangle . \end{aligned}$$

Investiguemos el significado de la expresión  $\langle \vec{p} | V(\check{\mathbf{r}}) | \Psi(t) \rangle$ . Escribamos

$$\langle \vec{p} | V(\check{\mathbf{r}}) | \Psi(t) \rangle = \int d^3 p' \langle \vec{p} | V(\check{\mathbf{r}}) | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \Psi(t) \rangle . \quad (3.48)$$

Ahora, introduzcamos la notación

$$V(\vec{p} - \vec{p}') \equiv \langle \vec{p} | V(\check{\mathbf{r}}) | \vec{p}' \rangle (2\pi\hbar)^{3/2} . \quad (3.49)$$

Entonces se tiene

$$\begin{aligned} V(\vec{p} - \vec{p}') &= \int d^3 r \langle \vec{p} | \check{\mathbf{V}}(\vec{r}) | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \vec{p}' \rangle (2\pi\hbar)^{3/2} \\ &= \int d^3 r \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle V(\vec{r}) \langle \vec{r} | \vec{p}' \rangle (2\pi\hbar)^{3/2} \\ &= \int d^3 r V(\vec{r}) \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\vec{p}' - \vec{p}) \cdot \vec{r}\right), \end{aligned}$$

luego,

$$V(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3 r V(\vec{r}) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} .$$

La función  $V(\vec{p})$  es la transformada de Fourier de  $V(\vec{r})$ . La transformación inversa es

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p V(\vec{p}) e^{+i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar} .$$

Usando las ecuaciones (3.48) y (3.49) se encuentra que la ecuación de evolución temporal para una función de onda en la representación de momentum, viene dada por la ecuación integrodiferencial

$$\left( \frac{p^2}{2m} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p' V(\vec{p} - \vec{p}') \Psi(\vec{p}', t) .$$

### 3.11 Densidad y corriente de probabilidad.

Consideremos un vector  $|\Psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$ , asociado a cierto estado de una partícula, el cual está normalizado, es decir,  $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ . La magnitud  $|\langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle|^2$ , de acuerdo al postulado 3, es la densidad de probabilidad de encontrar la partícula en el lugar  $\vec{r}$  si se realiza una medición de su posición en el instante  $t$ . Denotemos esta densidad con la letra griega  $\rho$ , es decir,

$$\rho(\vec{r}, t) = \rho_{\Psi}(\vec{r}, t) \equiv |\langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle|^2 = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 .$$

Como  $\langle \Psi | \Psi \rangle = \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1 \quad \forall t$  (teorema de Parseval), se tiene que

$$\begin{aligned} \int d^3r \rho(\vec{r}, t) &= \int d^3r \langle \Psi(t) | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle \\ &= \langle \Psi(t) | \Psi(t) \rangle = 1 . \end{aligned}$$

Partiendo de la ecuación de evolución temporal

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \check{\mathbf{H}} |\psi(t)\rangle ,$$

realizando el producto interno con  $\langle \vec{r} |$  se obtiene la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) . \quad (3.50)$$

Partiendo con el dual de la ecuación de evolución temporal

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | = \langle \Psi(t) | \check{\mathbf{H}}^\dagger = \langle \Psi(t) | \check{\mathbf{H}} ,$$

y realizando el producto interno con  $|\vec{r}\rangle$ , se obtiene

$$\left( -i\hbar \frac{d}{dt} \langle \Psi(t) | \right) |\vec{r}\rangle = \langle \Psi(t) | \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2m} |\vec{r}\rangle + \langle \Psi(t) | V(\check{\mathbf{r}}) |\vec{r}\rangle ,$$

es decir

$$\begin{aligned}
 -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\vec{r}, t) &= \left( \langle \vec{r} | \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2m} | \Psi(t) \rangle \right)^\dagger + V(\vec{r}) \Psi^*(\vec{r}, t) \\
 &= \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) \right)^\dagger + V(\vec{r}) \Psi^*(\vec{r}, t) \\
 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^*(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \Psi^*(\vec{r}, t) .
 \end{aligned} \tag{3.51}$$

Multiplicando (3.50) por  $\Psi^*(\vec{r}, t)$  y (3.51) por  $\Psi(\vec{r}, t)$ , se obtienen las ecuaciones

$$i\hbar \Psi^*(\vec{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi^*(\vec{r}, t) \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) |\Psi(\vec{r}, t)|^2 ,$$

y (la ecuación compleja conjugada)

$$-i\hbar \Psi(\vec{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Psi(\vec{r}, t) \nabla^2 \Psi^*(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) |\Psi(\vec{r}, t)|^2 .$$

Restando las dos últimas ecuaciones queda

$$\begin{aligned}
 -i\hbar \left( \Psi^*(\vec{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) + \Psi(\vec{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\vec{r}, t) \right) \\
 = -\frac{\hbar^2}{2m} \{ \Psi^*(\vec{r}, t) \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) \nabla^2 \Psi^*(\vec{r}, t) \} .
 \end{aligned} \tag{3.52}$$

El lado izquierdo es simplemente la derivada temporal de la densidad:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t)) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) . \tag{3.53}$$

Por otra parte, el lado derecho se puede escribir de la forma

$$\begin{aligned}
 -\frac{\hbar^2}{2m} \{ \Psi^*(\vec{r}, t) \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) \nabla^2 \Psi^*(\vec{r}, t) \} \\
 = \frac{i\hbar i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \cdot \{ \Psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \Psi^*(\vec{r}, t) \} = -i\hbar \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) ,
 \end{aligned} \tag{3.54}$$

donde  $\vec{j}$  viene definido por

$$\begin{aligned}
 \vec{j}(\vec{r}, t) &\equiv -\frac{i\hbar}{2m} \left\{ \Psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, t) - \text{complejo conjugado} \right\} \\
 &= \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\Psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, t)) .
 \end{aligned}$$

Reemplazando (3.54) y (3.53) en (3.52) se obtiene la *ecuación de continuidad*

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0 .}$$

El vector  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  es una corriente de probabilidad. Esto se observa con mayor claridad si se integra la ecuación de continuidad sobre un volumen  $\mathcal{V}$ . Se tiene:

$$-\int_{\mathcal{V}} d^3r \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) = \int_{\mathcal{V}} d^3r \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) .$$

Usando el teorema de Gauss se deduce que

$$-\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} d^3r \rho(\vec{r}, t) = \oint_{S(\mathcal{V})} \vec{j}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{A} .$$

La integral al lado izquierdo de la última ecuación es la probabilidad de que la partícula esté en el volumen  $\mathcal{V}$ , por consiguiente el lado izquierdo representa la tasa con que varía la probabilidad de encontrar la partícula en  $\mathcal{V}$ . Por otra parte, el lado derecho de la última ecuación corresponde a la corriente de probabilidad que atraviesa la superficie  $S(\mathcal{V})$  que encierra a  $\mathcal{V}$ .

La definición de corriente se puede hacer mas intuitiva al notar que  $\vec{p}/m = \check{\vec{v}}$  es el “operador velocidad” y por lo tanto

$$\begin{aligned} \vec{j}(\vec{r}, t) &= \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\Psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, t)) \\ &= \frac{1}{m} \text{Re}(\Psi^*(\vec{r}, t) (-i\hbar \vec{\nabla}) \Psi(\vec{r}, t)) \\ &= \frac{1}{m} \text{Re} \left( \langle \Psi(t) | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \check{\vec{p}} | \Psi(t) \rangle \right) \\ &= \text{Re} \left( \langle \Psi(t) | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \check{\vec{v}} | \Psi(t) \rangle \right) . \end{aligned}$$

Usando esta última relación se obtiene, por ejemplo,

$$\int d^3r \vec{j}(\vec{r}, t) = \langle \Psi | \check{\vec{v}} | \Psi \rangle .$$

Concluimos esta sección escribiendo la densidad y la corriente de probabilidad para una onda plana

$$\phi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp \left( i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - i\omega t \right) .$$

Se obtiene

$$\rho(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} ,$$

y

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\vec{p}}{m} \rho(\vec{r}, t) = \vec{v} \rho(\vec{r}, t) .$$



### 3.12 Propagador.

Consideremos la ecuación de propagación

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \check{\mathbf{H}} |\Psi(t)\rangle .$$

Para un pequeño incremento temporal  $\delta t$  se tiene

$$|\Psi(\delta t)\rangle = |\Psi(0)\rangle + \delta t \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(0)\rangle ,$$

o sea,

$$|\Psi(\delta t)\rangle = \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} \check{\mathbf{H}} \delta t \right] |\Psi(0)\rangle .$$

Sea  $\delta t = t/N$ . Aplicando reiteradamente  $\left[ 1 - \frac{i}{\hbar} \check{\mathbf{H}} \delta t \right]$ ,  $N$  veces, obtenemos

$$|\Psi(t)\rangle = |\Psi(N\delta t)\rangle = \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} \check{\mathbf{H}} \delta t \right]^N |\Psi(0)\rangle .$$

Para  $N \rightarrow \infty$  sigue

$$|\Psi(t)\rangle = \check{\mathbf{G}}(t) |\Psi(0)\rangle ,$$

con el *Operador de Green* o *Propagador* dado por

$$\check{\mathbf{G}}(t) = e^{-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar} . \tag{3.55}$$

Note que  $\check{\mathbf{G}}$  es un operador unitario. En efecto,

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{G}}^\dagger &= \exp(+i\check{\mathbf{H}}^\dagger t/\hbar) \\ &= \exp(+i\check{\mathbf{H}} t/\hbar) = \check{\mathbf{G}}^{-1} . \end{aligned}$$

El operador  $\check{\mathbf{G}}(t)$  necesariamente debe ser unitario, ya que sólo en ese caso el vector  $|\Psi(t)\rangle$  seguirá normalizado si  $|\Psi(0)\rangle$  lo está.

### 3.13 Un teorema importante.

A continuación, mostraremos el llamado *Teorema Generalizado de Ehrenfest* que permite completar la conexión entre la mecánica clásica y la mecánica cuántica, haciendo efectivo el llamado “Principio de correspondencia de Niels Bohr”.

**Teorema 3.3** Sea  $\check{\mathbf{H}}$  el Hamiltoniano de un sistema,  $|\psi(t)\rangle$  un vector de estado del sistema y  $\check{\mathbf{F}} = \check{\mathbf{F}}(t)$  un operador cualquiera. No estamos limitando de modo alguno nuestro sistema. Este puede consistir de una o varias partículas, con o sin spin. Entonces

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{F}} \rangle = i\hbar \left\langle \frac{\partial \check{\mathbf{F}}}{\partial t} \right\rangle + \langle [\check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{H}}] \rangle .$$

**Demostración** Evaluemos la derivada temporal del valor esperado de  $\check{\mathbf{F}}$ :

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{F}} \rangle &= i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \mathbf{F}(t) | \psi(t) \rangle \\ &= i\hbar \left\{ \left( \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right) \check{\mathbf{F}} | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \left( \frac{\partial}{\partial t} \check{\mathbf{F}}(t) \right) | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \check{\mathbf{F}} \left( \frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right) \right\} . \end{aligned}$$

Usando la ecuación que da la evolución temporal de  $|\psi(t)\rangle$

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \check{\mathbf{H}} |\psi(t)\rangle ,$$

y la ecuación dual correspondiente

$$-i\hbar \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = \langle \psi(t) | \check{\mathbf{H}}^\dagger = \langle \psi(t) | \check{\mathbf{H}} ,$$

se obtiene que

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{F}} \rangle &= -\langle \psi(t) | \check{\mathbf{H}} \check{\mathbf{F}} | \psi(t) \rangle + i\hbar \left\langle \frac{\partial \check{\mathbf{F}}}{\partial t} \right\rangle + \langle \psi(t) | \check{\mathbf{F}} \check{\mathbf{H}} | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \check{\mathbf{F}} \check{\mathbf{H}} - \check{\mathbf{H}} \check{\mathbf{F}} \rangle + i\hbar \left\langle \frac{\partial \check{\mathbf{F}}}{\partial t} \right\rangle \\ &= \langle [\check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{H}}] \rangle + i\hbar \left\langle \frac{\partial \check{\mathbf{F}}}{\partial t} \right\rangle . \end{aligned}$$

Dividiendo por  $i\hbar$  queda

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{F}} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{H}}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \check{\mathbf{F}}}{\partial t} \right\rangle} . \quad (3.56)$$

Para un sistema de  $N$  partículas sin estructura, este resultado establece un puente con la mecánica clásica. En efecto, sea  $F(x_j, p_j, t)$ ,  $j = 1, \dots, 3N$ , el operador clásico asociado a  $\check{\mathbf{F}}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N, t)$ . Entonces

$$\begin{aligned} \frac{dF}{dt} &= \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_j \left[ \frac{\partial F}{\partial x_j} \dot{x}_j + \frac{\partial F}{\partial p_j} \dot{p}_j \right] \\ &= \frac{\partial F}{\partial t} + \sum_j \left[ \frac{\partial F}{\partial x_j} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial F}{\partial p_j} \frac{\partial H}{\partial x_j} \right] \\ &= \{F, H\} + \frac{\partial F}{\partial t} . \end{aligned}$$

Note la estrecha relación que existe entre esta expresión y la ecuación (3.56).

Antes de estudiar las consecuencias de este teorema, evaluemos algunos conmutadores que serán de gran utilidad. Sea

$$\check{\mathbf{H}} = \check{\mathbf{T}} + \check{\mathbf{V}} = \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\check{\mathbf{r}}) .$$

Entonces

$$[\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{H}}] = [\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{T}}] = \frac{1}{2m} [\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}^2] = \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla}_{\check{\mathbf{p}}} \check{\mathbf{p}}^2 = \frac{i\hbar}{m} \check{\mathbf{p}} ,$$

$$[\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{H}}] = [\check{\mathbf{p}}, V(\check{\mathbf{r}})] = -i\hbar \vec{\nabla} V(\check{\mathbf{r}}) = i\hbar \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}) ,$$

y

$$\begin{aligned} [\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{H}}] &= \check{\mathbf{r}} \cdot [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{H}}] + [\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{H}}] \cdot \check{\mathbf{p}} \\ &= i\hbar \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{F}} + \frac{i\hbar}{m} \check{\mathbf{p}}^2 \\ &= i\hbar (\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{F}} + 2\check{\mathbf{T}}) . \end{aligned}$$

### Consecuencias del Teorema:

a) Conservación de la probabilidad. Rederivemos este resultado usando el teorema generalizado de Ehrenfest con  $\check{\mathbf{F}} = \check{\mathbf{1}}$ . Obtenemos

$$\frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{1}} \rangle = 0 ,$$

o sea,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{1}} \rangle &= \frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \frac{d}{dt} \int d^3r |\psi(\vec{r}, t)|^2 \\ &= \frac{d}{dt} \int d^3r \rho(\vec{r}, t) = 0 \end{aligned}$$

La probabilidad de encontrar la partícula en alguna parte se conserva en el tiempo, en otras palabras, una función normalizada en cierto instante seguirá estando normalizada a medida que transcurre el tiempo.

b) Conservación de la energía. Usemos el teorema con  $\check{\mathbf{F}} = \check{\mathbf{H}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}, t)$ . Obtenemos

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{H}} \rangle = \langle [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{H}}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \check{\mathbf{H}}}{\partial t} \right\rangle .$$

Si  $\partial \check{\mathbf{H}} / \partial t = 0$ , o sea,  $\check{\mathbf{H}}$  no depende del tiempo, se encuentra

$$\frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{H}} \rangle = \frac{d}{dt} \langle E \check{\mathbf{1}} \rangle = 0 .$$

Si el Hamiltoniano no depende explícitamente del tiempo entonces el valor esperado de la energía se conserva, es decir, no varía en el tiempo. Cuando el Hamiltoniano depende explícitamente del tiempo, el sistema bajo estudio es un sistema abierto. En tal caso la energía no es constante.

c) **Teorema de Ehrenfest.**

(i) Sea  $\check{\mathbf{F}} = \check{\dot{\mathbf{p}}}$ , entonces

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{p}} \rangle = \left\langle \left[ \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{H}} \right] \right\rangle = i\hbar \langle -\vec{\nabla} V(\check{\mathbf{r}}) \rangle ,$$

es decir,

$$\frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{p}} \rangle = \langle \check{\mathbf{F}} \rangle . \quad (3.57)$$

Otra forma de escribir esta última ecuación se obtiene notando que

$$\check{\mathbf{F}} = -\vec{\nabla} V(\check{\mathbf{r}}) = -\vec{\nabla} \mathbf{H}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) ,$$

luego

$$\frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{p}} \rangle = \langle -\vec{\nabla} \mathbf{H}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) \rangle . \quad (3.58)$$

(ii) Usando el teorema con  $\check{\mathbf{F}} = \check{\dot{\mathbf{r}}}$  se obtiene

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{r}} \rangle = \left\langle \left[ \check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{H}} \right] \right\rangle = \frac{i\hbar}{m} \langle \check{\mathbf{p}} \rangle ,$$

o bien,

$$\frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{r}} \rangle = \frac{\langle \check{\mathbf{p}} \rangle}{m} . \quad (3.59)$$

Otra forma de escribir esta ecuación clásica se obtiene notando que

$$\frac{\check{\mathbf{p}}}{m} = \vec{\nabla}_{\check{\mathbf{p}}} \check{\mathbf{T}} = \vec{\nabla}_{\check{\mathbf{p}}} \check{\mathbf{H}} .$$

Luego

$$\frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{r}} \rangle = \langle \vec{\nabla}_{\check{\mathbf{p}}} \check{\mathbf{H}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) \rangle . \quad (3.60)$$

Las ecuaciones (3.58) y (3.60) son conocidas como *ecuaciones de Hamilton*.

Combinando las ecuaciones (3.57) y (3.59) obtenemos una ecuación estrechamente relacionada con la tradicional ecuación de Newton

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \check{\mathbf{r}} \rangle = \langle \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}) \rangle .$$

Este resultado se conoce como *Teorema de Ehrenfest* y permite una conexión entre la Mecánica Cuántica y la Mecánica Clásica. En efecto, si el “ancho medio” de una función

de onda  $\Psi(\vec{r}, t)$  es tal que sobre todo el ancho del paquete la fuerza es esencialmente constante, entonces

$$\langle \check{\check{\mathbf{F}}}(\vec{r}) \rangle \approx \check{\check{F}}(\langle \check{\check{\mathbf{r}}} \rangle) . \quad (3.61)$$

La última relación es exacta para fuerzas constantes y armónicas. De cumplirse (3.61) se tiene que el valor esperado de la posición  $\langle \check{\check{\mathbf{r}}}(t) \rangle$  cumple la ecuación clásica de movimiento. De esta manera queda establecido un puente entre la Mecánica Clásica y la Mecánica Cuántica en el límite clásico  $\hbar \rightarrow 0$  (ó  $m \rightarrow \infty$  ó  $\lambda_{\text{de Broglie}} \rightarrow 0$ ).

d) Teorema del Virial. Usemos el teorema con  $\check{\check{\mathbf{F}}} = \check{\check{\mathbf{r}}} \cdot \check{\check{\mathbf{p}}}$ . Obtenemos

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d}{dt} \langle \check{\check{\mathbf{r}}} \cdot \check{\check{\mathbf{p}}} \rangle &= \langle [\check{\check{\mathbf{r}}} \cdot \check{\check{\mathbf{p}}}, \check{\check{\mathbf{H}}}] \rangle \\ &= i\hbar 2 \langle \check{\check{\mathbf{T}}} \rangle + i\hbar \langle \check{\check{\mathbf{r}}} \cdot \check{\check{\mathbf{F}}} \rangle , \end{aligned}$$

o sea,

$$\frac{d}{dt} \langle \check{\check{\mathbf{r}}} \cdot \check{\check{\mathbf{p}}} \rangle = \langle 2\check{\check{\mathbf{T}}} \rangle + \langle \check{\check{\mathbf{r}}} \cdot \check{\check{\mathbf{F}}} \rangle .$$

Esta relación corresponde al *Teorema del virial*.

**Definición 3.1** Un estado  $|\psi(t)\rangle$  es un *estado estacionario* si  $|\psi(t)\rangle$  es factorizable en la forma

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle e^{-iEt/\hbar} .$$

Para estados estacionarios el valor esperado de cualquier operador  $\check{\check{\mathbf{A}}}$  que no depende explícitamente del tiempo, es independiente del tiempo. En efecto

$$\begin{aligned} \langle \check{\check{\mathbf{A}}} \rangle &= \langle \psi(t) | \check{\check{\mathbf{A}}} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | e^{iEt/\hbar} \check{\check{\mathbf{A}}} e^{-iEt/\hbar} | \psi(0) \rangle \\ &= \langle \psi(0) | \check{\check{\mathbf{A}}} | \psi(0) \rangle = \text{independiente de } t . \end{aligned}$$

Para estados estacionarios la derivada temporal de  $\langle \check{\check{\mathbf{r}}} \cdot \check{\check{\mathbf{p}}} \rangle = 0$  y, por consiguiente, el teorema del virial queda:

$$2 \langle \check{\check{\mathbf{T}}} \rangle = \langle \check{\check{\mathbf{r}}} \cdot \check{\check{\nabla}} V(\check{\check{\mathbf{r}}}) \rangle .$$

e) Teorema general de conservación. Si un operador  $\check{\check{\mathbf{A}}} = \check{\check{\mathbf{A}}}(\check{\check{\mathbf{r}}}, \check{\check{\mathbf{p}}})$  conmuta con  $\check{\check{\mathbf{H}}}$ , entonces  $\langle \check{\check{\mathbf{A}}} \rangle$  es constante en el tiempo. En efecto

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \check{\check{\mathbf{A}}} \rangle = \langle [\check{\check{\mathbf{A}}}, \check{\check{\mathbf{H}}}] \rangle = \langle \check{\check{\mathbf{0}}} \rangle = 0 ,$$

luego,

$$\text{Si } [\check{\check{\mathbf{A}}}, \check{\check{\mathbf{H}}}] = 0 \text{ entonces } \frac{d}{dt} \langle \check{\check{\mathbf{A}}} \rangle = 0 .$$

En otras palabras, si un operador conmuta con el Hamiltoniano entonces su valor esperado es una constante de movimiento. De este modo, un conjunto de observables compatibles con  $\check{\check{\mathbf{H}}}$  se obtiene considerando las distintas constantes de movimiento del problema, pero sólo reteniendo aquéllas que conmutan entre sí.

### 3.14 El cuadro de Heisenberg.

Como ya hemos visto, el valor esperado de un operador  $\check{\mathbf{F}}_S = \mathbf{F}_S(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}})$ , para un estado  $|\psi(t)\rangle$ , viene dado por

$$\langle \check{\mathbf{F}}_S \rangle = \langle \psi(t) | \check{\mathbf{F}}_S | \psi(t) \rangle .$$

También sabemos que

$$|\psi(t)\rangle = \exp(-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar) |\psi(0)\rangle ,$$

luego,

$$\langle \check{\mathbf{F}} \rangle = \langle \psi(0) | \exp(+i\check{\mathbf{H}}t/\hbar) \check{\mathbf{F}}_S \exp(-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar) | \psi(0) \rangle .$$

Definamos:

$$\check{\mathbf{F}}_H(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}, t) \equiv \exp(+i\check{\mathbf{H}}t/\hbar) \check{\mathbf{F}}_S(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) \exp(-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar) .$$

Entonces, llamando  $|\psi(t)\rangle = |\psi_S(t)\rangle$  y  $|\psi(0)\rangle = |\psi_H\rangle$  (por supuesto que  $|\psi_S(0)\rangle = |\psi_H\rangle$ ), se obtiene:

$$\langle \check{\mathbf{F}} \rangle = \underbrace{\langle \psi_S(t) | \check{\mathbf{F}}_S | \psi_S(t) \rangle}_{\text{Cuadro de Schrödinger}} = \underbrace{\langle \psi_H | \check{\mathbf{F}}_H(t) | \psi_H \rangle}_{\text{Cuadro de Heisenberg}} .$$

Toda la mecánica cuántica se puede formular usando el así llamado *cuadro de Heisenberg* en lugar del *cuadro de Schrödinger* como lo hemos hecho hasta aquí. Ambos cuadros son completamente equivalentes.

En el cuadro de Heisenberg el vector  $|\psi\rangle$  que se asocia a un estado, **no** evoluciona, es decir, no varía a medida que transcurre el tiempo, pero sí lo hacen los operadores.

¿Cuál es la ecuación dinámica que nos da la evolución temporal de los operadores en el cuadro de Heisenberg? Para encontrarla evaluemos

$$\frac{d}{dt} \check{\mathbf{F}}_H(t) = \frac{d}{dt} \left[ \exp(+i\check{\mathbf{H}}t/\hbar) \check{\mathbf{F}}_S \exp(-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar) \right] .$$

Si  $\check{\mathbf{H}}$  y  $\check{\mathbf{F}}_S$  no dependen explícitamente del tiempo se tiene

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \check{\mathbf{F}}_H(t) &= \frac{i}{\hbar} \check{\mathbf{H}} \exp(+i\check{\mathbf{H}}t/\hbar) \check{\mathbf{F}}_S \exp(-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar) + \exp(+i\check{\mathbf{H}}t/\hbar) \check{\mathbf{F}}_S \exp(-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar) \left( -\frac{i}{\hbar} \check{\mathbf{H}} \right) \\ &= \frac{i}{\hbar} \check{\mathbf{H}} \check{\mathbf{F}}_H - \frac{i}{\hbar} \check{\mathbf{F}}_H \check{\mathbf{H}} , \end{aligned}$$

la cual constituye la ecuación dinámica, conocida como *ecuación de Heisenberg*

$$i\hbar \frac{d}{dt} \check{\mathbf{F}}_H(t) = [\check{\mathbf{F}}_H, \check{\mathbf{H}}] .$$

	Cuadro de Schrödinger	Cuadro de Heisenberg
Operadores	$\check{\mathbf{F}}_S = \check{\mathbf{F}}$ Los operadores son fijos <b>No</b> evolucionan con el tiempo	$\check{\mathbf{F}}_H(t) = \exp\left(\frac{i\check{\mathbf{H}}t}{\hbar}\right)\check{\mathbf{F}}_S \exp\left(-\frac{i\check{\mathbf{H}}t}{\hbar}\right)$ Los operadores evolucionan temporalmente
Vectores	$ \psi_S(t)\rangle$ El vector evoluciona temporalmente.	$ \psi_H\rangle =  \psi_S(0)\rangle$ El vector $ \psi_H\rangle$ es fijo, <b>No</b> evoluciona con el tiempo.
Ecuación Dinámica	$i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \psi_S(t)\rangle = \check{\mathbf{H}} \psi_S(t)\rangle$ Ecuación de Schrödinger	$\frac{d}{dt}\check{\mathbf{F}}_H(t) = -\frac{i}{\hbar}[\check{\mathbf{F}}_H(t), \check{\mathbf{H}}]$ Ecuación de Heisenberg

Note que el Hamiltoniano mantiene su forma en todos los cuadros

$$\check{\mathbf{H}} = \check{\mathbf{H}}_S = \check{\mathbf{H}}_H .$$

**Proposición 3.7** Sean  $\check{\mathbf{A}}_S, \check{\mathbf{B}}_S, \check{\mathbf{C}}_S$  tres operadores en el cuadro de Schrödinger y  $\check{\mathbf{A}}_H, \check{\mathbf{B}}_H, \check{\mathbf{C}}_H$  los operadores correspondientes en el cuadro de Heisenberg. Entonces se tiene que

$$[\check{\mathbf{A}}_S, \check{\mathbf{B}}_S] = \check{\mathbf{C}}_S \iff [\check{\mathbf{A}}_H, \check{\mathbf{B}}_H] = \check{\mathbf{C}}_H .$$

**Demostración** Introduzcamos la notación

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\check{\mathbf{H}}t\right) = \check{\mathbf{G}} ,$$

y por definición

$$[\check{\mathbf{A}}_S, \check{\mathbf{B}}_S] = \check{\mathbf{A}}_S\check{\mathbf{B}}_S - \check{\mathbf{B}}_S\check{\mathbf{A}}_S = \check{\mathbf{C}}_S .$$

Multiplicando la última ecuación a la derecha por  $\check{\mathbf{G}}$  y a la izquierda por  $\check{\mathbf{G}}^{-1}$ , se obtiene

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{C}}_H &= \check{\mathbf{G}}^{-1}\check{\mathbf{C}}_S\check{\mathbf{G}} = \check{\mathbf{G}}^{-1}\check{\mathbf{A}}_S\check{\mathbf{B}}_S\check{\mathbf{G}} - \check{\mathbf{G}}^{-1}\check{\mathbf{B}}_S\check{\mathbf{A}}_S\check{\mathbf{G}} \\ &= \check{\mathbf{G}}^{-1}\check{\mathbf{A}}_S\check{\mathbf{G}}\check{\mathbf{G}}^{-1}\check{\mathbf{B}}_S\check{\mathbf{G}} - \check{\mathbf{G}}^{-1}\check{\mathbf{B}}_S\check{\mathbf{G}}\check{\mathbf{G}}^{-1}\check{\mathbf{A}}_S\check{\mathbf{G}} \\ &= \check{\mathbf{A}}_H\check{\mathbf{B}}_H - \check{\mathbf{B}}_H\check{\mathbf{A}}_H = [\check{\mathbf{A}}_H, \check{\mathbf{B}}_H] \end{aligned}$$

Demuestre como ejercicio (Problema 3-7) que si el operador en el cuadro de Schrödinger depende explícitamente del tiempo, entonces la ecuación dinámica para el operador correspondiente en el cuadro de Heisenberg es

$$i\hbar\frac{d}{dt}\check{\mathbf{F}}_H(t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\check{\mathbf{F}}_H(t) + [\check{\mathbf{F}}_H, \check{\mathbf{H}}] .$$

### 3.15 Partícula libre en el cuadro de Heisenberg.

Resolvamos el problema de la partícula libre en el cuadro de Heisenberg. El operador Hamiltoniano es:

$$\check{H} = \check{\mathbf{p}}^2/2m = \check{\mathbf{p}}_S^2/2m = \check{\mathbf{p}}_H^2/2m .$$

Note que  $\check{H}_S = \check{H}_H = \check{H}$  ya que  $\check{H}$  conmuta con  $\check{G} = \exp(-i\check{H}t/\hbar)$ .

Resolver un problema en el cuadro de Heisenberg significa encontrar explícitamente la dependencia temporal de los operadores. Como  $\check{H}$  no depende de  $\check{\mathbf{r}}$ , se tiene  $[\check{\mathbf{p}}_S, \check{H}] = \check{\mathbf{0}}$ . Para el operador momentum en el cuadro de Heisenberg se obtiene

$$\check{\mathbf{p}}_H(t) = \check{G}^{-1}\check{\mathbf{p}}_S\check{G} = \check{\mathbf{p}}_S\check{G}^{-1}\check{G} = \check{\mathbf{p}}_S ,$$

o sea,  $\check{\mathbf{p}}_H(t)$  **no** depende de  $t$ . El mismo resultado se encuentra usando la ecuación de Heisenberg, pues, como  $[\check{\mathbf{p}}_H, \check{H}] = \check{\mathbf{0}}$ , se deduce que  $\check{\mathbf{p}}_H = \text{constante}$ .

Para el operador de posición  $\check{\mathbf{r}}_H(t)$  la ecuación de evolución temporal es

$$\frac{d}{dt}\check{\mathbf{r}}_H(t) = -\frac{i}{\hbar} [\check{\mathbf{r}}_H, \check{H}]_H .$$

Como  $[\check{\mathbf{r}}_S, \check{H}]_S = \frac{i\hbar}{m}\check{\mathbf{p}}_S$  se tiene que  $[\check{\mathbf{r}}_H, \check{H}]_H = \frac{i\hbar}{m}\check{\mathbf{p}}_H$ . Luego

$$\frac{d}{dt}\check{\mathbf{r}}_H(t) = -\frac{i}{\hbar} \frac{i\hbar}{m}\check{\mathbf{p}}_H = \frac{1}{m}\check{\mathbf{p}}_H(t) = \frac{\check{\mathbf{p}}_S}{m} .$$

Integrando se encuentra que

$$\check{\mathbf{r}}_H(t) = \check{\mathbf{r}}_H(0) + \frac{\check{\mathbf{p}}_S}{m}t = \check{\mathbf{r}}_S + \frac{\check{\mathbf{p}}_S}{m}t .$$

Para el valor esperado de la posición se obtiene

$$\langle \check{\mathbf{r}}(t) \rangle = \langle \check{\mathbf{r}} \rangle \Big|_{t=0} + \frac{1}{m} \langle \check{\mathbf{p}} \rangle \Big|_{t=0} t .$$

De esta manera se obtiene que los valores esperados de los operadores, para la partícula libre, se comportan como las variables clásicas correspondientes (ver también el teorema de Ehrenfest).

En la última ecuación los valores esperados vienen dados por

$$\langle \check{\mathbf{r}}(t) \rangle = \langle \psi_S(t) | \check{\mathbf{r}}_S | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi_H | \check{\mathbf{r}}_H(t) | \psi_H \rangle .$$

También se puede encontrar toda la distribución de densidad de probabilidad. Para ello se deben previamente evaluar todos los demás momentos  $\check{\mathbf{r}}^n$  de la distribución.



### 3.16 Leyes de conservación y simetrías

Si  $\check{\mathbf{H}}$  no depende de  $\check{\mathbf{r}}$ , por ejemplo, para la partícula libre, entonces el momento lineal se conserva. En efecto, como  $[\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{H}}] = [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{H}}(\check{\mathbf{p}})] = \check{\mathbf{0}}$ , usando el teorema generalizado de Ehrenfest de la sección anterior, se tiene que

$$\frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{p}} \rangle = 0 .$$

Sea  $\{|\vec{r}_0\rangle\}_{\vec{r}_0 \in \mathbb{R}^3}$  la base de autoestados del operador  $\check{\mathbf{r}}$ . Se tiene

$$\check{\mathbf{r}} |\vec{r}_0\rangle = \vec{r}_0 |\vec{r}_0\rangle .$$

Consideremos una traslación espacial:  $\vec{r}_0 \longrightarrow T_{\vec{a}} \vec{r}_0 \equiv \vec{r}_0 + \vec{a}$ , donde  $T_{\vec{a}}$  es el operador que genera una traslación en el espacio ordinario  $\mathbb{R}^3$ . Sea  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}$  el operador unitario que transforma los vectores de la base

$$|\vec{r}_0\rangle \longrightarrow \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} |\vec{r}_0\rangle = |T_{\vec{a}} \vec{r}_0\rangle = |\vec{r}_0 + \vec{a}\rangle . \quad (3.62)$$

Por supuesto, se tiene que

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{r}} |T_{\vec{a}} \vec{r}_0\rangle &= \check{\mathbf{r}} \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} |\vec{r}_0\rangle = T_{\vec{a}} \vec{r}_0 |T_{\vec{a}} \vec{r}_0\rangle = \check{\mathbf{r}} |\vec{r}_0 + \vec{a}\rangle \\ &= (\vec{r}_0 + \vec{a}) |\vec{r}_0 + \vec{a}\rangle = (T_{\vec{a}} \vec{r}_0) \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} |\vec{r}_0\rangle . \end{aligned}$$

Es importante notar que  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}$  es un operador unitario de  $\mathcal{H}$  mientras que  $T_{\vec{a}}$  es una traslación en el espacio ordinario  $\mathbb{R}^3$ .

Analicemos el efecto del operador  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}^{-1} \check{\mathbf{r}} \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}$ , donde  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}^{-1} = \check{\mathbf{U}}_{-\vec{a}}$ . Se tiene, usando la relación anterior,

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}^{-1} \check{\mathbf{r}} \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} |\vec{r}_0\rangle &= \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}^{-1} (T_{\vec{a}} \vec{r}_0) \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} |\vec{r}_0\rangle \\ &= (T_{\vec{a}} \vec{r}_0) \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}^{-1} \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} |\vec{r}_0\rangle \\ &= (T_{\vec{a}} \vec{r}_0) |\vec{r}_0\rangle = (\vec{r}_0 + \vec{a}) |\vec{r}_0\rangle = (\check{\mathbf{r}} + \vec{a} \check{\mathbf{1}}) |\vec{r}_0\rangle . \end{aligned}$$

Siendo esta relación válida para cualquier  $|\vec{r}_0\rangle$ , dada la linealidad de los operadores, resulta válido para cualquier  $|\psi\rangle = \int d^3 r_0 |\vec{r}_0\rangle \langle \vec{r}_0 | \psi \rangle$ ; se concluye que

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}^{-1} \check{\mathbf{r}} \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} = (\check{\mathbf{r}} + \vec{a} \check{\mathbf{1}}) . \quad (3.63)$$

Hemos demostrado que si  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}$  es un operador de traslación en  $\mathcal{H}$  entonces se cumple (3.63). Recíprocamente, mostremos ahora que si un operador cumple con (3.63) entonces  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}$  es un operador de traslación en  $\mathcal{H}$ . Hay que mostrar que si (3.63) se cumple entonces  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} |\vec{r}_0\rangle$  es autovector de  $\check{\mathbf{r}}$  con autovalor  $T_{\vec{a}} \vec{r}_0 = \vec{r}_0 + \vec{a}$ . Multiplicando (3.63) por  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}$  por la izquierda y operando sobre un vector  $|\vec{r}_0\rangle$  se tiene:

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{r}} \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} |\vec{r}_0\rangle &= \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} (\check{\mathbf{r}} + \vec{a} \check{\mathbf{1}}) |\vec{r}_0\rangle = \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} (\vec{r}_0 + \vec{a}) |\vec{r}_0\rangle \\ &= (\vec{r}_0 + \vec{a}) (\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} |\vec{r}_0\rangle) , \end{aligned}$$

de modo que podemos identificar  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}|\vec{r}_0\rangle = |\vec{r}_0 + \vec{a}\rangle$ , en concordancia con la relación (3.62)). En otras palabras, la relación (3.63) es una condición necesaria y suficiente para que  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}$  sea un *operador de traslaciones*.

Encontramos ahora una expresión explícita para el operador  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}$ . Para ello consideremos primero las traslaciones infinitesimales  $\delta\vec{a}$ :

$$\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{a}}|\vec{r}_0\rangle = |\vec{r}_0 + \delta\vec{a}\rangle . \quad (3.64)$$

**Proposición 3.8** Si  $\delta\vec{a}$  es un vector infinitesimal entonces  $\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{a}}$  viene dado por:

$$\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{a}} = \check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}} . \quad (3.65)$$

### Demostración

i) Mostremos primero que  $\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{a}}$  es unitario.

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{a}}\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{a}}^\dagger &= \left( \check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}} \right) \left( \check{\mathbf{1}} + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}^\dagger \right) \\ &= \check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}} + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}^\dagger + \mathcal{O}((\delta\vec{a})^2) . \end{aligned}$$

Como  $\delta\vec{a}$  es infinitesimal, los términos del orden  $(\delta\vec{a})^2$  se desprecian, quedando que es unitario

$$\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{a}}\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{a}}^\dagger = \check{\mathbf{1}} .$$

ii) Mostremos ahora que  $\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{a}}$  cumple con (3.63).

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{a}}^{-1}\check{\mathbf{r}}\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{a}} &= \check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{a}}^\dagger\check{\mathbf{r}}\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{a}} \\ &= \left( \check{\mathbf{1}} + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}} \right) \check{\mathbf{r}} \left( \check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}} \right) \\ &= \check{\mathbf{r}} + \frac{i}{\hbar}(\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}})\check{\mathbf{r}} - \frac{i}{\hbar}\check{\mathbf{r}}(\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}) \\ &= \check{\mathbf{r}} + \frac{i}{\hbar}[\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{r}}] . \end{aligned}$$

Evaluemos el conmutador  $[\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{r}}]$ .

$$\begin{aligned} [\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{r}}_j] &= (\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}})\check{\mathbf{r}}_j - \check{\mathbf{r}}_j(\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}) \\ &= \sum_k (\delta a_k \check{\mathbf{p}}_k \check{\mathbf{r}}_j - \check{\mathbf{r}}_j \delta a_k \check{\mathbf{p}}_k) \\ &= \sum_k \delta a_k (\check{\mathbf{p}}_k \check{\mathbf{r}}_j - \check{\mathbf{r}}_j \check{\mathbf{p}}_k) \\ &= \sum_k \delta a_k (-i\hbar) \delta_{jk} = -i\hbar \delta a_j , \end{aligned}$$

en forma vectorial,

$$\left[ \delta \vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{r}} \right] = -i\hbar \delta \vec{a} \check{\mathbf{1}} .$$

Luego

$$\check{\mathbf{U}}_{\delta \vec{a}}^{-1} \check{\mathbf{r}} \check{\mathbf{U}}_{\delta \vec{a}} = \check{\mathbf{r}} + \delta \vec{a} \check{\mathbf{1}} ,$$

es decir,  $\check{\mathbf{U}}_{\delta \vec{a}}$  efectivamente es el operador unitario para traslaciones espaciales infinitesimales.

Mostremos la similitud que existe entre lo anterior y el operador de las traslaciones temporales infinitesimales. Para estas últimas, en una sección anterior, habíamos encontrado:

$$|\psi(t + \delta\tau)\rangle = \left( \check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \delta\tau \check{\mathbf{H}} \right) |\psi(t)\rangle ,$$

donde  $\delta\tau$  es un desplazamiento temporal infinitesimal. Esta ecuación se compara con

$$|\vec{r}_0 + \delta \vec{a}\rangle = \left( \check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \delta \vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}} \right) |\vec{r}_0\rangle .$$

$\check{\mathbf{H}}$  es el generador de las traslaciones temporales infinitesimales;  $\check{\mathbf{p}}$  es el generador de las traslaciones espaciales infinitesimales.

Del mismo modo como  $\exp(-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar)$  es el operador unitario para traslaciones temporales finitas, se espera que  $\exp(-i\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}/\hbar)$  sea el operador unitario para traslaciones espaciales finitas. Para demostrar esto hay que probar que tal operador es unitario y además cumple con la relación (3.63). Definamos

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} \equiv \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}\right) . \quad (3.66)$$

Por ser  $\check{\mathbf{p}}$  un operador autohermítico, es inmediato que  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}$ , definido por (3.66), es un operador unitario. Demostremos que este operador satisface la relación (3.63). Evaluemos primeramente el conmutador  $[\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}]$ :

$$\begin{aligned} \left[ \check{\mathbf{r}}, \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}\right) \right] &= i\hbar \left( \vec{\nabla}_{\vec{p}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}\right) \right) \check{\mathbf{1}} \\ &= i\hbar \left( \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}\right) \right) \left( -\frac{i}{\hbar} \vec{a} \right) \\ &= \vec{a} \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} . \end{aligned}$$

Usando este resultado se obtiene que:

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}^{-1} \check{\mathbf{r}} \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} = \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}^{-1} \left( \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} \check{\mathbf{r}} + \vec{a} \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} \right) = \check{\mathbf{r}} + \vec{a} \check{\mathbf{1}} .$$

Concluimos que el operador  $\check{U}_{\vec{a}}$  dado por (3.66) efectivamente es el operador unitario para traslaciones temporales finitas. Al mismo resultado se llega aplicando  $n$  transformaciones infinitesimales (con  $\delta\vec{a} = \vec{a}/n$ ):

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left( \check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \frac{\vec{a}}{n} \cdot \check{\mathbf{p}} \right)^n = \exp(-i\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}/\hbar) .$$

Como  $\check{U}_{\vec{a}}$  sólo depende de  $\check{\mathbf{p}}$ , conmuta con  $\check{\mathbf{p}}$  y se tiene

$$\check{U}_{\vec{a}}^{-1} \check{\mathbf{p}} \check{U}_{\vec{a}} = \check{U}_{\vec{a}}^{-1} \check{U}_{\vec{a}} \check{\mathbf{p}} = \check{\mathbf{p}} ,$$

o sea, el operador  $\check{\mathbf{p}}$  no es afectado por la transformación de similitud con el operador  $\check{U}_{\vec{a}}$ . ¿Qué pasa con otros operadores? ¿Cómo son afectados por el operador de traslación  $\check{U}_{\vec{a}}$ ?

Consideremos el operador  $\check{\mathbf{r}}^2$ ; se tiene:

$$\check{U}_{\vec{a}}^{-1} \check{\mathbf{r}}^2 \check{U}_{\vec{a}} = \check{U}_{\vec{a}}^{-1} \check{\mathbf{r}} \check{U}_{\vec{a}} \cdot \check{U}_{\vec{a}}^{-1} \check{\mathbf{r}} \check{U}_{\vec{a}} = \left( \check{\mathbf{r}} + \vec{a} \check{\mathbf{1}} \right)^2 .$$

En general, para un operador  $\check{\mathbf{F}} = \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}})$  se tiene

$$\check{U}_{\vec{a}}^{-1} \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) \check{U}_{\vec{a}} = \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}} + \vec{a} \check{\mathbf{1}}, \check{\mathbf{p}}) .$$

**Definición 3.2** Un operador  $\check{\mathbf{F}}$  se dice que es invariante ante un operador unitario  $\check{U}$  si

$$\check{U}^{-1} \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) \check{U} = \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) .$$

Si  $\check{\mathbf{F}}$  es invariante ante  $\check{U}$  entonces  $\check{\mathbf{F}}$  y  $\check{U}$  conmutan.

**Proposición 3.9** Sea  $\check{\mathbf{F}}$  un operador arbitrario, entonces

$$[\check{\mathbf{F}}, \check{U}_{\vec{a}}] = 0 \quad \forall \vec{a} \iff [\check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{p}}] = 0 .$$

### Demostración

- i) Supongamos que  $[\check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{p}}] = 0$ . Como  $\check{\mathbf{F}}$  conmuta con  $\check{\mathbf{p}}$ , también conmuta con el operador  $\check{U}_{\vec{a}} = \exp(-i\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}/\hbar)$ .
- ii) Supongamos que  $[\check{\mathbf{F}}, \check{U}_{\vec{a}}] = 0$ . Como esta relación, en particular, se cumple para traslaciones infinitesimales  $\delta\vec{a}$ , se tiene

$$\begin{aligned} 0 &= \check{\mathbf{F}} \check{U}_{\delta\vec{a}} - \check{U}_{\delta\vec{a}} \check{\mathbf{F}} \\ &= \check{\mathbf{F}} \left( \check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}} \right) - \left( \check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}} \right) \check{\mathbf{F}} \\ &= \check{\mathbf{F}} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a} \cdot (\check{\mathbf{F}} \check{\mathbf{p}}) - \check{\mathbf{F}} + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a} \cdot (\check{\mathbf{p}} \check{\mathbf{F}}) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \delta\vec{a} \cdot (\check{\mathbf{F}} \check{\mathbf{p}} - \check{\mathbf{p}} \check{\mathbf{F}}) , \end{aligned}$$

finalmente

$$\check{\mathbf{F}} \check{\mathbf{p}} - \check{\mathbf{p}} \check{\mathbf{F}} = [\check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{p}}] = 0 .$$

**Resumen:**

$\check{H}$  es invariante bajo traslaciones si y sólo si

$$\check{U}_{\vec{a}}^{-1} \check{H} \check{U}_{\vec{a}} = \check{H} \iff [\check{H}, \check{U}_{\vec{a}}] = 0 \iff [\check{H}, \check{\mathbf{p}}] = 0 \implies \frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{p}} \rangle = 0 .$$

En un capítulo posterior repetiremos lo hecho en esta sección pero para el caso en que el Hamiltoniano sea invariante bajo rotaciones.

Finalmente note que para los operadores de traslación  $\check{U}_{\vec{a}}$  se cumple que

$$\check{U}_{\vec{a}} \check{U}_{\vec{b}} = \check{U}_{\vec{a}+\vec{b}} = \check{U}_{\vec{b}+\vec{a}} = \check{U}_{\vec{b}} \check{U}_{\vec{a}} .$$

Con este producto el conjunto de los operadores

$$\{\check{U}_{\vec{a}}\}_{\vec{a} \in \mathbb{R}^3}$$

forman un *grupo*, el así llamado *grupo de simetría*. En este caso particular el grupo es un grupo conmutativo isomorfo al grupo aditivo en  $\mathbb{R}^3$ .

### 3.17 Estados estacionarios.

En lo que queda de este capítulo consideraremos sistemas descritos por un operador Hamiltoniano  $\check{H}$  que no dependa explícitamente del tiempo.

**Definición 3.3** Una función de estado es *estacionaria* si la dependencia temporal es factorizable de la manera

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle e^{-iEt/\hbar} = |\psi\rangle e^{-iEt/\hbar} . \tag{3.67}$$

Los estados  $|\psi(t)\rangle$  evolucionan según la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \check{H} |\psi(t)\rangle . \tag{3.68}$$

Reemplazando (3.67) en (3.68) se obtiene

$$\begin{aligned} \check{H} |\psi\rangle e^{-iEt/\hbar} &= i\hbar \frac{d}{dt} |\psi\rangle e^{-iEt/\hbar} \\ &= i\hbar |\psi\rangle \left( -\frac{i}{\hbar} E \right) e^{-iEt/\hbar} , \end{aligned}$$

o sea, cancelando el número complejo  $e^{-iEt/\hbar}$ , se obtiene

$$\boxed{\check{H} |\psi\rangle = E |\psi\rangle} , \tag{3.69}$$

ecuación que se conoce con el nombre “Ecuación de Schrödinger tiempo independiente” o ecuación de autovalores de energía. La ecuación (3.69) representa un problema de valores propios. Como el Hamiltoniano es hermítico ( $\check{H} = \check{H}^\dagger$ ) los autovalores, es decir la energía  $E$ , son reales.

Denotemos el autovector de  $\check{\mathbf{H}}$  con autovalor  $E$  por  $|\psi_E\rangle$ . El valor esperado de la energía es  $\langle \check{\mathbf{H}} \rangle = E$ , la varianza  $\Delta \check{\mathbf{H}} = \Delta E = 0$  (la demostración de estas afirmaciones es directa). Al realizar una medición de la energía a un sistema descrito por un estado estacionario  $|\psi_E\rangle$ , se obtiene con certeza el valor  $E$ .

Para estados estacionarios, tanto la densidad  $\rho(\vec{r}, t)$  como la corriente  $\vec{j}(\vec{r}, t)$  son independientes del tiempo. En efecto,

$$\begin{aligned}\rho(\vec{r}, t) &= \langle \psi(t) | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle \\ &= \langle \psi | e^{iEt/\hbar} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | e^{-iEt/\hbar} | \psi \rangle \\ &= \langle \psi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \psi \rangle = |\psi_E(\vec{r})|^2 = \rho(\vec{r})\end{aligned}$$

y análogamente para  $\vec{j}(\vec{r}, t)$ .

Ya lo habíamos mencionado anteriormente: Para estados estacionarios el valor esperado de cualquier operador  $\check{\mathbf{A}} = \check{\mathbf{A}}(\vec{r}, \vec{p})$  que no depende explícitamente de  $t$ , es independiente de  $t$  (aún cuando tal operador no conmute con  $\check{\mathbf{H}}$ ).

Una combinación lineal de estados estacionarios no es un estado estacionario si incluye estados de energía distintas. Sea  $|\Psi\rangle = |\Psi(0)\rangle \in \mathcal{H}$  una función de estado arbitraria, en el instante  $t = 0$ . Además sea  $\{|\phi_{E_n}\rangle\}$  una base de autovectores estacionarios de  $\check{\mathbf{H}}$ , es decir,

$$\check{\mathbf{H}}|\phi_{E_n}\rangle = E_n|\phi_{E_n}\rangle ,$$

$$|\phi_{E_n}(t)\rangle = |\phi_{E_n}\rangle e^{-iE_n t/\hbar} . \quad (3.70)$$

El vector  $|\Psi\rangle$  se puede desarrollar en términos del conjunto completo de autofunciones de  $\check{\mathbf{H}}$ , teniéndose

$$|\Psi\rangle = \sum_n |\phi_{E_n}\rangle \langle \phi_{E_n} | \Psi \rangle .$$

Dado el carácter lineal de la ecuación de evolución temporal, para  $|\Psi(t)\rangle$  se tendrá

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n |\phi_{E_n}\rangle \langle \phi_{E_n} | \Psi \rangle e^{-iE_n t/\hbar} ,$$

puesto que cada componente evoluciona según (3.70). A pesar de que  $|\Psi(t)\rangle$  puede ser una función de estado del sistema, no es un estado estacionario ni un autovector del Hamiltoniano.

Al realizar una medición de energía del sistema descrito por la función de estado  $|\Psi(t)\rangle$ , de acuerdo al postulado 3, se obtendrá siempre un autovalor del operador correspondiente, en este caso del Hamiltoniano. El autovalor  $E_n$  se obtendrá con probabilidad  $|\langle \phi_{E_n} | \Psi \rangle|^2$ .

Para  $|\Psi(t)\rangle$  el valor esperado de la energía es:

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= \sum_{n,m} \langle \Psi | \phi_{E_n} \rangle e^{iE_n t/\hbar} \langle \phi_{E_n} | \check{\mathbf{H}} | \phi_{E_m} \rangle \langle \phi_{E_m} | \Psi \rangle e^{-iE_m t/\hbar} \\ &= \sum_{n,m} \langle \Psi | \phi_{E_n} \rangle e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} E_m \delta_{nm} \langle \phi_{E_m} | \Psi \rangle \\ &= \sum_n \langle \Psi | \phi_{E_n} \rangle E_n \langle \phi_{E_n} | \Psi \rangle = \sum_n E_n |\langle \phi_{E_n} | \Psi \rangle|^2 .\end{aligned}$$

Es decir, el valor esperado de la energía es igual a la suma de cada valor que se puede obtener en una medición multiplicado por la probabilidad de obtener ese valor. El resultado es independiente del tiempo.

Si la función de estado de un sistema es  $|\Psi(t)\rangle$ , entonces el valor esperado de un operador  $\check{\mathbf{A}}$  arbitrario, en general, sí depende del tiempo. En efecto:

$$\begin{aligned} \langle \check{\mathbf{A}} \rangle(t) &= \langle \Psi(t) | \check{\mathbf{A}} | \Psi(t) \rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle \Psi | \phi_{E_n} \rangle A_{nm} \langle \phi_{E_m} | \Psi \rangle e^{i(E_n - E_m)t/\hbar}, \end{aligned}$$

donde  $A_{nm} \equiv \langle \phi_{E_n} | \check{\mathbf{A}} | \phi_{E_m} \rangle$ .

### 3.17.1 Operador de Green.

Encontremos el operador y la función de Green en términos de las funciones de onda tiempo independientes. Para ello consideremos la evolución temporal de un estado  $|\Psi(0)\rangle$ :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n |\phi_{E_n}\rangle e^{-iE_n t/\hbar} \langle \phi_{E_n} | \Psi(0) \rangle.$$

Se observa que definiendo el operador de Green por

$$\check{\mathbf{G}}(t) = \sum_n |\phi_{E_n}\rangle e^{-iE_n t/\hbar} \langle \phi_{E_n} |, \quad (3.71)$$

se encuentra que

$$|\Psi(t)\rangle = \check{\mathbf{G}}(t) |\Psi(0)\rangle.$$

Con esta definición, la función de Green queda

$$\begin{aligned} G(\vec{r}, \vec{r}', t) &= \langle \vec{r} | \check{\mathbf{G}}(t) | \vec{r}' \rangle \\ &= \sum_n \langle \vec{r} | \phi_{E_n} \rangle e^{-iE_n t/\hbar} \langle \phi_{E_n} | \vec{r}' \rangle. \end{aligned} \quad (3.72)$$

En el límite  $t = 0$ , tal como debe ser, se recupera la delta de Dirac:

$$G(\vec{r}, \vec{r}', 0) = \sum_n \langle \vec{r} | \phi_{E_n} \rangle \langle \phi_{E_n} | \vec{r}' \rangle = \langle \vec{r} | \vec{r}' \rangle = \delta(\vec{r} - \vec{r}').$$

Mostraremos a continuación que la expresión (3.71) coincide con el resultado obtenido en la sección 3.12. Se tiene

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{G}}(t) &= \sum_n |\phi_{E_n}\rangle e^{-iE_n t/\hbar} \langle \phi_{E_n} | \\ &= \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} |\phi_{E_n}\rangle \langle \phi_{E_n} | \\ &= \sum_n e^{-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar} |\phi_{E_n}\rangle \langle \phi_{E_n} | \\ &= e^{-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar} \sum_n |\phi_{E_n}\rangle \langle \phi_{E_n} | = e^{-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar}, \end{aligned}$$

resultado que coincide con la ecuación (3.55).

### 3.17.2 Funciones de onda reales.

Finalmente, mostremos que si el Hamiltoniano es real en la representación de coordenadas, las autofunciones de la ecuación de Schrödinger tiempo independiente siempre se pueden elegir de manera que sean reales.

Consideremos las autofunciones  $\psi_{E_n}(\vec{r})$  del Hamiltoniano tiempo independiente  $\check{H}$ , es decir,

$$\check{H}\psi_{E_n}(\vec{r}) = E_n\psi_{E_n}(\vec{r}) .$$

Realizando una conjugación compleja de esta ecuación y usando la hipótesis de que  $\check{H} = \check{H}^*$ , se deduce que

$$\check{H}\psi_{E_n}^*(\vec{r}) = E_n\psi_{E_n}^*(\vec{r}) ,$$

o sea,  $\psi_{E_n}^*(\vec{r})$  también es solución de la misma ecuación de Schrödinger, con el mismo autovalor. Por supuesto que una combinación lineal de las dos funciones anteriores también es solución. Luego, si el espectro de energía es no degenerado, usando una combinación lineal adecuada de las dos funciones  $\psi_{E_n}(\vec{r})$  y  $\psi_{E_n}^*(\vec{r})$ , siempre se puede encontrar una autofunción del autovalor  $E_n$  que sea real. De aquí en adelante siempre supondremos que elegimos las funciones de esa manera cuando el espectro es no degenerado. Note que si la función de onda es real, la corriente de probabilidad  $\vec{j}(\vec{r}) = 0$ , o sea, para estados estacionarios no degenerados no hay corriente de partículas.

Si el autovalor  $E_n$  es degenerado, siempre es posible elegir combinaciones lineales de manera de obtener una autofunción real, pero no siempre es conveniente hacerlo.

#### Ejemplo:

Consideremos el caso de una partícula libre en una dimensión. En ese caso el espectro es continuo todos los valores positivos de  $E$  son autovalores del Hamiltoniano con degeneración doble. Las ondas planas

$$\Psi_E^+(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} = \Psi_E^+(x) e^{-i\omega t} ,$$

y

$$\Psi_E^-(x, t) = e^{i(-kx - \omega t)} = \Psi_E^-(x) e^{-i\omega t} ,$$

que viajan en la dirección  $+\hat{x}$  y  $-\hat{x}$  respectivamente, son dos autofunciones linealmente independientes correspondientes al autovalor  $E = (\hbar k)^2/2m$ . A pesar de ser funciones complejas, son éstas las funciones que deben usarse para representar ondas planas con corriente no nula.

Dos funciones reales, linealmente independientes, autofunciones de  $\check{H}$  para el mismo autovalor  $E$  (pero de corriente nula) son:

$$\Psi_E^{(1)} = \Psi_E^+ + \Psi_E^- ,$$

y

$$\Psi_E^{(2)} = i (\Psi_E^+ - \Psi_E^-) .$$



### 3.18 Degeneración del espectro y simetrías.

En esta sección repetiremos algunos de los desarrollos hechos en la sección 3.4, ilustrando los resultados con un ejemplo concreto.

Comenzamos recordando un teorema que se demostró en la introducción matemática.

**Teorema 3.4** Sean  $\check{\mathbf{A}}$  y  $\check{\mathbf{H}}$  dos operadores autohermíticos. Si los dos operadores conmutan entre sí, entonces existe una base de  $\mathcal{H}$ , cuyos elementos son simultáneamente autovectores de  $\check{\mathbf{A}}$  y  $\check{\mathbf{H}}$ .

Sea  $\check{\mathbf{A}}$  un operador autohermítico que conmuta con el Hamiltoniano  $\check{\mathbf{H}}$  y consideremos el operador unitario asociado a  $\check{\mathbf{A}}$  definido por

$$\check{\mathbf{U}}_\lambda \equiv \exp(-i\lambda\check{\mathbf{A}}/\hbar) .$$

La demostración de que  $\check{\mathbf{U}}_\lambda$  es unitario es directa.

Como  $\check{\mathbf{U}}_\lambda$  sólo depende de  $\check{\mathbf{A}}$  y el Hamiltoniano conmuta con  $\check{\mathbf{A}}$  se tiene que  $\check{\mathbf{H}}$  conmuta con  $\check{\mathbf{U}}_\lambda$ . Es fácil demostrar que en ese caso el Hamiltoniano es invariante ante  $\check{\mathbf{U}}_\lambda$  y que, en forma análoga a las traslaciones temporales y espaciales, se cumple que

$$[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{H}}] = \check{\mathbf{0}} \iff \check{\mathbf{U}}_\lambda^{-1} \check{\mathbf{H}} \check{\mathbf{U}}_\lambda = \check{\mathbf{H}} .$$

El conjunto de operadores  $\{\check{\mathbf{U}}_\lambda\}_{\lambda \in \mathbb{R}} \equiv G_{\check{\mathbf{H}}}$  forman un grupo <sup>2</sup>.

Los operadores  $\{\check{\mathbf{U}}_\lambda\}$  están estrechamente relacionados con la degeneración del espectro de energía, es decir, con la existencia de varias autofunciones del Hamiltoniano  $\check{\mathbf{H}}$  que tienen el mismo autovalor de energía. En efecto, sea  $|\psi_E\rangle$  un autoestado del Hamiltoniano con autovalor  $E$ . Mostremos que entonces  $\check{\mathbf{U}}_\lambda|\psi_E\rangle$  también es un autovector de  $\check{\mathbf{H}}$  con el mismo autovalor. En efecto (usando el hecho que  $\check{\mathbf{U}}_\lambda$  conmuta con  $\check{\mathbf{H}}$ ):

$$\check{\mathbf{H}} (\check{\mathbf{U}}_\lambda |\psi_E\rangle) = \check{\mathbf{U}}_\lambda \check{\mathbf{H}} |\psi_E\rangle = \check{\mathbf{U}}_\lambda E |\psi_E\rangle = E (\check{\mathbf{U}}_\lambda |\psi_E\rangle) .$$

Sin embargo, en general, no todos los vectores que se obtienen de un vector  $|\psi_E\rangle$  aplicando el operador  $\check{\mathbf{U}}_\lambda$  son necesariamente linealmente independientes (*l.i.*), lo cual tiene incidencia en las propiedades de simetría de la función  $\psi_E(\vec{r})$ .

Denotemos por  $\{|E, a\rangle\}$  a los autovectores comunes de  $\check{\mathbf{H}}$  y  $\check{\mathbf{A}}$ , o sea,

$$\check{\mathbf{H}}|E, a\rangle = E|E, a\rangle \quad \check{\mathbf{A}}|E, a\rangle = a|E, a\rangle .$$

Si para  $E$  y  $a$  fijos existen dos o más autovectores *l.i.*, entonces existe un observable que permite distinguir esta degeneración, o sea, existe otro operador autohermítico  $\check{\mathbf{B}}$  que conmuta simultáneamente con  $\check{\mathbf{A}}$  y  $\check{\mathbf{H}}$ . Lo anterior se repite hasta que los números cuánticos  $E, a, b, c, \dots$ , especifican unívocamente a los autovectores. Entonces tenemos que el conjunto de operadores  $\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{C}}, \dots$  forman un *conjunto completo de operadores compatibles*. Notamos que pueden existir operadores que conmuten con  $\check{\mathbf{H}}$ , pero que deben excluirse del

<sup>2</sup>El grupo  $G_{\check{\mathbf{H}}}$  puede tener varios “generadores”, es decir, varios operadores  $\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}, \dots$ , que conmutan con  $\check{\mathbf{H}}$ . En tal caso los operadores unitarios son  $\check{\mathbf{U}}(\lambda_1, \lambda_2, \dots) = \exp[-i(\lambda_1\check{\mathbf{A}} + \lambda_2\check{\mathbf{B}} + \dots)]$ .

conjunto completo de operadores compatibles por no conmutar con todos los demás operadores del conjunto (tales operadores sin embargo pueden tener mucha importancia; por ejemplo, en el capítulo de Momento Angular éstos serán los operadores “de subida y de bajada”).

**Ejemplo:** Consideremos el caso de una partícula libre en una dimensión. El operador Hamiltoniano es:

$$\check{\mathbf{H}} = \frac{\check{\mathbf{p}}_x^2}{2m}.$$

Para cada valor positivo  $E$ , la ecuación de autovalores

$$\check{\mathbf{H}}|\psi_E\rangle = E|\psi_E\rangle$$

tiene dos autovectores *l.i.* En la representación de coordenadas dos vectores *l.i.* son

$$\langle x|\psi_E^{(1)}\rangle = \cos(k_x x) \quad \text{y} \quad \langle x|\psi_E^{(2)}\rangle = \text{sen}(k_x x),$$

con  $k_x = \sqrt{2mE}/\hbar$ . Como cada autovalor de  $\check{\mathbf{H}}$  es doblemente degenerado, existe un observable, en este caso la dirección en que se mueve la partícula, que permite distinguir estos dos estados. El operador autohermítico asociado a este observable es

$$\check{\mathbf{A}} = \frac{\check{\mathbf{k}}_x}{|k_x|} = \frac{\check{\mathbf{p}}_x}{|p_x|}.$$

En efecto,  $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{H}}] = 0$  y los autovectores comunes a  $\check{\mathbf{A}}$  y  $\check{\mathbf{H}}$  son

$$|\psi_E^+\rangle \equiv |E, +\rangle = |\psi_E^{(1)}\rangle + i|\psi_E^{(2)}\rangle \quad \text{y} \quad |\psi_E^-\rangle \equiv |E, -\rangle = |\psi_E^{(1)}\rangle - i|\psi_E^{(2)}\rangle.$$

En la representación de coordenadas estos estados corresponden a las ondas planas

$$\langle x|\psi_E^+\rangle = e^{+ik_x x} \quad \text{y} \quad \langle x|\psi_E^-\rangle = e^{-ik_x x}.$$

Los estados  $|E, +\rangle$  y  $|E, -\rangle$  son autovectores de  $\check{\mathbf{A}}$  y  $\check{\mathbf{H}}$  y se tiene

$$\check{\mathbf{A}}|E, +\rangle = +|E, +\rangle \quad \text{y} \quad \check{\mathbf{A}}|E, -\rangle = -|E, -\rangle,$$

$$\check{\mathbf{H}}|E, +\rangle = E|E, +\rangle \quad \text{y} \quad \check{\mathbf{H}}|E, -\rangle = E|E, -\rangle$$

Los operadores  $\check{\mathbf{H}}$  y  $\check{\mathbf{A}}$  forman un conjunto completo de operadores de  $\mathcal{H}$ .

¿Qué autovectores se obtienen al operar con el operador unitario  $\check{\mathbf{U}}_\lambda = e^{-i\lambda\check{\mathbf{A}}/\hbar}$  sobre el autoestado  $|\psi_E^{(1)}\rangle$ ?

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{U}}_\lambda|\psi_E^{(1)}\rangle &= e^{-i\lambda\check{\mathbf{A}}/\hbar}|\psi_E^{(1)}\rangle \\ &= e^{-i\lambda\check{\mathbf{A}}/\hbar}\frac{1}{2}(|\psi_E^+\rangle + |\psi_E^-\rangle) \\ &= \frac{1}{2}\left[e^{-i\lambda\check{\mathbf{A}}/\hbar}|E, +\rangle + e^{-i\lambda\check{\mathbf{A}}/\hbar}|E, -\rangle\right] \\ &= \frac{1}{2}(e^{-i\lambda/\hbar}|E, +\rangle + e^{i\lambda/\hbar}|E, -\rangle). \end{aligned}$$

Variando  $\lambda \in \mathbb{R}$  se obtienen los distintos autovectores de  $\check{\mathbf{H}}$  con el autovalor  $E$ . En este caso sólo dos de ellos son *l.i.*

### 3.19 El Wronskiano.

En lo que sigue y hasta el final de este capítulo nos limitaremos a la ecuación de Schrödinger en una dimensión.

Con la notación

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} ,$$

y

$$U(x) \equiv \frac{2m}{\hbar^2} V(x) ,$$

la ecuación de Schrödinger tiempo independiente en una dimensión, es:

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + k^2 - U(x) \right] \psi(x) = 0 . \quad (3.73)$$

**Definición 3.4** Sean  $\psi_1(x)$  y  $\psi_2(x)$  dos funciones continuas. El *Wronskiano* de  $\psi_1(x)$  y  $\psi_2(x)$  es,

$$W(\psi_1, \psi_2)(x) \equiv \begin{vmatrix} \psi_1(x) & \psi_1'(x) \\ \psi_2(x) & \psi_2'(x) \end{vmatrix} = \psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_2(x)\psi_1'(x) .$$

Propiedades:

- i)  $W(\psi_1, \psi_2) = -W(\psi_2, \psi_1)$ .
- ii) Si  $\psi_1(x)$  y  $\psi_2(x)$  son linealmente dependientes entonces  $W(\psi_1, \psi_2) = 0 \quad \forall x$ .
- iii) Recíprocamente, si  $W(\psi_1, \psi_2)(x) = 0 \quad \forall x$  entonces  $\psi_1(x)$  y  $\psi_2(x)$  son linealmente dependientes.

**Demostración** Por hipótesis

$$\psi_1\psi_2' - \psi_2\psi_1' = 0 .$$

Dividiendo por  $\psi_1 \cdot \psi_2$  se obtiene

$$\frac{\psi_1'}{\psi_1} = \frac{\psi_2'}{\psi_2} ,$$

o sea, las derivadas logarítmicas de las dos funciones son iguales:

$$\frac{d}{dx} \ln \psi_1(x) = \frac{d}{dx} \ln \psi_2(x) .$$

Integrando se obtiene

$$\ln \psi_1(x) = \ln \psi_2(x) + C ,$$

de donde,  $\psi_1(x) = \lambda\psi_2(x)$ .

- iv) Si  $\psi_1(x)$  y  $\psi_2(x)$  son soluciones de la ecuación (3.73) para el mismo valor de  $k^2$ , entonces el Wronskiano **no** depende de  $x$ .

**Demostración** Por hipótesis

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + k^2 - U(x) \right] \psi_1(x) = 0 \quad \text{y} \quad \left[ \frac{d^2}{dx^2} + k^2 - U(x) \right] \psi_2(x) = 0 .$$

Multiplicando la primera de estas ecuaciones por  $\psi_2(x)$  y la segunda por  $\psi_1(x)$  se obtiene:

$$\psi_2 \psi_1'' = (U - k^2) \psi_2 \psi_1 \quad \text{y} \quad \psi_1 \psi_2'' = (U - k^2) \psi_2 \psi_1 .$$

Restando una de otra se deduce que

$$\begin{aligned} 0 &= \psi_2 \psi_1'' - \psi_1 \psi_2'' \\ &= \frac{d}{dx} (\psi_2 \psi_1' - \psi_1 \psi_2') \\ &= -\frac{d}{dx} W(\psi_1, \psi_2) , \end{aligned}$$

es decir, el Wronskiano  $W(\psi_1, \psi_2) = \text{constante}$ .

- v) Si  $\psi_1(x)$  y  $\psi_2(x)$  son dos soluciones de la misma ecuación de Schrödinger (3.73) y si el Wronskiano es cero en un punto, entonces  $\psi_1(x)$  y  $\psi_2(x)$  son linealmente dependientes.

## 3.20 Condiciones de borde.

No todas las soluciones de la ecuación de Schrödinger de un problema físico son soluciones físicamente aceptables. Para que lo sean las funciones deben ser normalizables, o al menos estar acotadas, es decir,  $|\psi(x, t)| < A \quad \forall x$ , con  $A$  fijo. Esta restricción tiene consecuencias importantes sobre el tipo de espectro de un problema físico. Analicemos el comportamiento de las soluciones de la ecuación de Schrödinger para  $x \rightarrow +\infty$ .

- a) Caso en que  $U(x) - k^2 \geq M^2 > 0 \quad \forall x > x_0$ , es decir, el caso en que para  $x \rightarrow \infty$  la energía cinética es menor que la energía potencial, región clásicamente prohibida, ver figura 3.7. Escribimos nuevamente la ecuación de Schrödinger en la forma (3.73):

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} - (U(x) - k^2) \right] \psi(x) = 0 .$$

Consideremos las soluciones particulares de esta ecuación que satisfacen las condiciones de borde

$$\phi_1(x_0) = 1 , \quad \phi_1'(x_0) = 0 , \quad \text{y} \quad \phi_2(x_0) = 0 , \quad \phi_2'(x_0) = 1 .$$

Note que tales soluciones existen. Por ser (3.73) una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden, las dos funciones  $\phi_1$  y  $\phi_2$  forman un conjunto completo de soluciones. Toda solución de la ecuación (3.73) puede escribirse como combinación lineal de tales funciones.

Las soluciones  $\phi_1(x)$  y  $\phi_2(x)$  tienen las siguientes propiedades:

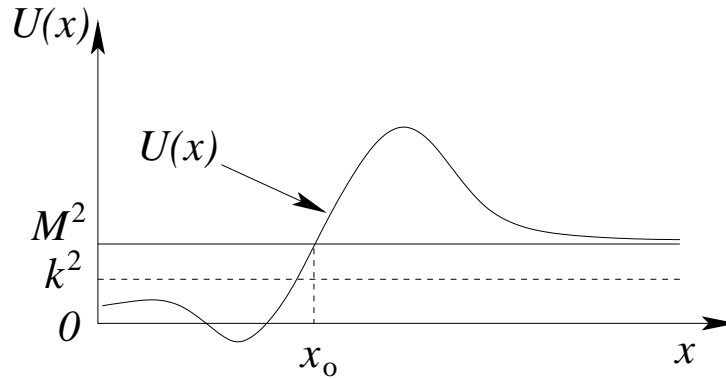


Figura 3.7: Representación esquemática de la energía potencial y cinética para el caso en que  $U(x) - k^2 \geq M^2 > 0 \quad \forall x > x_0$ .

- i)  $\forall x > x_0$ ,  $\phi_1(x) > 0$  y  $\phi_2(x) > 0$ , pues, de acuerdo a la ecuación diferencial (3.73), las segundas derivadas de la solución tienen el mismo signo que la función (ver también figura 3.8).

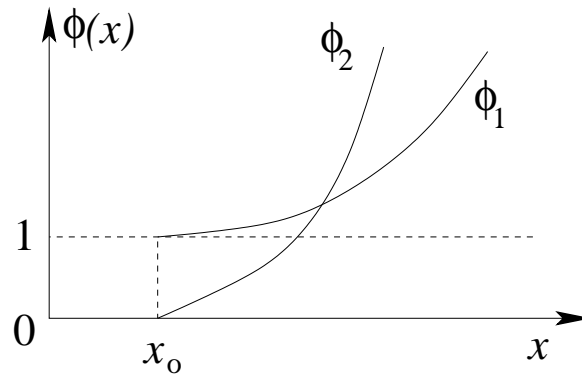


Figura 3.8: Comportamiento de las funciones  $\phi_1(x)$  y  $\phi_2(x)$  para  $x > x_0$ .

- ii) Las funciones  $\phi_1(x)$  y  $\phi_2(x)$  crecen al menos exponencialmente para  $x \rightarrow \infty$ .

**Demostración** Las funciones  $\phi_1(x)$  y  $\phi_2(x)$  cumplen con

$$\phi_1'' \geq M^2 \phi_1 \quad \forall x > x_0 \quad \text{y} \quad \phi_2'' \geq M^2 \phi_2 \quad \forall x > x_0 .$$

Consideremos ahora las soluciones particulares de la ecuación  $u'' = M^2 u$ , dadas por

$$u_1(x) = \cosh [M(x - x_0)] \quad \text{y} \quad u_2(x) = \frac{1}{M} \sinh [M(x - x_0)] .$$

Las condiciones de borde que satisfacen son

$$u_1(x_0) = 1, \quad u_1'(x_0) = 0 \quad \text{y} \quad u_2(x_0) = 0, \quad u_2'(x_0) = 1 .$$

Como  $u_1$ ,  $u_2$  y  $\phi_1$ ,  $\phi_2$  satisfacen las mismas condiciones de borde en  $x = x_0$  y las segundas derivadas de  $\phi_1$ ,  $\phi_2$  son mayores que las de  $u_1$ ,  $u_2$  para  $x > x_0$ , se tiene

$$\begin{aligned}\phi_1(x) &\geq u_1(x) = \cosh [M(x - x_0)] \quad \forall x > x_0, \\ \phi_2(x) &\geq u_2(x) = \frac{1}{M} \sinh [M(x - x_0)] \quad \forall x > x_0,\end{aligned}$$

o sea, para  $x > x_0$ ,  $\phi_1$  y  $\phi_2$  crecen al menos como  $\frac{1}{2} \exp(Mx)$ .

iii) El Wronskiano  $W(\phi_1, \phi_2)(x) = 1$ .

**Demostración**  $\phi_1$  y  $\phi_2$  son soluciones de la misma ecuación de Schrödinger, luego, de acuerdo a un teorema anterior, el Wronskiano  $W(\phi_1, \phi_2)$  es constante. Basta evaluarlo en un punto. Evaluémoslo en  $x = x_0$ . Se obtiene

$$W(\phi_1, \phi_2)(x_0) = \phi_1(x_0)\phi_2'(x_0) - \phi_2(x_0)\phi_1'(x_0) = 1.$$

La solución general de (3.73) se puede, excepto por un factor multiplicativo, escribir de la forma

$$\Psi(x) = \phi_1(x) + \alpha\phi_2(x) \quad \alpha \in \mathbb{C}.$$

Consideremos las funciones  $f(x)$  y  $g(x)$  definidas por

$$f(x) \equiv \frac{\phi_1(x)}{\phi_2(x)} \quad \text{y} \quad g(x) \equiv \frac{\phi_1'(x)}{\phi_2'(x)}.$$

Derivando estas funciones se obtiene

$$f'(x) = \frac{\phi_1'\phi_2 - \phi_2'\phi_1}{(\phi_2)^2} = -\frac{W(\phi_1, \phi_2)(x)}{(\phi_2(x))^2} = -\frac{1}{(\phi_2(x))^2} < 0 \quad \forall x,$$

y

$$\begin{aligned}g'(x) &= \frac{\phi_1''\phi_2' - \phi_2''\phi_1'}{(\phi_2')^2} \\ &= \frac{[U(x) - k^2]\phi_1(x)\phi_2'(x) - [U(x) - k^2]\phi_2(x)\phi_1'(x)}{(\phi_2'(x))^2} \\ &= \frac{[U(x) - k^2] W(\phi_1, \phi_2)(x)}{(\phi_2'(x))^2} \\ &= \frac{[U(x) - k^2]}{(\phi_2'(x))^2} \geq \frac{M^2}{(\phi_2'(x))^2} > 0 \quad \forall x > x_0,\end{aligned}$$

por lo tanto,  $f(x)$  es una función decreciente para todo  $x$  y  $g(x)$  es una función creciente para  $x > x_0$ . Para la diferencia  $f(x) - g(x)$  se tiene que

$$\begin{aligned}f(x) - g(x) &= \frac{\phi_1(x)}{\phi_2(x)} - \frac{\phi_1'(x)}{\phi_2'(x)} = \frac{\phi_1\phi_2'(x) - \phi_1'(x)\phi_2(x)}{\phi_2(x)\phi_2'(x)} \\ &= \frac{W(\phi_1, \phi_2)(x)}{\phi_2(x)\phi_2'(x)} = \frac{1}{\phi_2\phi_2'} \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0.\end{aligned}$$

Breves momentos de reflexión muestran que la única posibilidad para que  $g(x)$  sea creciente,  $f(x)$  sea decreciente y la diferencia  $f(x) - g(x)$  tienda a cero, es que ambas funciones,  $f(x)$  y  $g(x)$ , tiendan a una constante  $\Gamma$  (ver figura 3.9).

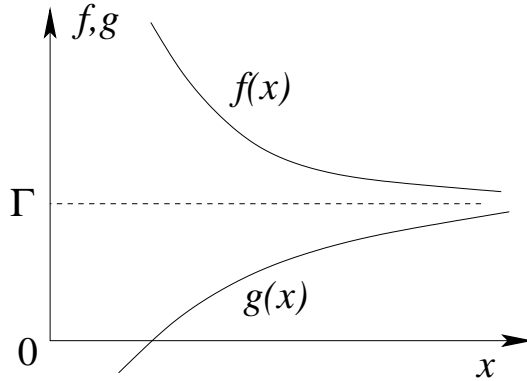


Figura 3.9: Comportamiento de las funciones  $f(x)$  y  $g(x)$  para  $x \rightarrow \infty$ .

Resumiendo:  $\exists \Gamma \in \mathbb{C}$  tal que  $\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} g(x) = \Gamma$ .

Es claro que  $g(x) < \Gamma < f(x)$ . Restando  $\Gamma$ , se obtiene

$$g(x) - \Gamma < 0 < f(x) - \Gamma . \tag{3.74}$$

Pero

$$f(x) - \Gamma = f(x) - g(x) + (g(x) - \Gamma) < f(x) - g(x) = \frac{1}{\phi_2 \phi_2'} ,$$

y

$$g(x) - \Gamma = g(x) - f(x) + (f(x) - \Gamma) > g(x) - f(x) = -\frac{1}{\phi_2 \phi_2'} .$$

Reemplazando estas desigualdades en (3.74) se deduce que

$$-\frac{1}{\phi_2 \phi_2'} < g(x) - \Gamma < 0 < f(x) - \Gamma < \frac{1}{\phi_2 \phi_2'} . \tag{3.75}$$

Consideremos ahora la solución particular de (3.73) dada por

$$\Phi(x) \equiv \phi_1(x) - \Gamma \phi_2(x) = (f(x) - \Gamma) \phi_2(x) .$$

Entonces

$$\Phi'(x) = \phi_1'(x) - \Gamma \phi_2'(x) = (g(x) - \Gamma) \phi_2'(x) .$$

Usando (3.75) se obtiene

$$-\frac{1}{\phi_2(x)} < \Phi'(x) < 0 < \Phi(x) < \frac{1}{\phi_2'(x)} .$$

Pero  $\phi_2(x)$  y  $\phi_2'(x)$  tienden, para  $x \rightarrow \infty$ , a  $\infty$  en forma exponencial, luego  $\Phi(x)$  es positivo y tiende a cero exponencialmente. Cualquier otra solución de (3.73) diverge. En efecto, consideremos la solución

$$\bar{\Phi}(x) = \phi_1(x) - C\phi_2(x) ,$$

con  $C \neq \Gamma$ , entonces  $\bar{\Phi}(x)$  puede escribirse de la forma

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}(x) &= \phi_1(x) - \Gamma\phi_2(x) + (\Gamma - C)\phi_2(x) \\ &= \Phi(x) + (\Gamma - C)\phi_2(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} (\Gamma - C)\phi_2(x) . \end{aligned}$$

Como  $\phi_2(x)$  diverge, también  $\bar{\Phi}(x)$  diverge.

### Resumen:

- Si  $U(x) - k^2 \geq M^2 > 0 \quad \forall x > x_0$ , entonces existe una solución particular de la ecuación de Schrödinger (3.73) que decrece a cero a lo menos con la rapidez  $e^{-Mx}$ . Todas las demás soluciones divergen al menos como  $e^{Mx}$ .
  - Adicionalmente, si la solución  $\Psi(x)$  es positiva, su curvatura es positiva, y si es negativa su curvatura es negativa. Esto asegura que nunca  $\Psi(x)$  oscila para  $x \rightarrow \infty$ , pudiendo a lo más cortar una vez el eje.
- b) Caso en que  $U(x) - k^2 < M^2 \quad \forall x > x_0$ , es decir, el caso en que, para  $x \rightarrow \infty$ , la energía cinética es mayor que la energía potencial. En este caso la curvatura posee signo distinto a la función, lo que necesariamente lleva a oscilaciones.

Si la energía potencial  $U$  tiende, para  $x \rightarrow \infty$ , a una constante  $U_0$  lo suficientemente rápido (más rápido que  $1/x + U_0$ ), entonces la ecuación de Schrödinger (3.73), para  $x \rightarrow \infty$ , queda como

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + (k^2 - U_0) \right] \Psi(x) = 0 .$$

La solución general de esta ecuación viene dada por

$$\Psi(x) = A_o \text{sen}(\sqrt{k^2 - U_0}x + \phi_o) ,$$

donde  $A_o$  y  $\phi_o$  son constantes.

No consideraremos otros casos por el momento. Es importante hacer notar que los casos a) y b) no cubren todas las situaciones que se pueden dar. En particular, deja fuera el importante caso en que el potencial  $V(x)$  es periódico, situación que se da con frecuencia en el estudio de la materia condensada.

Hagamos algunas observaciones sobre el espectro de valores propios que presentan problemas unidimensionales que cumplen con las situaciones planteadas en a) y b).

Supongamos, para fijar ideas, que el potencial  $U(x)$  para  $x \rightarrow +\infty$  tiende a una constante  $U^+$  y para  $x \rightarrow -\infty$  tiende a  $U^-$ . Supongamos además que  $U^+ > U^-$  y que  $U(x)$  tiene un mínimo  $U_o$ , con  $U_o < U^-$  (ver figura 3.10).

Podemos dividir el problema en tres regiones:



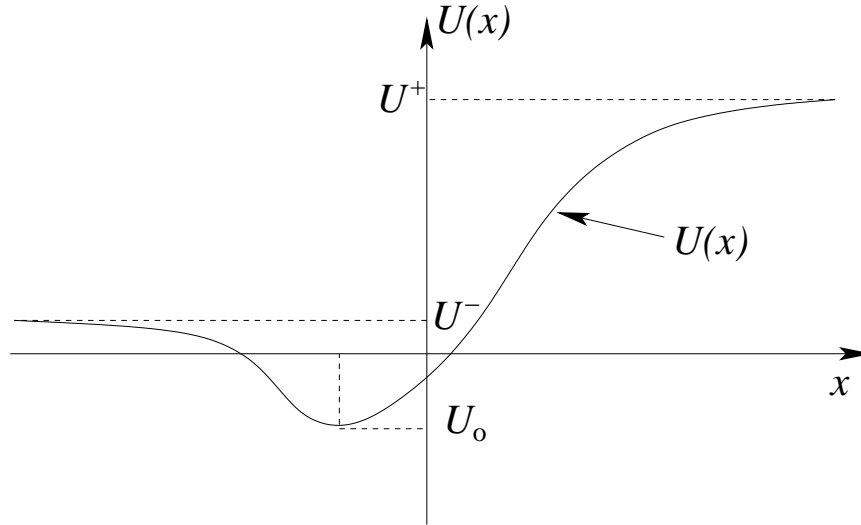


Figura 3.10: Comportamiento esquemático de la energía potencial del ejemplo discutido en el texto para establecer las características del espectro de energía.

a)  $k^2 > U^+$ .

Si la partícula es libre, tanto para  $x \rightarrow +\infty$  como para  $x \rightarrow -\infty$ , entonces el espectro de  $\check{H}$  es continuo y degenerado de orden 2. En efecto, en este caso, cualquier solución de (3.73) en las regiones asintóticas oscila entre dos límites finitos. Tal función de onda se puede normalizar a la función  $\delta$  de Dirac. Como (3.73) tiene dos soluciones linealmente independientes, el espectro resulta ser doblemente degenerado.

b)  $U^- < k^2 < U^+$ .

Si  $U^- < k^2 < U^+$ , entonces el espectro de  $\check{H}$  es continuo pero no degenerado. En efecto, para  $x \rightarrow +\infty$  la única solución aceptable es la que decrece exponencialmente (ésta existe, como se demostró al comienzo de esta sección). Tal solución oscila para  $x \rightarrow -\infty$ , decrece al menos exponencialmente para  $x \rightarrow +\infty$  y es normalizable a la función  $\delta$ . Todas las otras soluciones crecen al menos exponencialmente para  $x \rightarrow +\infty$ , por lo tanto no son aceptables, hay que descartarlas como soluciones físicas. El requerimiento de que la función de onda decrezca exponencialmente para  $x \rightarrow +\infty$  impone una condición que, por lo tanto, sólo una solución para cada energía.

c)  $U_o < k^2 < U^-$ .

En este caso el espectro es discreto y **no** degenerado. En efecto, la solución debe decrecer al menos exponencialmente para  $x \rightarrow \infty$  y también para  $x \rightarrow -\infty$ . Esto impone dos condiciones sobre la solución, situación que sólo se satisface en casos muy excepcionales (lo que da origen a los niveles de energía discretos). El número de niveles discretos en un potencial puede variar entre 0 e  $\infty$ .

### 3.20.1 Continuidad de la función de onda.

En una región del espacio en que el potencial es finito, la función de onda, como también su derivada (gradiente), es siempre continua. En efecto, supongamos que el gradiente de la función de onda  $\vec{\nabla}\phi(x)$  no es continuo en algún lugar. Entonces, al evaluar el Laplaciano  $\nabla^2\phi$ , se obtendrán discontinuidades de tipo  $\delta$  de Dirac, lo que estaría en contradicción con la ecuación de Schrödinger

$$\frac{d^2}{dx^2}\phi(x) = (k^2 - U(x))\phi(x) .$$

Si la energía potencial tiene saltos de tamaño infinito (por ejemplo, el potencial consta de  $\delta$ 's de Dirac o estamos en lugares donde el potencial representa a una pared impenetrable), entonces la derivada de la función de onda en esos lugares sí tendrá discontinuidades. La función de onda ahí seguirá siendo continua, pero es no derivable.

### 3.21 Problemas

3-1) Definamos el operador *Momento Angular* por  $\check{\mathbf{L}} \equiv \check{\mathbf{r}} \times \check{\mathbf{p}} = (\check{\mathbf{L}}_1, \check{\mathbf{L}}_2, \check{\mathbf{L}}_3)$ , para este operador se cumple que:

$$[\check{\mathbf{L}}_i, \check{\mathbf{L}}_j] = i\epsilon_{ijk} \hbar \check{\mathbf{L}}_k .$$

3-2) Demuestre que si  $\mathcal{B}(x, p)$  es un observable clásico con el desarrollo

$$\mathcal{B}(x, p) = \sum_{k, \ell} B_{k\ell} x^k p^\ell .$$

El operador  $\check{\mathbf{B}} = \mathcal{B}(\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}})$  cumple

$$[\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] \check{\mathbf{p}} = \check{\mathbf{p}} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) .$$

3-3) Demuestre que la integral:

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \Psi(\vec{k}) e^{-i\omega(\vec{k})t} \\ &= \frac{C'}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \hbar k^2 t / (2m))} e^{-\sigma_o^2 k^2} . \end{aligned}$$

tiene como resultado

$$\Psi(\vec{r}, t) = C \left( \frac{m}{2\pi \hbar i t} \right)^{3/2} \gamma^{-3} \exp \left( \frac{i\beta r^2}{4\sigma_o^2 \gamma} \right) ,$$

donde  $\beta$  y  $\gamma$  vienen definidas por

$$\beta \equiv \frac{m}{2\hbar t} ,$$

y

$$\gamma = \frac{1}{4\sigma_o^2} - i\beta ,$$

encuentre la relación entre  $C$  y  $C'$ .

3-4) Demuestre que en la ecuación (3.45) el ancho  $\sigma(t)$  viene dado por:

$$\sigma^2(t) = \sigma_o^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma_o^2} .$$

3-5) Encuentre los tiempos de dispersión para un átomo localizado dentro de una región del tamaño de 1 [Å].

3-6) Un virus, ¿se comportará ya definitivamente como un objeto clásico?

- 3-7) Demuestre que si un operador en el cuadro de Schrödinger depende explícitamente del tiempo, entonces la ecuación dinámica para el operador correspondiente en el cuadro de Heisenberg es:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \check{\mathbf{F}}_H(t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \check{\mathbf{F}}_H(t) + [\check{\mathbf{F}}_H, \check{\mathbf{H}}] .$$

- 3-8) Considere el Hamiltoniano  $\check{\mathbf{H}} = \check{\mathbf{p}}^2/(2m) + V(\check{\mathbf{r}})$ , con su conjunto de vectores propios  $|k\rangle$  y valores propios  $E_k$  (espectro completamente discreto). Muestre que si  $|l\rangle$  es cualquier ket propio, asociado a un valor propio  $E_l$ , se cumple:

$$\sum_k (E_k - E_l) |\langle k | \check{\mathbf{X}} | l \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2m} ,$$

donde  $\check{\mathbf{X}}$  es una componente cartesiana de  $\check{\mathbf{r}}$ .

- 3-9) Una partícula está confinada al interior de una caja que está dividida en una parte izquierda y otra derecha por una membrana. Se cuenta con un detector que especifica totalmente el estado actual de la partícula, diciendo si se encuentra a la derecha o a la izquierda del recipiente. (A estos dos estados se les puede llamar  $|D\rangle$  y  $|I\rangle$ , respectivamente, y se les puede considerar base ortonormal.) El Hamiltoniano es

$$\check{\mathbf{H}} = E(|I\rangle\langle D| + |D\rangle\langle I|) .$$

- (a) Encuentre los autovalores y autovectores del sistema.
- (b) Muestre que hay efecto túnel, es decir, que si en  $t = 0$  la partícula está a la izquierda, hay una probabilidad no nula de observarla a la derecha para  $t > 0$ . ¿Cuál es la probabilidad de observarla a la derecha como función del tiempo?
- (c) Suponga que erróneamente se usa  $\check{\mathbf{H}} = E(|D\rangle\langle I|)$ . Muestre que en tal caso no se conserva la probabilidad.
- 3-10) Sea  $\check{\mathbf{A}}_\theta$  el operador asociado a la medición de cierta variable dinámica de un sistema dado en la dirección  $\theta$ . En cierta base, este operador está representado por la matriz

$$A_\theta = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & -i \operatorname{sen} \theta \\ i \operatorname{sen} \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} .$$

- (a) ¿Puede  $\check{\mathbf{A}}_\theta$  asociarse realmente a un observable físico?
- (b) Calcular los autovectores, ortonormalizarlos y verificar la completitud de la base obtenida.
- (c) ¿Cuáles son los valores posibles que se obtienen al medir este observable?
- (d) Se mide  $\check{\mathbf{A}}_z$  ( $\check{\mathbf{A}}_{\theta=0}$ ) y se obtiene como resultado  $a_1$  ( $\geq a_2$ ). Se vuelve a medir  $\check{\mathbf{A}}_z$ . ¿Cuál es la probabilidad de obtener  $a_2$ ?
- (e) Se mide  $\check{\mathbf{A}}_z$  y se obtiene  $a_1$ . Luego se mide  $\check{\mathbf{A}}_\theta$  ( $\theta$  arbitrario). ¿Qué se obtiene? ¿Hay algún  $\theta$  para el cual se obtenga  $a_2$  con certeza?

(f) Se mide  $\check{\mathbf{A}}_z$  y se obtiene  $a_2$ . Luego se mide  $\check{\mathbf{A}}_{\pi/2}$  y se obtiene  $a_1$ . ¿Qué probabilidad hay de obtener  $a_2$  al medir  $\check{\mathbf{A}}_z$ ?

3-11) Normalice los siguientes paquetes de onda y calcule  $\langle(\Delta x)^2\rangle$  y  $\langle(\Delta p)^2\rangle$ :

(a)  $\psi(x) = e^{-|x|/L}$ .

(b)  $\psi(x) = H_n(x/L)e^{-x^2/(2L^2)}$ ,  
donde  $H_n$  es el polinomio de Hermite de orden  $n$ .

3-12) Muestre que  $\langle\Delta x\rangle$  es igual al valor de  $\alpha$  que minimiza la expresión

$$V(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x + \alpha)x^2\psi(x + \alpha) dx ,$$

y que este mínimo es

$$V_{\min} = \langle(\Delta x)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 .$$

3-13) Considere una partícula cuya función de onda asociada,  $\psi(x, t)$  en  $t = 0$  es

$$\psi(x, 0) = (2\pi\Delta x_0^2)^{-1/4}e^{-x^2/(4\Delta x_0^2)} .$$

Investigue la evolución temporal (promedios, desviaciones cuadráticas) de este paquete si, para  $t > 0$ , la partícula se mueve bajo la acción de una fuerza constante. Interprete en términos de los resultados clásicos. Compare con los resultados obtenidos para una partícula libre.

3-14) Considere el Hamiltoniano  $\check{H} = \check{H}_0 + \check{H}_1$  y su correspondiente operador de evolución asociado  $\check{U}(t, t_0)$ . Sea  $\check{U}_0$  el operador de evolución asociado al término  $\check{H}_0$  del Hamiltoniano. Se define el cuadro de interacción, intermedio o de Dirac, a través de los kets:

$$|\psi_I(t)\rangle = \check{U}_0^\dagger(t, t_0)|\psi_S(t)\rangle .$$

(a) Demuestre que ellos satisfacen la ecuación

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi_I(t)\rangle = \check{H}_I|\psi_I(t)\rangle , \quad \text{donde } \check{H}_I = \check{U}_0^\dagger\check{H}_1\check{U}_0 .$$

(b) Encuentre el operador de evolución de este cuadro,  $\check{U}_I(t, t_0)$  y demuestre que satisface la ecuación

$$i\hbar\frac{d}{dt}\check{U}_I(t, t_0) = \check{H}_I\check{U}_I .$$

(c) Demuestre que en este cuadro los operadores satisfacen la ecuación de evolución

$$i\hbar\frac{d}{dt}\check{\Omega}_I = \left[\check{H}_0^{(I)}, \check{\Omega}_I\right] + \left(\frac{\partial}{\partial t}\check{\Omega}_S\right)_I , \quad \text{donde } \check{H}_0^{(I)} = \check{U}_0^\dagger\check{H}_0\check{U}_0 .$$

(d) Demuestre que  $\check{U}_I$  satisface la ecuación integral

$$\check{U}_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \check{H}_I(t') \check{U}_I(t', t_0) dt' .$$

- 3-15) (a) Para sistemas conservativos, muestre que si en  $t = 0$  el vector de estado  $|\psi(t)\rangle$  es un autovector del observable  $\check{A}$  asociado al autovalor  $a$ , entonces, para  $t > 0$ ,  $|\psi(t)\rangle$  será un autovector del operador  $\check{A}_H(-t)$  asociado al mismo autovalor  $a$ .
- (b) Evalúe los conmutadores

$$[\check{p}_H(t_1), \check{x}_H(t_2)] , \quad [\check{p}_H(t_1), \check{p}_H(t_2)] , \quad [\check{x}_H(t_1), \check{x}_H(t_2)] .$$



# Capítulo 4

## Solución de algunos problemas unidimensionales.

### 4.1 El pozo infinito.

Consideremos una partícula de masa  $m$  en un pozo de potencial (ver figura 4.1).

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x \leq 0 \\ 0 & 0 < x < L \\ \infty & L \leq x \end{cases}$$

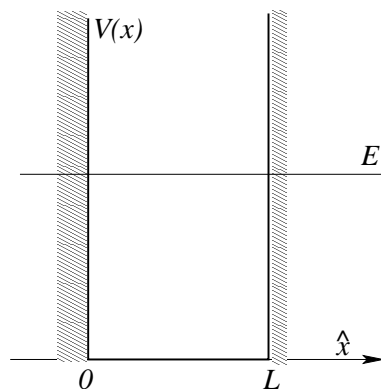


Figura 4.1: Pozo infinito.

#### 4.1.1 Autofunciones y energías.

La función de onda será no nula sólo en el intervalo  $]0, L[$ . Si  $x < 0$  o bien si  $x > L$  la función de onda es idénticamente nula debido al carácter altamente prohibido de tales regiones. Al imponer continuidad a la función de onda se concluye que  $\psi(0) = \psi(L) = 0$ . En el intervalo  $]0, L[$ , la ecuación de Schrödinger coincide con la ecuación de una partícula libre. Las energías



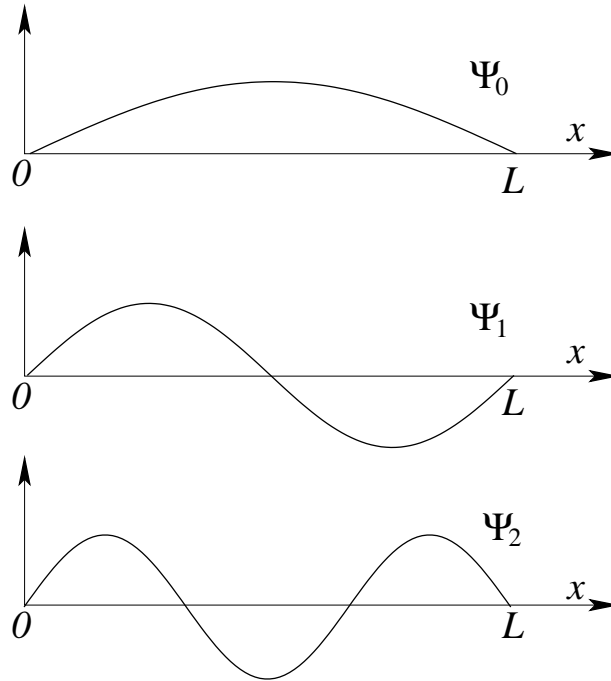


Figura 4.2: Funciones de onda de los tres primeros estados de un pozo infinito.

y las funciones de onda normalizadas vienen dadas por

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n+1)^2 \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots ,$$

y

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen} \left( \frac{(n+1)\pi}{L} x \right) \quad x \in [0, L] ,$$

con

$$\int_0^L dx |\psi_n(x)|^2 = 1 .$$

El espectro es no degenerado y discreto. En la figura 4.2 se muestran las funciones de onda de los tres estados de menor energía.

Considere la función de onda designada con el rótulo, número cuántico,  $n$  y note que la paridad de tal función respecto al punto  $x = L/2$  es  $(-1)^n$  y que el número de nodos en el intervalo (abierto)  $]0, L[$  es  $n$ .

Este primer ejemplo ilustra bien cómo las condiciones de borde que debe satisfacer la función de onda, que en este caso son  $\psi(0) = \psi(L) = 0$ , implican la cuantización de la energía. También es interesante notar que el espaciado entre estos niveles de energía depende inversamente de la masa  $m$  y del cuadrado del ancho del pozo  $L$ . Así, si  $m \rightarrow \infty$  o  $L \rightarrow \infty$  el espectro se torna cuasi continuo, en concordancia con lo que corresponde a este límite hacia el nivel clásico, donde imperan grandes masas y distancias.

También cabe destacar que la mínima energía no es cero, en contradicción con la mecánica clásica, sino que  $E_0 = \hbar^2 \pi^2 / (2mL^2) > 0$ . Esto corresponde a la “energía del punto cero”, la que se puede entender en base al principio de incerteza. En efecto, en este caso la incerteza  $\Delta x$  en posición es  $\Delta x \leq L/2$ , lo que implica que  $\Delta p \geq \hbar / (2\Delta x) = \hbar / L$ . Como  $\langle \mathbf{p} \rangle = 0$ , sigue que

$$\frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{2mL^2} .$$

Pero  $\langle p^2 \rangle / (2m) = E_{\text{cin}} = E$ , ya que  $V(x) = 0$  en la región física. Luego este argumento muestra que  $E_0$  posee cierta cota inferior,  $\hbar^2 / (2mL^2)$ . En el presente caso hay un factor  $\pi^2$  de por medio.

### 4.1.2 Regla de cuantificación de Bohr-Sommerfeld.

La regla de cuantificación de Bohr-Sommerfeld requiere que

$$\oint p \, dx = (n + 1) h , \quad \text{con } n \in \mathbb{N}_0 .$$

Esta regla, de importancia histórica, da buenos resultados para algunos sistemas simples; no obstante, falla en sistemas más complejos. En el presente caso se tiene que

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad \text{y} \quad p = \pm \sqrt{2mE} ,$$

luego,

$$\oint p \, dx = 2 \int_0^L \sqrt{2mE} \, dx = 2L\sqrt{2mE} = (n + 1) h .$$

A partir de esta última ecuación se deduce que

$$E_n = \frac{(n + 1)^2 (2\pi\hbar)^2}{8L^2 m} = \frac{\pi^2 \hbar^2 (n + 1)^2}{2mL^2} \quad n = 0, 1, 2, \dots ,$$

expresión que coincide con el resultado exacto.

### 4.1.3 Ensanchamiento repentino.

Supongamos que el sistema se encuentra en el estado fundamental y que en cierto instante  $t_0$  el pozo de potencial se ensancha bruscamente de  $L$  a  $2L$ . ¿Cuál es la probabilidad de encontrar el sistema, para  $t > t_0$ , en el estado  $n$ ?

Que inicialmente el sistema se encuentre en el estado fundamental significa que la función de onda que describe la situación física es

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen} \left( \frac{\pi x}{L} \right) .$$

Después de la expansión brusca las autofunciones y autoenergías del sistema son

$$\bar{\Psi}_n = \sqrt{\frac{1}{L}} \operatorname{sen} \left( \frac{(n+1)\pi x}{2L} \right) \quad n = 0, 1, 2, \dots ,$$

y

$$\bar{E}_n = \frac{\hbar^2(n+1)^2\pi^2}{2m(2L)^2} = E_0 \left( \frac{n+1}{2} \right)^2 .$$

Al realizar una medición de energía, de acuerdo al postulado 3, la función de estado “colapsará” a uno de los estados  $\bar{\Psi}_n$ , siendo la probabilidad de encontrar el sistema en el estado  $n$ , después de la expansión repentina,

$$\begin{aligned} P_n &= |\langle \bar{\Psi}_n | \psi_0 \rangle|^2 \\ &= \left| \frac{\sqrt{2}}{L} \int_0^L \operatorname{sen} \left( \frac{(n+1)\pi x}{2L} \right) \operatorname{sen} \left( \frac{\pi x}{L} \right) dx \right|^2 \\ &= \begin{cases} 0 & \text{si } n \text{ impar } \neq 1 \\ 1/2 & \text{si } n = 1 \\ 2\pi^{-2} \left( \left( \frac{n+1}{2} \right)^2 - 1 \right)^{-2} & \text{si } n \text{ par} \end{cases} \end{aligned}$$

Por supuesto que se debe tener que

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n = 1 ,$$

o sea,

$$\frac{1}{2} + \frac{2}{\pi^2} \sum_{\substack{n>0 \\ n \text{ par}}} \frac{1}{\left( \frac{(n+1)^2}{4} - 1 \right)^2} = 1 .$$

Esta última relación es verdadera, ya que, efectivamente,

$$\sum_{\substack{n>0 \\ n \text{ impar}}} \frac{1}{(n^2 - 4)^2} = \frac{\pi^2}{64} .$$

Ejercicio: (Problema 4-1) Verifique esta última expresión numéricamente.

Debido a que la partícula no realiza ningún trabajo (estamos esencialmente en presencia de una expansión libre), el valor esperado de la energía de la partícula debe mantenerse constante. Antes de la expansión, el sistema se encuentra en un autoestado de energía  $E_0$ , teniéndose, por consiguiente, para el valor esperado:

$$\langle \check{\mathbf{H}} \rangle = E_0 .$$

Después de la expansión el valor esperado de la energía es la suma de los autovalores  $\bar{E}_n$  multiplicada por la probabilidad de obtener tal autovalor en una medición de energía, o sea,

$$\langle \check{\mathbf{H}} \rangle = \sum_n P_n \bar{E}_n .$$

La igualdad del valor esperado de la energía antes y después de la expansión implica que

$$E_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{E}_n P_n .$$

Usando las expresiones que tenemos para las probabilidades  $P_n$  y energías  $\bar{E}_n$ , la última ecuación queda

$$1 = \sum_n P_n \frac{(n+1)^2}{4} = \frac{1}{2} + \frac{2}{\pi^2} \sum_{\substack{n>0 \\ n \text{ par}}} \frac{4(n+1)^2}{((n+1)^2 - 4)^2} .$$

Esta última relación es verdadera ya que, efectivamente,

$$\sum_{\substack{n>0 \\ n \text{ impar}}} \frac{n^2}{(n^2 - 4)^2} = \frac{\pi^2}{4} .$$

Para una expansión brusca, también la podríamos llamar *expansión libre*, la energía interna se conserva. Antes de la expansión el sistema se encontraba en un estado bien definido; después de la expansión el estado del sistema viene dado por una mezcla de autoestados y sólo podemos establecer probabilidades de encontrar el sistema en uno u otro de los autoestados al realizar una medición de energía. En cierto modo, esta pérdida de información puede vincularse a un aumento de la entropía del sistema.

$n$	$P_n$	%	$\bar{E}_n/E_0$	$P_n \bar{E}_n/E_0$
0	$32/(9\pi^2) = 0.36035$	( $\sim 36\%$ )	1/4	0.09006
1	$1/2 = 0.5$	(50%)	1	0.50000
2	$32/(25\pi^2) = 0.12969$	( $\sim 13\%$ )	9/4	0.29180
3	$0 = 0.0$	(0%)	4	0.0
4	$32/(21\pi^2) = 0.00735$	(1% <)	25/4	0.04594
5	$0 = 0.0$	(0%)	9	0.0
0 $\rightarrow$ 5	0.99729	( $\sim 99.7\%$ )		0.92780 ( $\sim 93\%$ )

Tabla 4.1: La tabla muestra el resultado de  $P_n$ , la suma  $\sum P_n$ , la energía  $\bar{E}_n$  y la suma  $\sum \bar{E}_n P_n$  para los primeros 6 estados.

#### 4.1.4 Ensanchamiento adiabático.

Supongamos ahora que el sistema se encuentra inicialmente en el estado fundamental y que procedemos a ensanchar el pozo de  $L$  a  $2L$  adiabáticamente. Esto lo realizamos moviendo la pared derecha del pozo  $N$ -veces bruscamente en  $L/N$  y pasando luego al límite  $N \rightarrow \infty$ . ¿En qué estado se encontrará el sistema después del ensanchamiento?

Ensanchemos el pozo lentamente, en  $N$  pasos, desde  $L$  a  $\bar{L} \equiv L + \Delta L = L + L/N = L(1 + \frac{1}{N}) \equiv L(1 + \epsilon)$  con  $\epsilon \ll 1$ . Después de un ensanchamiento infinitesimal las autofunciones y energías son

$$\bar{E}_n = \frac{\hbar^2(n+1)^2\pi^2}{2m\bar{L}^2}, \quad \text{y} \quad \bar{\Psi}_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\bar{L}}} \operatorname{sen} \left( \frac{\pi(n+1)x}{\bar{L}} \right).$$

Calculemos la probabilidad de que el sistema siga en el estado fundamental después del ensanchamiento. Tal probabilidad viene dada por

$$\begin{aligned} P &= |\langle \bar{\Psi}_0 | \psi_0 \rangle|^2 \\ &= \left| \int_0^L \psi_0(x) \bar{\Psi}_0(x) dx \right|^2 \\ &= \frac{4}{L\bar{L}} \left| \int_0^L \operatorname{sen} \left( \frac{\pi x}{L} \right) \operatorname{sen} \left( \frac{\pi x}{\bar{L}} \right) dx \right|^2. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Note que

$$\begin{aligned} \operatorname{sen} \left( \frac{\pi x}{\bar{L}} \right) &= \operatorname{sen} \left( \frac{\pi x}{\bar{L} - L + L} \right) \approx \operatorname{sen} \left( \frac{\pi x}{L} \left( 1 - \frac{\Delta L}{L} \right) \right) \\ &= \operatorname{sen} \left( \frac{\pi x}{L} (1 - \epsilon) \right) \\ &= \operatorname{sen} \left( \frac{\pi x}{L} \right) + \frac{\pi x}{L} \epsilon \cos \left( \frac{\pi x}{L} \right) + \mathcal{O}(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (4.2)$$

Luego, reemplazando (4.2) en (4.1), se obtiene que

$$\begin{aligned} P &= \frac{4}{L\bar{L}} \left\{ \int_0^L dx \operatorname{sen}^2 \left( \frac{\pi x}{L} \right) + \frac{\pi \epsilon}{L} \int_0^L dx x \operatorname{sen} \left( \frac{x\pi}{L} \right) \cos \left( \frac{\pi x}{L} \right) \right\}^2 \\ &\approx \frac{4}{L\bar{L}} \left\{ \frac{L}{2} + \frac{\pi \epsilon}{2L} \int_0^L dx x \operatorname{sen} \left( \frac{2\pi x}{L} \right) \right\}^2 \\ &= \left\{ \sqrt{\frac{L}{\bar{L}}} + \frac{\pi \epsilon}{L\sqrt{L\bar{L}}} \left( \frac{L^2}{4\pi^2} \operatorname{sen} \left( \frac{2\pi x}{L} \right) - \frac{xL}{L} \cos \left( \frac{2\pi x}{L} \right) \right) \Big|_0^L \right\}^2 \\ &\approx \left\{ \sqrt{\frac{L}{\bar{L}}} + \frac{\pi \epsilon}{L\sqrt{L\bar{L}}} \cdot \frac{L^2}{2\pi} \right\}^2 \\ &\approx \left( \sqrt{\frac{L}{\bar{L}}} \left( 1 + \frac{\epsilon}{2} \right) \right)^2. \end{aligned}$$

Pero

$$\frac{L}{\bar{L}} = \frac{L}{\bar{L} - L + L} = \frac{1}{1 + \frac{\Delta L}{L}} = \frac{1}{1 + \epsilon} \approx 1 - \epsilon + \mathcal{O}(\epsilon^2),$$

luego,

$$P = \left( \sqrt{1 - \epsilon} \left( 1 + \frac{\epsilon}{2} \right) \right)^2 \cong \left( \left( 1 - \frac{\epsilon}{2} \right) \left( 1 + \frac{\epsilon}{2} \right) \right)^2 = (1 + \mathcal{O}(\epsilon^2))^2.$$

A partir de este resultado se deduce que, al ensanchar el potencial  $N$ -veces, la probabilidad de que el sistema quede en el nivel fundamental es

$$P = \underbrace{(1 + \mathcal{O}(\epsilon^2))^2 \cdot (1 + \mathcal{O}(\epsilon^2))^2 \cdot \dots \cdot (1 + \mathcal{O}(\epsilon^2))^2}_{N \text{ veces}} \\ \approx 1 + N\mathcal{O}(\epsilon^2) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 1,$$

pues  $\epsilon = 1/N$ .

Concluimos que al ensanchar el pozo adiabáticamente no hay transiciones. El sistema seguirá en el estado en que se encuentra, y la función de onda se ajustará adiabáticamente a la nueva situación. Que el sistema siga en el mismo estado, en cierto modo significa que la entropía del sistema no cambia.

La energía del sistema, por otra parte, sí cambia. Inicialmente era  $E_0 = \hbar^2 \pi^2 / (2mL^2)$  mientras que al finalizar la expansión es  $\bar{E}_0 = \hbar^2 \pi^2 / (8mL^2)$ .

Esto es análogo a la expansión adiabática de un gas en un pistón; la energía interna del gas disminuye, pues el pistón realiza trabajo pero la entropía no varía. El proceso de expansión adiabática es un proceso reversible. También en este caso podemos comprimir nuevamente el pozo potencial adiabáticamente y recuperar el estado inicial  $\psi_0$ .

### 4.1.5 Presión y trabajo.

¿Qué “presión” ejerce la partícula sobre la pared del pozo? En el caso unidimensional considerado en el presente problema, el concepto de presión es equivalente al de fuerza promedio.

Supongamos que el sistema se encuentra en un estado, no necesariamente estacionario, dado por la superposición

$$|\Psi\rangle = \sum_n C_n |\psi_n\rangle,$$

con  $\sum_n |C_n|^2 = 1$ . El valor esperado de la energía es entonces

$$\langle E \rangle = E_i = \sum_n |C_n|^2 E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \sum_{n=0}^{\infty} |C_n|^2 (n+1)^2.$$

Hemos denotado al valor esperado de la energía que el sistema tiene inicialmente por la letra  $E_i$ . La presión, o fuerza promedio  $\bar{F}$  se calcula usando la expresión

$$\bar{F} = -\frac{\partial \langle E \rangle}{\partial L} = +\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \cdot \frac{2}{L^3} \sum_n |C_n|^2 (n+1)^2,$$

de donde,

$$\bar{F} = \frac{2\langle E \rangle}{L} .$$

Es interesante notar que clásicamente se puede obtener el mismo resultado con una argumentación completamente distinta. Sea  $\Delta p$  el cambio de momento que ocurre al chocar la partícula elásticamente contra la pared y sea  $\Delta t$  el tiempo entre 2 colisiones (contra la misma pared), entonces

$$\bar{F} = \frac{\Delta p}{\Delta t} = \frac{2p}{(2L/v)} = \frac{2}{L} \frac{pv}{2} = \frac{2}{L} \frac{p^2}{2m} = \frac{2E}{L} .$$

Calculemos ahora el trabajo realizado por el sistema al ensanchar adiabáticamente el pozo de  $L$  a  $2L$ . Este viene dado por

$$W = \int_L^{2L} \bar{F} \cdot dL \tag{4.3}$$

Escribamos la fuerza  $\bar{F}$  de la forma

$$\bar{F} = \left( \frac{\pi^2 \hbar^2}{m} \sum_{n=0}^{\infty} |C_n|^2 (n+1)^2 \right) \frac{1}{L^3} \equiv \frac{A}{L^3} = \frac{2E_i}{L} ,$$

donde  $A$  es una constante que no depende de  $L$  (note que  $E_i$  sí depende de  $L$ ). Sustituyendo esta expresión en (4.3), se obtiene

$$\begin{aligned} W &= A \int_L^{2L} \frac{dL'}{L'^3} = \frac{A}{2} \left( \frac{1}{L^2} - \frac{1}{4L^2} \right) \\ &= \frac{3A}{8L^2} = \frac{3}{4} E_i . \end{aligned}$$

Este resultado debe compararse con la energía perdida por el sistema, que viene dada por

$$\begin{aligned} E_i - E_f &= \sum_n |C_n|^2 E_n - \sum_n |C_n|^2 \bar{E}_n \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} |C_n|^2 (E_n - \bar{E}_n) \\ &= \sum_n |C_n|^2 \frac{\hbar^2 \pi^2 (n+1)^2}{2m} \left( \frac{1}{L^2} - \frac{1}{(2L)^2} \right) \\ &= \frac{3}{4} \sum_n |C_n|^2 \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} \\ &= \frac{3}{4} E_i . \end{aligned}$$

Ambas magnitudes coinciden.

## 4.2 Estados ligados en potenciales unidimensionales.

Más allá de las consideraciones hechas en la sección 3.20, queremos entregar información adicional sobre los estados ligados a un potencial  $V(x)$ . Consideraremos sólo casos para los cuales  $V(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0$ .

### 4.2.1 Análisis dimensional.

Siempre es posible encontrar una escala típica de distancia que caracteriza el intervalo de variación del potencial.

En el caso homogéneo,  $V(x) = W_0|x|^\alpha$ , se puede usar el teorema del virial para encontrar esta escala típica de distancia. Según dicho teorema, para estados estacionarios,

$$2\langle \check{\mathbf{T}} \rangle = \left\langle x \frac{\partial V(x)}{\partial x} \right\rangle .$$

Estimamos el lado izquierdo con el principio de incerteza

$$2T \sim 2 \frac{\hbar^2}{2m(\Delta x)^2} = \frac{\hbar^2}{ma^2} .$$

Para el lado derecho se tiene

$$\left\langle x \frac{\partial V(x)}{\partial x} \right\rangle \sim W_0 \left\langle x \frac{\partial |x|^\alpha}{\partial x} \right\rangle \sim \alpha W_0 \langle |x|^\alpha \rangle \sim \alpha W_0 a^\alpha .$$

Con estas estimaciones y el teorema del virial sigue

$$a^{\alpha+2} = \frac{\hbar^2}{\alpha m W_0} ,$$

y

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{\alpha m a^2} \left| \frac{x}{a} \right|^\alpha .$$

En general, podemos escribir  $V(x) = V_0 v(x/a)$ , donde  $v(\xi)$  es una función adimensional y  $V_0$  encierra una magnitud típica del potencial. Definimos los parámetros adimensional  $\xi$ ,  $\lambda$  y  $\nu_0$  a través de las relaciones

$$\xi = \frac{x}{a} ,$$

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\lambda}{a} \right)^2 < 0 ,$$

y

$$V_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\nu_0}{a} \right)^2 < 0 .$$



Note que  $\nu_0 = V_0/E_0$ , donde  $V_0$  es la magnitud típica del potencial y  $E_0$  está relacionada con la “energía del punto cero”. Con los parámetros adimensionales, la ecuación de Schrödinger queda

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \nu_0^2 v(\xi) \right] \Psi(\xi) = \lambda^2 \Psi(\xi) .$$

El espectro de autovalores de esta ecuación viene dado por una secuencia de constantes numéricas  $\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3 < \dots$ , las cuales sólo dependen del parámetro adimensional  $\nu_0$ . Conocidas estas constantes numéricas tenemos el espectro de energías

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \lambda_n^2 = -E_0 \lambda_n^2 .$$

Así, la secuencia de niveles  $E_n$  depende inversamente de la masa y del cuadrado del “ancho medio” de la función de onda. Esto último indica que, para comprimir un sistema, es necesario entregarle energía, ya que sus niveles de energía se incrementarán. En el caso de potenciales homogéneos, el ancho  $a$  depende de la masa  $m$ , teniéndose

$$E_n = -(\alpha W_0)^{\frac{2}{\alpha+2}} \left( \frac{\hbar^2}{m} \right)^{\frac{\alpha}{\alpha+2}} \lambda_n^2 .$$

Ilustremos las ideas anteriores con un ejemplo. Para una partícula de masa  $m$  y carga  $-e$  interactuando con un núcleo de carga  $Ze$  el potencial “Coulombiano” unidimensional es  $V(x) = -e^2 Z/x$ , donde  $e$  es la unidad elemental de carga y  $Z$  es la carga nuclear. En este caso  $\alpha = -1$  y  $W_0 = -e^2 Z$ . En lo que sigue usaremos el radio de Bohr y la constante de Rydberg

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0.53 \text{ [Å]} , \quad R_y = \frac{\hbar^2}{2m_e a_0^2} = 13.6 \text{ [eV]} ,$$

donde  $m_e$  es la masa del electrón. Nuestras estimaciones provenientes del análisis dimensional arrojan para la escala típica de distancia y el espectro de energía el resultado

$$a = \frac{m_e}{Zm} a_0 ,$$

y

$$E_n = \frac{m}{m_e} Z^2 R_y \lambda_n^2 .$$

Al estudiar el átomo de hidrógeno en un capítulo posterior se encontrará que  $\lambda_n = 1/n$  y que estos resultados siguen siendo válidos al extender el problema al espacio físico  $\mathbb{R}^3$ .

Estos resultados son muy interesantes, pues permiten hacer predicciones más allá de todo cálculo detallado. Por ejemplo, permite predecir el orden de magnitud de las energías de los electrones atómicos,  $\sim 10$  [eV] para átomos livianos y unos 100 [keV] para los estados más ligados de los átomos estables más pesados.

Las ecuaciones anteriores también muestran que la energía crece y el radio medio decrece al aumentar la masa  $m$ . Por ejemplo, en los *átomos muónicos* un electrón es reemplazado por un muón, para la masa del muón se tiene  $m_\mu \approx 205 m_e$ . En ese caso los radios orbitales llegan a ser del tamaño nuclear teniéndose, por consiguiente, un efectivo catalizador de las “reacciones de fusión fría” del tipo  $d + t \longrightarrow {}^4\text{He} + n$ .

### 4.2.2 Potenciales singulares.

Consideremos un potencial del tipo

$$V(x) = -\frac{W_0}{|x|^\beta},$$

con  $\beta > 0$ , de modo que  $V(0) = -\infty$ . Un ejemplo de un potencial de este tipo es el potencial Coulombiano. En este caso no es obvio *a priori* que exista un tamaño finito para la función de onda de mínima energía. Estudiemos el problema con mayor detalle.

Sea  $\Psi(x)$  una función de onda y pongamos

$$\Psi(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} f\left(\frac{x}{a}\right),$$

donde,  $f(\xi)$  es una función fija y  $a$  es una medida del ancho de la distribución de probabilidades. Es inmediato concluir de acá, y del hecho que  $\Psi(\pm\infty) = 0$ , las siguientes expresiones para los valores esperados de la energía cinética y energía potencial:

$$\begin{aligned} \langle \check{\mathbf{T}} \rangle &= -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \left( f(\xi) \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} f(\xi) \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{2ma^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \left| \frac{\partial f}{\partial \xi} \right|^2 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \Gamma > 0, \end{aligned}$$

y

$$\langle \check{\mathbf{V}} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx v(x) |\Psi(x)|^2 = -\frac{W_0}{a^\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \frac{1}{|\xi|^\beta} |f(\xi)|^2 = -\frac{W_0}{a^\beta} \Omega,$$

donde  $\Gamma$  y  $\Omega$  son constantes numéricas independientes de  $a$ . De acá sigue para el valor esperado de la energía total

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \Gamma - \frac{W_0}{a^\beta} \Omega. \quad (4.4)$$

Minimizando esta expresión respecto a  $a$  obtenemos el mínimo posible para la función de onda. Se verificará luego que todo autoestado satisface esta condición de mínimo. En el presente contexto nos interesa saber si es físicamente posible el “*colapso*” de la función de onda a tamaños puntuales.

De (4.4) se deduce que, para  $\beta < 2$ , la energía llega a un mínimo cuando

$$\langle \check{\mathbf{T}} \rangle + \frac{\beta}{2} \langle \check{\mathbf{V}} \rangle = 0,$$

es decir, cuando se cumple el teorema del virial. En este caso, para el mínimo ancho posible de la función de onda del estado fundamental se obtiene

$$a_{\min} = \left[ \frac{\hbar^2}{2mW_0} \frac{\Gamma}{\Omega} \right]^{1/(2-\beta)}.$$

Este resultado para  $\beta = 1$  explica por qué un electrón no cae al núcleo atómico: una vez alcanzado el mínimo ancho posible (lo que ocurre cuando  $a$  es del orden del radio de Bohr) la energía total del electrón empieza a aumentar ante ulteriores decrecimientos.

Si  $\beta > 2$ , de la ecuación (4.4) se deduce que la energía mínima es  $\langle E \rangle = -\infty$  y  $a = 0$ , o sea, la función de onda colapsa concentrándose en el punto  $x = 0$ . Tales potenciales carecen de sentido físico, aunque existen fenómenos naturales reminiscentes de esta situación.

### 4.2.3 Potenciales simétricos.

Consideremos una partícula moviéndose bajo la influencia de un potencial simétrico respecto al origen, es decir, que cumple con  $V(x) = V(-x)$ . La ecuación de Schrödinger es

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) - E \right] \Psi_E(x) = 0 .$$

Al realizar el cambio de variable  $x \rightarrow -x$  en la ecuación de Schrödinger y usando la simetría del potencial, se obtiene

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) - E \right] \Psi_E(-x) = 0 ,$$

es decir, si  $\Psi_E(x)$  es solución entonces también lo es  $\Psi_E(-x)$  para el mismo autovalor. También serán soluciones las combinaciones lineales

$$\Psi_E^\pm(x) = \frac{1}{2} [\Psi_E(x) \pm \Psi_E(-x)] . \quad (4.5)$$

Por supuesto que estas funciones son autofunciones del Hamiltoniano

$$H \Psi_E^\pm(x) = E \Psi_E^\pm(x) ,$$

y cumplen con

$$\Psi_E^\pm(-x) = \pm \Psi_E^\pm(x) .$$

De este modo, si  $V(x) = V(-x)$ , los autoestados de energía pueden elegirse con paridad definida ante la inversión. De este argumento parece desprenderse que el nivel  $E$  es degenerado, lo que es en general erróneo en el caso de espectro discreto. Lo que ocurre es que la solución posee una paridad definida *a priori*, siendo idénticamente nula alguna de las dos combinaciones lineales de la relación (4.5). Esto se visualiza mejor al resolver por separado la ecuación de Schrödinger para soluciones pares e impares; es extremadamente improbable esperar que los dos espectros así obtenidos tengan coincidencias.

### 4.2.4 Ejemplo ilustrativo.

Para ilustrar algunos conceptos generales consideremos el potencial (ver figura 4.3)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| > a/2 \\ -V_0 & \text{si } |x| \leq a/2 \end{cases} .$$

Recurriendo a los conceptos ya desarrollados, pongamos

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \lambda^2 ,$$

y

$$V_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \nu_0^2 .$$

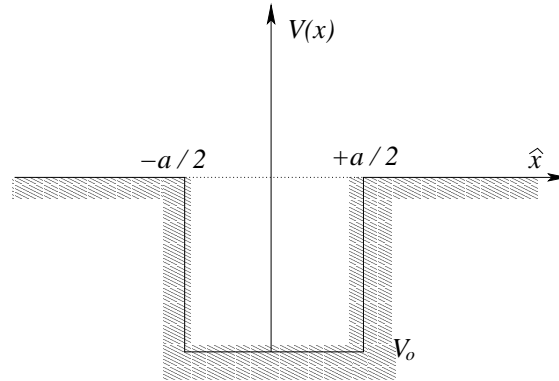


Figura 4.3: Gráfico del potencial usado en el ejemplo ilustrativo.

Por estar interesados en estados ligados estamos restringiéndonos a las soluciones con energía negativa. Introduzcamos también la coordenada espacial adimensional  $\xi = x/a$  y el vector de onda adimensional  $k$  a través de

$$k^2 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} (V_0 + E) = \nu_0^2 - \lambda^2 .$$

Como  $E > -V_0$  se tiene que  $k^2 > 0$ .

Debido a que el potencial es simétrico respecto a  $x = 0$ , basta resolver el problema para  $\xi > 0$  e imponer la condición  $\Psi(0) = 0$  para las soluciones impares y  $\partial\Psi(0)/\partial\xi = 0$  para las soluciones pares. Las soluciones satisfacen las siguientes ecuaciones diferenciales:

$$\left( -\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} - k^2 \right) \Psi(\xi) = 0 \quad \text{si } \xi \leq 1/2,$$

y

$$\left( -\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + \lambda^2 \right) \Psi(\xi) = 0 \quad \text{si } \xi > 1/2.$$

Para  $\xi > 1/2$ , existe sólo una solución aceptable, teniendo ésta la forma  $A \exp(-\lambda\xi)$ , la exponencial asintóticamente creciente debe ser descartada. En la región  $0 \leq \xi \leq 1/2$ , la solución de la ecuación de Schrödinger es sinusoidal y del tipo  $B \cos(k\xi)$  o  $B \sin(k\xi)$ . Ambas soluciones son aceptables, la primera dando origen a las soluciones pares y la otra a las impares. Sin embargo, no existen soluciones para cualquier valor de  $k$ . En efecto, en  $\xi = 1/2$  la función de onda y su derivada deben ser continuas, es decir, la derivada logarítmica debe ser continua, condición que sólo se cumple para ciertos valores discretos de  $k$ . Análíticamente, la condición de ensamble de la función de onda entre las dos regiones lleva a las relaciones

$$\tan\left(\frac{k}{2}\right) = \frac{\lambda}{k} = \frac{\sqrt{\nu_0^2 - k^2}}{k}, \quad \text{para las soluciones pares,} \quad (4.6)$$

y

$$\tan\left(\frac{k - \pi}{2}\right) = \frac{\lambda}{k} = \frac{\sqrt{\nu_0^2 - k^2}}{k}, \quad \text{para las soluciones impares.} \quad (4.7)$$

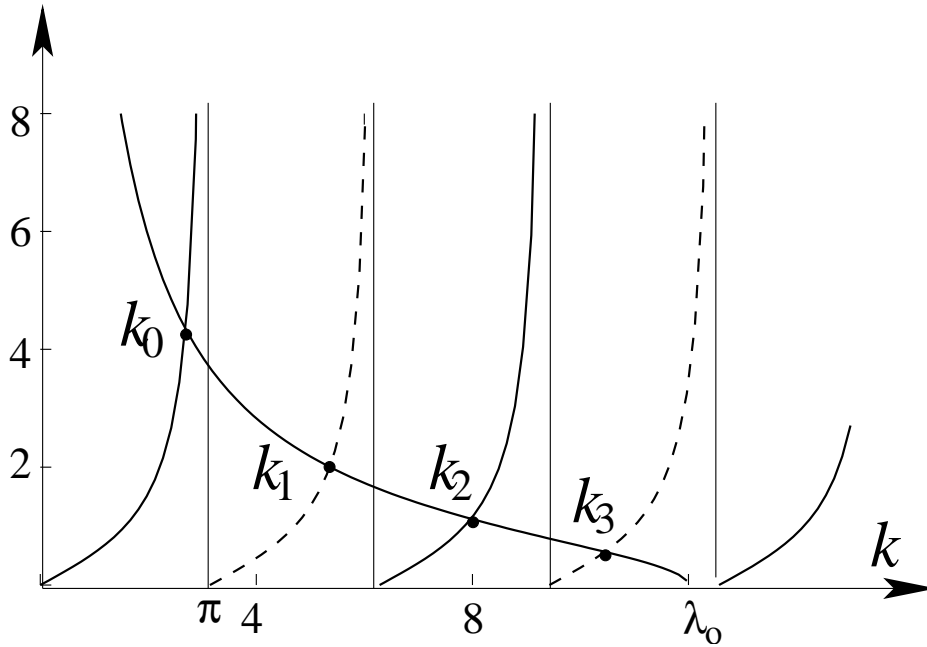


Figura 4.4: Solución gráfica de las ecuaciones (4.6) y (4.7). La línea monótonamente decreciente corresponde al lado derecho de las ecuaciones. Las demás líneas corresponden a los lados izquierdos, las líneas cortadas para las soluciones impares y las líneas llenas para las pares.

Estas ecuaciones se pueden resolver gráficamente (ver figura 4.4).

Se encuentra que siempre existe al menos una solución. Las soluciones  $k_0, k_1, \dots$ , etc., cumplen con

$$0 < k_0 < \pi < k_2 < 2\pi < \dots < k_N < \nu_0 < (N + 1)\pi . \quad (4.8)$$

El número total de estados ligados es  $N + 1 = [\nu_0/\pi] + 1$ , donde con el símbolo  $[\dots]$  se denota la parte entera. Usando la definición de  $\nu_0$  se obtiene

$$\# \text{ total de estados ligados} = 1 + \left[ \sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2\pi^2}} \right] . \quad (4.9)$$

La energía de los estados ligados viene dada por

$$E_n = -V_0 + \frac{\hbar^2}{2ma^2} k_n^2 < 0 \quad n = 0, 1, \dots, N ,$$

y las funciones de onda cumplen con

$$\Psi_n(-\xi) = (-1)^n \Psi_n(\xi) .$$

Conclusiones:

- (a) En este ejemplo el número de estados ligados es finito, el crece con  $V_0$ ,  $m$  y el ancho  $a$ .
- (b) El estado fundamental es par y no tiene nodos (no se consideran como nodos el cero que tiene la función de onda para  $\xi \rightarrow \pm\infty$ ). A medida que las autoenergías aumentan, la paridad de las funciones de onda correspondientes se alterna, mientras que el número de nodos crece en una unidad de nivel a nivel.
- (c) Supongamos por un momento que se cambia el origen desde el cual se miden las energías, ubicándolo en el mínimo del potencial. En ese caso las energías de los estados ligados vienen dadas por  $\bar{E}_n = \hbar^2 k_n^2 / (2ma^2)$ . Usando la ecuación (4.8) y comparando con las autoenergías  $E_n^\infty$  que obtuvimos en la sección anterior para el pozo infinito se encuentra que las energías del pozo finito vienen acotadas superiormente por las del pozo infinito, es decir,

$$\bar{E}_0 < E_0^\infty < \bar{E}_1 < E_1^\infty < \bar{E}_2 < E_2^\infty < \dots$$

Esto puede explicarse recurriendo al principio de incerteza: En el caso del pozo infinito se cumple rigurosamente que  $\Psi(\xi) = 0$  si  $|x| > a/2$ ; en el pozo finito se permite que la partícula incurra fuera de la región clásicamente permitida, lo que aumenta  $\Delta x$ , bajando así la energía cinética.

- (d) Si  $V_0 \rightarrow \infty$ , los primeros estados ligados casi coinciden con los del pozo infinito; de hecho, en tal límite las funciones de onda se anulan muy rápidamente al salir de la región clásicamente permitida. Esto establece un puente entre el caso idealizado de la primera sección ( $V_0 = \infty$ ) y el presente caso, más real.
- (e) Si  $V_0 \rightarrow 0$ , siempre persiste un estado ligado. Esto es una peculiaridad de los potenciales puramente atractivos en una dimensión, no siendo válida para potenciales tridimensionales.
- (f) La ecuación (4.9) establece un criterio intuitivo para establecer cuándo un potencial es “débil” o “fuerte”. Llamando

$$\Delta_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2},$$

esto es una especie de “energía del punto cero” se tiene

$$\# \text{ total de estados ligados} - 1 = \left[ \sqrt{V_0/\Delta_0} \right].$$

Si  $V_0 < \Delta_0$  hablamos de *potenciales débiles*, pues ellos son “rebalsados” por la energía del punto cero. En dimensión 3 tales potenciales débiles no tienen estados ligados y afectan muy poco a una partícula en un problema de scattering.

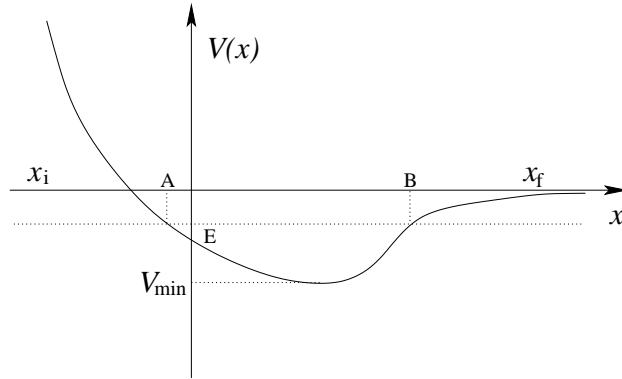


Figura 4.5: Potencial usado para discutir el comportamiento de las soluciones.

### 4.2.5 Consideraciones semiclásicas.

En esta sección haremos algunas consideraciones no rigurosas, pero que nos aportarán información cualitativa sobre los autoestados de energía ligados a un pozo atractivo unidimensional.

Clásicamente, el momento de una partícula de energía  $E$  en el punto  $x$  viene dado por <sup>1</sup>

$$p_{\text{clas}}(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} .$$

Usando el principio de *de Broglie* en este contexto semiclásico, tenemos que la longitud de onda de la partícula depende de  $x$  según la relación  $p(x) = h/\lambda(x)$ . Aproximemos los puntos de retorno clásico, es decir, los puntos donde  $p(x) = 0$ , como nodos de la función de onda (ésta es una consideración completamente válida en el límite  $m \rightarrow \infty$ ). En la figura 4.5 estos puntos son  $A$  y  $B$ . Debemos imponer, por lo tanto, que existe un número entero de longitudes de onda entre los puntos  $A$  y  $B$ , es decir,

$$\int_A^B \frac{dx}{\lambda(x)} = n \quad n = 1, 2, 3, \dots .$$

Usando la relación de de Broglie sigue

$$\int_A^B dx \sqrt{2m(E - V(x))} = n h . \tag{4.10}$$

Esta condición es similar a la regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld. Las presentes consideraciones tienen validez para los niveles muy excitados y  $m \rightarrow \infty$ .

<sup>1</sup>Esta expresión tiene sentido cuántico en la medida que podamos construir paquetes de ondas suficientemente estrechos en torno a  $\bar{x}$ , y cuya dispersión de momentos sea despreciable en comparación al momento medio  $\langle \check{\mathbf{p}} \rangle$ , de modo que

$$T = \frac{\langle \check{\mathbf{p}}^2 \rangle}{2m} \approx \frac{\langle \check{\mathbf{p}} \rangle^2}{2m} = E - \langle \check{V}(x) \rangle \approx E - V(\bar{x}) ,$$

donde  $\bar{x}$  es la posición media del paquete.

Consideremos lo que ocurre con el último nivel excitado que aún está ligado. Supondremos que para tal nivel la energía  $E$  ya es muy cercana a cero en comparación con la profundidad del potencial. De este modo, la última ecuación se puede aproximar en la forma

$$\frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sqrt{2m(-V(x))} = N_{\text{total}} = \{\# \text{ total de niveles ligados}\} , \quad (4.11)$$

donde se ha supuesto que  $V(x) < 0 \forall x$ ; y  $V(x) \rightarrow 0$  si  $x \rightarrow \pm\infty$ , de modo que los puntos de retroceso están en  $\pm\infty$ . Esta expresión sugiere que un pozo posee un número finito de niveles ligados si  $V(x)$  se anula más rápido que  $1/x^2$ . Es decir,

$$x^2 V(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0 \iff \text{Existe un número finito de estados ligados} . \quad (4.12)$$

Una grosera estimación de este número la tenemos al aproximar (4.11) por

$$\frac{1}{\hbar} \sqrt{2mV_0} a = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2 \pi^2}} = N_{\text{tot}} .$$

Esta expresión es muy similar a la relación encontrada en la subsección anterior.

Si el pozo no cumple con la relación (4.12), entonces existe una secuencia infinita de niveles ligados, al menos en el límite  $m \rightarrow \infty$ .

Consideremos ahora el potencial

$$V(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} -W_0 \frac{1}{x^\beta} ,$$

con  $\beta < 2$ . Pensemos nuevamente en un nivel muy excitado con energía cercana a cero y contemos el número de nodos de la función de onda asociada a él. Como ya hemos mencionado, el número de nodos ordena los niveles ligados del sistema, de modo que si los ordenamos en orden creciente:

$$E_0 < E_1 < E_2 < \dots < E_n ,$$

al nivel  $E_n$  le corresponden  $n$  nodos. Los puntos de retorno clásico para esta energía vienen dados por

$$x_R(E) = \pm \left( -\frac{W_0}{E} \right)^{1/\beta} . \quad (4.13)$$

Aproximemos (4.10) por su forma asintótica a partir de cierto punto  $x_0$ :

$$\begin{aligned} n(E) &= \frac{2}{\hbar} \int_{x_0}^{x_R} dx \sqrt{2mW_0 \left[ \left( \frac{1}{x} \right)^\beta - \left( \frac{1}{x_R} \right)^\beta \right]} + (\text{constante}) \\ &= \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{2mW_0}{x_R^{\beta-2}}} \int_{x_0/x_R}^1 d\xi \sqrt{\xi^{-\beta} - 1} + (\text{constante}) \end{aligned} \quad (4.14)$$



Cuando  $x_0/x_R \rightarrow 0$  en la ecuación (4.14), y dado que  $\beta < 2$ , se tiene

$$\begin{aligned} n(E) &\approx \frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{2mW_0}{x_R^{\beta-2}}} \int_0^1 d\xi \sqrt{\xi^{-\beta} - 1} + (\text{constante}) \\ &\approx \frac{2}{\hbar} \sqrt{2mW_0 x_R^{(2-\beta)}} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1}{\beta-\frac{1}{2}}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\beta} + 1\right)}. \end{aligned}$$

Usando (4.13), despejamos la energía en función del número de nodos, obteniéndose para  $n \rightarrow \infty$

$$E_n \sim -\frac{E_0}{n^q},$$

con

$$q = \frac{2\beta}{2-\beta}.$$

Acá  $E_0$  es

$$E_0 \propto \left[ W_0^2 \left( \frac{m}{\hbar^2} \right) \right]^{1/(2-\beta)}.$$

En el caso límite  $\beta \rightarrow 2$  (y en el límite  $n \rightarrow \infty$ ) se verifica que

$$E_n \sim -E_0 e^{-\alpha n},$$

con

$$\alpha = \sqrt{2} \frac{\hbar\pi}{\sqrt{mW_0}},$$

$E_0 = W_0/x_0^2$ , siendo  $x_0$  una distancia típica a partir de la cual vale la forma asintótica.

En el caso del potencial Coulombiano  $-Ze^2/|x|$  se tiene  $\beta = 1$  y  $W_0 = Ze^2$ , de modo que

$$E_n = -\frac{E_0}{n^2},$$

con

$$E_0 = (\text{cte.}) \frac{Z^2 e^4 m}{\hbar^2}.$$

Al encontrar el resultado exacto, la constante resulta ser 2.

Las consideraciones cualitativas desarrolladas en la presente subsección se verificarán con cálculos numéricos que se desarrollarán a continuación.

### 4.2.6 Análisis numérico de la Ecuación de Schrödinger.

En la presente sección haremos una somera descripción de un método numérico para encontrar el espectro de los estados ligados a un potencial atractivo unidimensional. Como subproducto de este análisis confirmaremos algunos de los resultados adelantados en las subsecciones anteriores.

Escribamos el problema de autovalores en la representación de posición

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \Phi(x) \equiv U(E, x) \Phi(x) . \quad (4.15)$$

Como se mostró anteriormente, la función de onda  $\Phi(x)$  se puede elegir siempre, y así lo supondremos aquí, real. De la relación (4.15) se concluye que la curvatura de la función de onda tiene el mismo signo de la función de onda en una región clásicamente prohibida y el signo opuesto en una región clásicamente permitida.

Trabajemos con un ejemplo concreto: consideremos el potencial mostrado en la figura 4.5 e indiquemos una forma de proceder para encontrar los estados ligados a tal potencial. Las soluciones que buscamos deben tender a cero para  $|x| \rightarrow \infty$ . Al tratar el problema en forma numérica no se puede imponer esta condición (en  $x = \pm\infty$ ), debiéndose aplicar para valores de  $x$  finitos. Para una energía fija, busquemos dos puntos, uno al lado izquierdo y el otro al lado de la región clásicamente permitida. Si esos dos puntos, llamémoslos  $x_i$  y  $x_f$ , están ubicados en regiones altamente prohibidas, la probabilidad de encontrar la partícula en la vecindad de esos lugares será despreciable y, por lo tanto, podemos modificar el potencial para  $x < x_i$  y  $x > x_f$ , reemplazándolo por  $+\infty$ , es decir, encerrando la parte relevante del potencial entre paredes impenetrables. En otras palabras, en lugar de buscar las soluciones que para  $|x| \rightarrow \infty$  se anulen, buscaremos las soluciones que se anulen en  $x_i$  y  $x_f$ .

Para integrar la ecuación de Schrödinger, usamos la expansión de Taylor de segundo orden para escribirla de la forma

$$\Phi(x + \Delta) = \Phi(x) + \Phi'(x)\Delta + U(x)\Phi(x) \frac{\Delta^2}{2} , \quad (4.16)$$

$$\Phi'(x + \Delta) = \Phi'(x) + U(x)\Phi(x) \Delta . \quad (4.17)$$

Estas ecuaciones permiten, en principio, evaluar la función de onda y su derivada en un punto  $x + \Delta$  al ser conocidos sus valores en  $x$ . La integración se comienza en  $x_i$  con los valores  $\Phi(x_i) = 0$  y  $\Phi'(x_i) = 1$ . El valor que tiene la derivada en el punto inicial es irrelevante (mientras sea distinta de cero); esta observación es evidente al recordar que un múltiplo de una solución sigue siendo esencialmente la misma solución. Conociendo la función de onda y su derivada en el punto inicial, usando las ecuaciones (4.16) y (4.17), es posible encontrar los valores de la función de onda y su derivada en los puntos sucesivos  $x_i + \Delta$ ,  $x_i + 2\Delta$ , ... hasta llegar a  $x_f$ . Es decir, contamos en principio con un método para prolongar analíticamente una solución  $\Phi(E, x)$  desde  $x_i$  hasta  $x_f$ , para  $\Delta \rightarrow 0$ , el método debería ser exacto. Generalmente, al seguir este procedimiento, la función de onda que se obtiene no se anulará en el punto final  $x_f$ . En ese caso se deberá repetir el procedimiento con una energía  $E$  diferente. Realizando numerosos cálculos, variando la energía en forma sistemática, es posible encontrar las energías y las funciones de onda de los estados ligados.

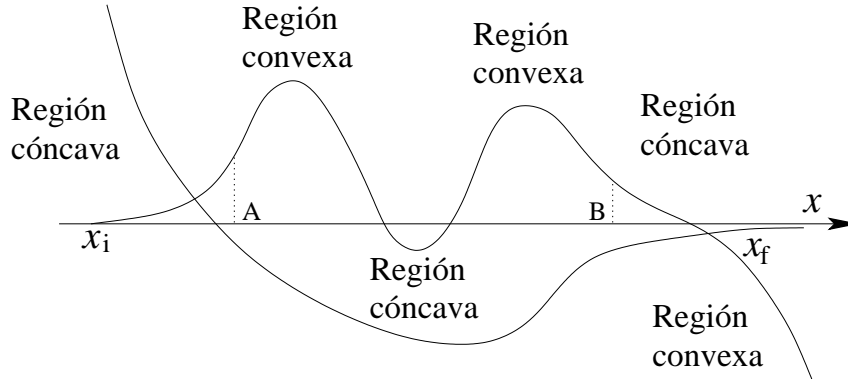


Figura 4.6: Comportamiento típico de una solución numérica de la ecuación de Schrödinger del potencial mostrado en la figura anterior.

Trabajemos inicialmente a nivel conceptual y analicemos la solución que se obtiene mediante este proceso iterativo.

Para ello notemos que en la figura 4.5, la región entre  $A$  y  $B$  corresponde a la región clásicamente permitida; las demás regiones son clásicamente prohibidas. Comenzamos integrando la ecuación de Schrödinger desde  $x = x_i$  con  $\Phi(x_i) = 0$  y  $\Phi'(x_i) = 1$ . El proceso iterativo lleva a una solución cóncava (esto se desprende de inmediato de la ecuación de Schrödinger) en la región clásicamente prohibida  $[x_i, A]$ . Cuando pasamos a la región clásicamente permitida,  $A < x < B$ , la función de onda inicialmente se torna convexa, lo que la hace declinar, eventualmente anulándose y cambiando de convexa a cóncava cuando  $\Phi(x)$  se hace negativa. Si el intervalo  $[A, B]$  es suficientemente ancho, y  $0 \leq E - V(x)$  suficientemente grande en tal región, la función  $\Phi(x)$  puede cambiar varias veces de signo en esta región clásicamente permitida, dado que allí será cóncava si  $\Phi(E, x) < 0$ , y convexa si  $\Phi(E, x) > 0$ . La figura 4.6 ilustra esta situación. Al pasar nuevamente a una región clásicamente prohibida,  $B < x < x_f$ , se pierde el comportamiento oscilatorio, pudiendo a lo más tener un cero adicional en tal región, cosa que sólo puede ocurrir si la función de onda y su derivada difieren en signo en  $x = B$ . Después de este posible cero la función de onda tiende a diverger. Así, pues, en general la función  $\Phi(E, x)$  tiende a oscilar en regiones clásicamente permitidas, y a diverger en regiones prohibidas. Luego, para una energía arbitraria  $E$  no se satisfará la condición de borde  $\Phi(x_f) = 0$ . Debemos ajustar cuidadosamente  $E$  para conseguir tal igualdad (asociada a la condición física  $\Phi(x = \infty) = 0$ ).

La figura 4.7 muestra esquemáticamente lo que ocurre con la función de onda a medida que aumenta la energía. Cuando la energía es suficientemente baja, casos  $E_1$ ,  $E_2$  y  $E_3$ , la función de onda no tiene nodos. Al incrementarse suficientemente la energía, digamos  $E = E_4$ , la función de onda ya posee un nodo.

A primera vista podría pensarse que  $\Phi(E, x)$  puede adquirir bruscamente dos nodos, al seguir un proceso como el esbozado en la figura 4.8; no obstante, tal proceso es imposible, pues en algún momento la función y su primera derivada serían nulas. Esto último, a su vez implica que la función  $\Phi$  es nula en todas partes, la función de onda y su derivada en un punto determinan de manera unívoca la función de onda en todas partes. Excluido este tipo de procesos concluimos:

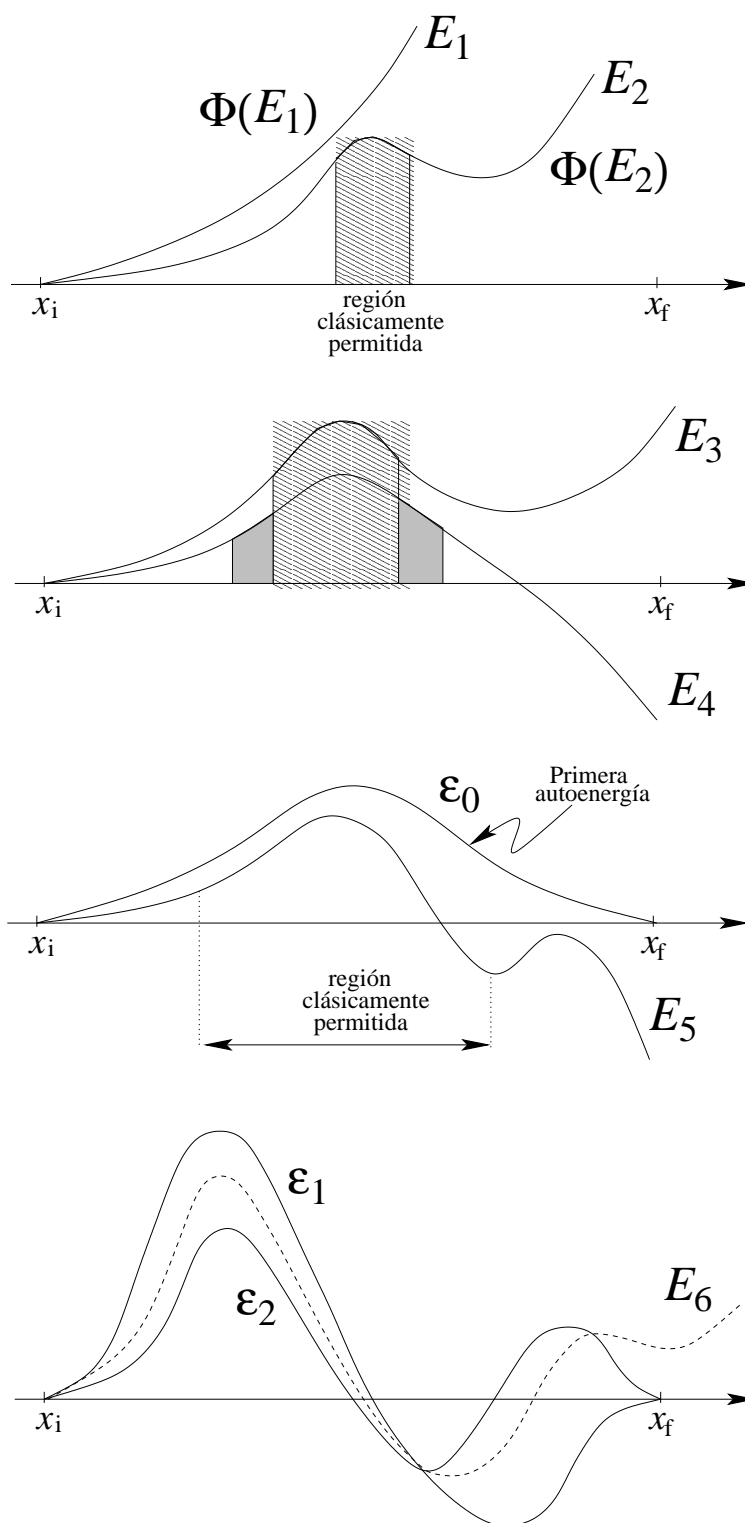


Figura 4.7: Comportamiento de la función de onda a medida que se aumenta la energía  $E_1 < E_2 < E_3 < \dots$ . Las energías de los autoestados se denota con  $\epsilon_n$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ .

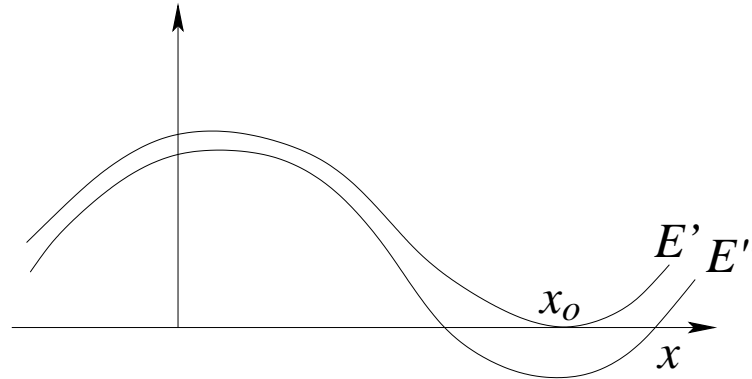


Figura 4.8: Gráfico usado para mostrar que no puede aparecer un cero doble en la función de onda.

*El número de nodos de  $\Phi(E, x)$  aumenta monótonamente con  $E$ , incrementándose de 1 en 1. Los nuevos nodos deben surgir por  $x = +\infty$  (para evitar un cero doble) y se desplazan de derecha a izquierda a medida que  $E$  se incrementa.*

En realidad, la gran mayoría de estas soluciones  $\Phi(E, x)$  carecen de sentido físico pues  $\Phi(E, +\infty) = \pm\infty$ ; sólo tienen sentido físico aquellos valores críticos de la energía donde un nodo de  $\Phi(E, x)$  se encuentra en  $x = +\infty$ , en nuestro esquema de cálculo numérico, lo último se aproxima por la condición  $\Phi(E = \varepsilon_n, x_f) = 0$ . En la figura 4.7 se muestran algunas de estas situaciones (las energías denotadas por  $\varepsilon_n, n = 0, 1, 2, \dots$ ). La primera solución aceptable se obtiene para  $\varepsilon_0$ , con  $E_3 < \varepsilon_0 < E_4$ . También se muestra un gráfico de  $\Phi(E_5, x)$ , con  $E_5 > E_4$ ; dicha curva ya empieza a sugerir la aparición de un nuevo nodo. También se muestran los dos primeros estados excitados físicamente aceptables con energías  $\varepsilon_1$  y  $\varepsilon_2$ , con  $E_5 < \varepsilon_1 < E_6 < \varepsilon_2$ ; allí se ve claramente cómo los nodos se desplazan paulatinamente de derecha a izquierda a medida que aumenta la energía, apareciendo los nuevos nodos desde  $x = +\infty$ . De este modo, se cumple que:

*La función  $\Phi_\nu(x) = \Phi(\varepsilon_\nu, x)$  posee  $\nu$  nodos, exceptuando los nodos en  $\pm\infty$ ; acá estamos ordenando los autovalores en orden creciente:  $\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \dots$*

Algunas consideraciones prácticas:

- a) Dado que al interior de una región clásicamente prohibida, la solución  $\Phi(E, x)$  tiende a diverger, el esquema de integración antes descrito resulta ser numéricamente inestable en la región  $B < x < x_f$ , aunque hayamos ajustado relativamente bien la energía  $\varepsilon_\nu$ . De hecho, en la región prohibida la solución general es del tipo  $ae^{-\kappa(x)x} + be^{+\kappa(x)x}$  y aunque la solución que se está encontrando numéricamente ya involucre un valor despreciable de  $b$ , tal término se incrementará para  $x \rightarrow \infty$  de modo de opacar la contribución física que proviene del término  $ae^{-\kappa(x)x}$ .

La forma de resolver esta dificultad numérica consiste simplemente en iterar de derecha a izquierda en tal intervalo, de modo que la solución física  $ae^{-\kappa(x)x}$  sea exponencialmente creciente en la dirección de la iteración. De esta manera, el esquema de cálculo numérico

involucra integración desde los puntos  $x_i$  y  $x_f$ , hacia un punto intermedio  $x_I$ , donde se empalman las derivadas logarítmicas. Así, pues, si  $\Phi^{(-)}(E, x)$  y  $\Phi^{(+)}(E, x)$  son las soluciones obtenidas al iterar desde  $x_i$  hacia la derecha, y desde  $x_f$  hacia la izquierda, respectivamente, la ecuación de autovalores es

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial x} \log[\Phi^{(-)}(E, x)] - \frac{\partial}{\partial x} \log[\Phi^{(+)}(E, x)] \right\}_{E=\varepsilon_\nu} = 0 .$$

- b) Si  $V(x) = V(-x)$ , el esquema iterativo se puede simplificar, dado que en tal caso la función de onda tiene una paridad bien definida. Se itera sólo desde la izquierda hasta  $x = 0$  y se impone que  $\Phi(E = \varepsilon_\nu, 0) = 0$  (caso de solución impar), o bien que  $\Phi'(E = \varepsilon_\nu, 0) = 0$  (caso de solución par). Es fácil convencerse que en este caso se alternan las soluciones pares e impares, teniéndose

$$\Phi_\nu(-x) = (-1)^\nu \Phi_\nu(x) \quad \nu = 0, 1, 2, \dots .$$

- c) Un esquema de iteración mejor se consigue al efectuar una expansión de Taylor de más alto orden. Para mayor detalle al respecto recomendamos las *Tablas Matemáticas* de Abramowitz-Stegun.

### 4.2.7 Resultados numéricos para algunos pozos.

En las figuras siguientes mostramos resultados numéricos para partículas de diversas masas ligadas a diversos potenciales.

En las figuras 4.9, se comparan las autoenergías para 3 potenciales, los cuales se eligen de igual profundidad  $V_0$  e igual "área"  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx V(x) = -V_0 a \sqrt{\pi}$ . El valor de  $V_0$  en los ejemplos es 20. De este modo, nos aseguramos que sus "anchos" sean similares. Así, estos tres potenciales difieren principalmente en la forma como se anulan hacia  $\pm\infty$ .

En las figuras 4.9 se usan: un potencial *Gaussiano*

$$V(x) = -V_0 \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) ,$$

que va a cero muy violentamente, un potencial *Lorentziano*

$$V(x) = -\frac{V_0}{1 + \pi x^2/a^2} ,$$

que va a cero lentamente y un caso intermedio

$$V(x) = -\frac{V_0}{1 + \pi (x/(2a))^2} ,$$

que se anula en  $\pm\infty$  como  $1/x^4$ . Para un caso se consideran dos masas para la partícula:  $m = 0.2$  y  $m = 0.5$ . Para  $m$  fijo se verifica que el número de estados aumenta a medida que el potencial decae más lentamente, sugiriéndose un número infinito de estados para el potencial *Lorentziano*, este último cumple con la ley  $E_\nu = E_0 \exp(-\gamma\nu)$  para  $\nu \rightarrow \infty$ .

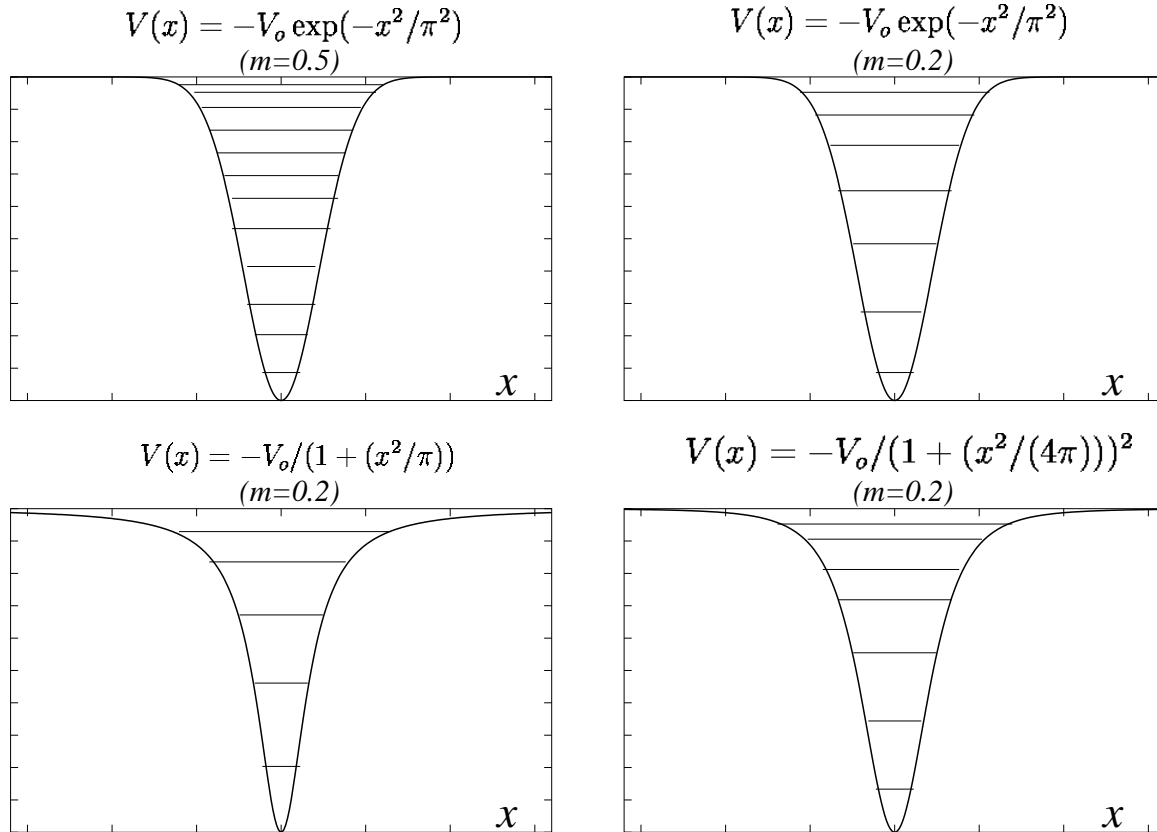


Figura 4.9: Niveles de energía para una partícula de masa  $m = 0.2$  y  $m = 0.5$  ligada a varios potencial que decaen con distinta rapidez a cero para  $|x| \rightarrow \infty$ .

De este modo, los resultados numéricos confirman las conclusiones cualitativas del análisis semiclásico para los potenciales que decaen lentamente; esto es razonable, pues en la región asintótica (alcanzada para los estados con  $\nu \rightarrow \infty$ ) se cumple que la longitud de onda de *de Broglie* es mucho menor que el rango de variación del potencial.

Los potenciales de corto alcance tienen un número finito de estados ligados.

La figura 4.9 muestra claramente que la separación entre niveles decrece al aumentar la masa. En la figura 4.9 se puede apreciar que los niveles más bajos aparecen casi equiespaciados, cumpliendo aproximadamente la relación  $\varepsilon_\nu \approx v_0 + \eta(\nu + 1/2)$ . Como luego se verá, ello se debe a que estos primeros estados ven aproximadamente un potencial parabólico (oscilador armónico).

En la figura 4.10 se analiza el potencial

$$V(x) = K \left[ \frac{1}{2}x^2 - b^2 \sqrt{1 + x^2/a^2} \right],$$

el cual posee una barrera en  $x = 0$ , que da lugar a dos valles laterales. Se puede apreciar que los estados por debajo de esta barrera aparecen formando “dobletes” muy delgados, en especial cuando se incrementa la masa. Estos dobletes están formados por una solución par,

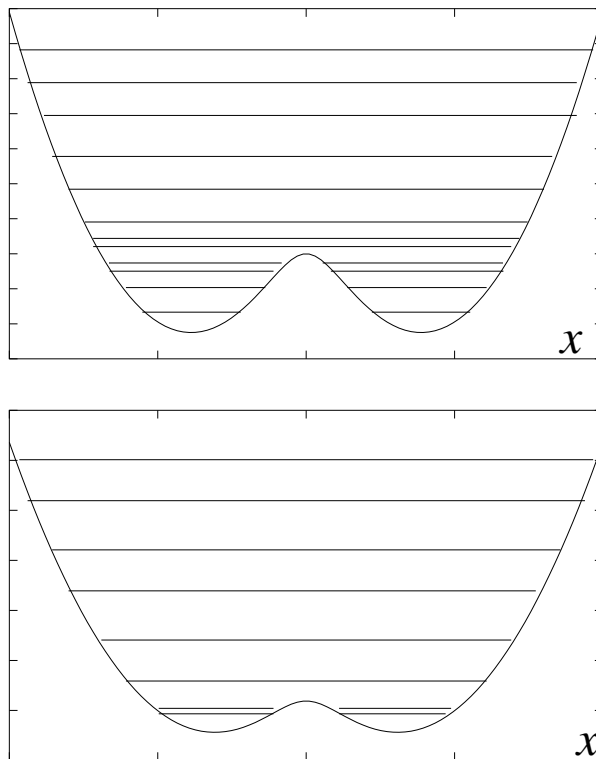


Figura 4.10: Niveles de energía para una partícula ligada a un potencial con un montículo al centro. En el caso de la arriba la partícula tiene mayor masa que en el de abajo

$\{\Phi_{\nu+}, \varepsilon_{\nu+}\}$ , y otra solución impar  $\{\Phi_{\nu-}, \varepsilon_{\nu-}\}$ . Se puede constatar que

$$\Phi_{\nu R}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_{\nu+}(x) + \Phi_{\nu-}(x)] ,$$

es una función de onda localizada casi completamente a la derecha del monte central, mientras que

$$\Phi_{\nu L}(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Phi_{\nu+}(x) - \Phi_{\nu-}(x)] ,$$

está localizada hacia la izquierda del montículo.

Ejercicio: (Problema 4-4) Verifique que si  $\Phi(t=0) = \Phi_{\nu R}(x)$ , entonces  $\Phi(t)$  se alterna periódicamente entre los estados  $\Phi_{\nu R}$  y  $\Phi_{\nu L}$ , con un tiempo de intercambio

$$\tau_{\nu} = \frac{\hbar\pi}{E_{\nu-} - E_{\nu+}} .$$

De acuerdo a este ejercicio, mientras más estrecho es el doblete, más tiempo permanece la partícula en cada valle lateral; este tiempo tiende a incrementarse si la masa de la partícula crece, como es natural esperar de tal límite semiclásico, donde el “efecto túnel” a través del monte se torna más improbable.



Ejercicio: (Problema 4-5) Analice el potencial

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{si } |x| > a/2 \\ W_0 \delta(x) & \text{si } |x| < a/2 \end{cases}$$

Ponga  $W_0 = \hbar^2 Q/m$  y tome el límite  $a \rightarrow \infty$ . Haga ver que se obtiene un espectro similar al de la figura 4.10. Interprete sus resultados analizando las autofunciones de cada doblete  $\Phi_{\nu\pm}(x)$ . Este ejercicio, propuesto por P. W. Anderson, motivó en forma directa a un alumno suyo (B. D. Josephson) a descubrir un interesante efecto observado en uniones superconductoras.

### 4.3 Partícula ligada a un potencial delta.

Consideremos una partícula de masa  $m$  ligada a un potencial delta atractivo

$$V(x) = -V_0 \delta\left(\frac{x}{x_0}\right) .$$

#### 4.3.1 Estado ligado en la representación de coordenadas.

Encontremos el espectro y las funciones de onda ligadas realizando el cálculo en la representación de coordenadas.

Para  $x \neq 0$  la partícula es libre. Estamos interesados en encontrar estados ligados, es decir, estados con energía negativa. Definamos  $\kappa$  por

$$\frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m} = |E| = -E .$$

Para  $x > 0$  la solución de la ecuación de Schrödinger que no diverge es

$$\Psi(x) = A e^{\kappa x} ,$$

mientras que para  $x < 0$  ésta es

$$\Psi(x) = \bar{A} e^{-\kappa x} .$$

La continuidad de  $\Psi$  exige que  $A = \bar{A}$ . Podemos resumir entonces las dos ecuaciones anteriores escribiendo

$$\Psi(x) = A e^{-\kappa|x|} . \tag{4.18}$$

Note que  $\Psi$  es continua en  $x = 0$ , pero que su derivada  $\Psi'$  no lo es.

La ecuación de Schrödinger en el espacio de coordenadas es

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - V_0 \delta\left(\frac{x}{x_0}\right) \right] \Psi(x) = E \Psi(x) .$$

Para  $E < 0$ , con  $U_0 \equiv 2mV_0/\hbar^2$ , esta ecuación queda de la forma

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + U_0 x_0 \delta(x) + \kappa^2 \right] \Psi(x) = 0 .$$

Para  $x \approx 0$ , la ecuación es esencialmente

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) = -U_0 x_0 \Psi(0) \delta(x) .$$

A partir de esta ecuación se deduce que la función de onda en  $x = 0$  debe satisfacer la relación

$$\Psi'(0^+) - \Psi'(0^-) = -U_0 x_0 \Psi(0) .$$

Sustituyendo la expresión (4.18) para la función de onda, se obtiene

$$-2\kappa A = -U_0 x_0 A .$$

De esta manera, se encuentra que  $\kappa$  necesariamente debe satisfacer

$$\kappa = \frac{U_0 x_0}{2} .$$

Luego, este problema sólo tiene un estado ligado (no degenerado). La energía del estado ligado es

$$E = -\frac{mV_0^2 x_0^2}{2\hbar^2} ,$$

y la función de onda normalizada viene dada por

$$\Psi(x) = \frac{\sqrt{mV_0 x_0}}{\hbar} \exp\left(-\frac{mV_0 x_0}{\hbar^2} |x|\right) .$$

Ejercicio: (Problema 4-6) Reproducir estos resultados usando la solución del pozo cuadrado con  $a \rightarrow 0$ ,  $V_0 \rightarrow \infty$  de modo que  $aV_0 = \text{constante}$ . Muestre que sólo aparece una solución y que ésta es par.

### 4.3.2 Estado ligado en la representación de momentos.

Resolvamos nuevamente el mismo problema, es decir, encontremos la energía y la función de onda para el estado ligado, pero realizando ahora el cálculo en la representación de momentos.

La ecuación de Schrödinger en la representación de momento es

$$\left( \frac{p^2}{2m} - E \right) \Psi(p) = \frac{-1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp' \tilde{V}(p-p') \Psi(p') , \quad (4.19)$$

donde  $\tilde{V}(p)$  es la transformada de Fourier de  $V(x)$ , es decir,

$$\tilde{V}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx V(x) e^{-ipx/\hbar} = \frac{-V_0 x_0}{\sqrt{2\pi\hbar}} .$$

En este caso particular la transformada de Fourier del potencial resulta ser una constante. Reemplazando este valor en la ecuación de Schrödinger (4.19) se obtiene

$$\left(E - \frac{p^2}{2m}\right) \Psi(p) = -\frac{V_0 x_0}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(p') dp' . \quad (4.20)$$

Definamos  $\beta$  y  $\alpha$  por

$$E \equiv -\frac{\beta^2}{2m} < 0 ,$$

y

$$\alpha \equiv \frac{mV_0 x_0}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(p') dp' .$$

Con estas definiciones la ecuación (4.20) queda

$$(p^2 + \beta^2)\Psi(p) = \alpha ,$$

es decir,

$$\Psi(p) = \frac{\alpha}{p^2 + \beta^2} .$$

Reemplazando este resultado en la definición de  $\alpha$  se obtiene la condición de auto-consistencia

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{mV_0 x_0}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\alpha dp}{p^2 + \beta^2} \\ &= \frac{mV_0 x_0 \alpha}{\hbar\beta} , \end{aligned}$$

o sea, se debe tener que

$$\beta = \frac{mV_0 x_0}{\hbar} .$$

Conocido  $\beta$  se conoce la energía del único estado ligado del problema. Esta resulta ser, como ya sabíamos,

$$E = -\left(\frac{mV_0 x_0}{\hbar}\right)^2 \frac{1}{2m} = -\frac{mV_0^2 x_0^2}{2\hbar^2} .$$

Para la función de onda, en el espacio momento, se tiene la expresión

$$\Psi(p) = \langle p | \Psi \rangle = \frac{\alpha}{p^2 + \beta^2} .$$

El valor de  $\alpha$  se obtiene normalizando la función de onda:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(p)|^2 dp = \alpha^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{(p^2 + \beta^2)^2} = \frac{\alpha^2 \pi}{2\beta^3} = 1 ,$$

es decir,

$$\alpha = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \beta^{3/2} .$$

Así, concluimos que la función de onda del estado ligado de este problema, en la representación de momentos, viene dada por la lorentziana

$$\Psi(p) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\left(\frac{mV_0x_0}{\hbar}\right)^{3/2}}{p^2 + \left(\frac{mV_0x_0}{\hbar}\right)^2} . \quad (4.21)$$

La transformada de Fourier de  $\Psi(p)$  reproduce la función de onda en el espacio de coordenadas

$$\Psi(x) = \langle x | \Psi \rangle = \sqrt{\frac{mV_0x_0}{\hbar^2}} \exp\left(-\frac{mV_0x_0}{\hbar^2}|x|\right) .$$

En la ecuación (4.21)  $p$  es una cantidad real, en contraposición a lo que erróneamente podría haberse pensado al considerar el operador  $\check{\mathbf{p}} \rightsquigarrow -i\hbar\partial/\partial x$  aplicado sobre la función  $\Psi(x)$ . Esto último lleva a:

$$\langle x | \check{\mathbf{p}} | \Psi \rangle = (i\hbar) \operatorname{sgn}(x) \left(mV_0x_0/\hbar^2\right) \Psi(x) .$$

Esta relación **no** implica que  $\check{\mathbf{p}}$  posea autovalores imaginarios; lo último es imposible. En esta última expresión  $(i\hbar) \operatorname{sgn}(x) (mV_0x_0/\hbar^2)$  no es un autovalor dado el factor  $\operatorname{sgn}(x)$ .

### 4.3.3 Cambio brusco de la intensidad $V_0$ .

Consideremos nuevamente la partícula ligada al potencial  $\delta$ . ¿Cuál es la probabilidad de encontrar la partícula en el continuo, es decir, con energía positiva, si la intensidad  $V_0$  del potencial aumenta bruscamente a  $2V_0$ ? Con esto estamos simulando el problema físico de un átomo de tritio. El tritio es una forma de hidrógeno, pero cuyo el núcleo, en lugar de un protón, tiene adicionalmente dos neutrones. Tal núcleo, sin embargo, no es estable; después de cierto tiempo (típicamente 12 años) el núcleo de tritio decae por un proceso  $\beta^-$  a un núcleo de  ${}^3\text{He}$ , que ahora posee carga nuclear  $Z = 2$ . Un electrón ligado al tritio observa un brusco aumento de la atracción del potencial, como en el presente símil unidimensional.

Inicialmente, la función de onda viene dada por

$$\Psi_0(x) = \sqrt{\frac{mV_0x_0}{\hbar^2}} \exp\left(-\frac{mV_0x_0}{\hbar}|x|\right) .$$

La probabilidad de encontrar la partícula en el estado ligado del pozo  $\delta$  después de cambiar éste su intensidad de  $V_0$  a  $2V_0$  es

$$P = |\langle \bar{\Psi}_0 | \Psi_0 \rangle|^2 ,$$

donde  $|\bar{\Psi}_0\rangle$  es el autovector del estado ligado posterior al cambio brusco.  $\langle x | \bar{\Psi}_0 \rangle$  viene dada por

$$\bar{\Psi}_0(x) = \langle x | \bar{\Psi}_0 \rangle = \sqrt{\frac{2mV_0x_0}{\hbar^2}} \exp\left(-\frac{2mV_0x_0}{\hbar^2}|x|\right) .$$

Evaluando  $P$  se encuentra

$$\begin{aligned} P &= \left| \sqrt{2} \frac{mV_0x_0}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{3mV_0x_0}{\hbar^2}|x|\right) dx \right|^2 \\ &= \left| \sqrt{2} \frac{mV_0x_0}{\hbar^2} \frac{2\hbar^2}{3mV_0x_0} \right|^2 = \frac{8}{9} . \end{aligned}$$

Luego, la probabilidad de encontrar la partícula en el continuo después de la modificación  $V_0 \rightarrow 2V_0$  es

$$\bar{P} = 1 - P = \frac{1}{9} .$$

#### 4.3.4 Relación de completitud.

A continuación, encontraremos todas las funciones de onda del continuo, en el espacio de coordenadas y demostraremos que tales funciones de onda no forman un conjunto completo. Para obtener un conjunto completo se deberá incluir además una función, que resulta ser igual a la función de onda del único estado ligado del sistema. De esta manera quedará explícitamente demostrada, en este caso particular, la relación de completitud.

La ecuación de Schrödinger que estamos considerando es

$$\left[ \frac{d^2}{dx^2} + k^2 - 2W_0 \delta(x) \right] \Psi(x) = 0 ,$$

donde

$$W_0 \equiv -\frac{V_0x_0m}{\hbar^2} .$$

En lo que sigue permitiremos que  $W_0$  sea positivo o negativo. Si  $W_0 > 0$ , entonces el problema será el de una partícula libre con un pozo delta en  $x = 0$ , mientras que, si  $W_0$  es negativo, en lugar del pozo se tendrá una barrera delta en  $x = 0$ .

Para cada valor de la energía  $E > 0$ , hay dos soluciones linealmente independientes (el espectro tiene degeneración 2). Estas soluciones, que corresponden a estados no ligados, pueden escribirse de la forma

$$\Psi_k^{(\text{impar})}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \text{sen}(kx)$$

y

$$\Psi_k^{(\text{par})}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{W_0}{\sqrt{k^2 + W_0^2}} \left( \text{sen}(k|x|) + \frac{k}{W_0} \cos(k|x|) \right) .$$

Note que las funciones impares (respecto al origen  $x = 0$ ) no son afectadas por la presencia de la delta.

Por ser autoestados del espectro continuo, las funciones anteriores están normalizadas a la delta de Dirac:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k^{(\mu)*}(x) \Psi_{k'}^{(\mu')}(x) dx = \delta_{\mu\mu'} \delta(k - k') ,$$

donde  $\mu = \text{impar}$  o  $\text{par}$ . La operación  $*$  no tiene ningún efecto ya que las funciones de onda son reales.

Evaluemos

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} \Psi_k^{(\text{impar})}(x) \Psi_k^{(\text{impar})}(x') dk + \int_0^{\infty} \Psi_k^{(\text{par})}(x) \Psi_k^{(\text{par})}(x') dk = \\ = \sum_{\mu} \int_0^{\infty} \Psi_k^{(\mu)}(x) \Psi_k^{(\mu)}(x') dk . \end{aligned} \quad (4.22)$$

Si el conjunto de funciones  $\{\Psi_k^{(\mu)}(x)\}$  con  $\mu = \text{par}$  e  $\text{impar}$  y  $k \geq 0$  es completo, el resultado de ((4.22)) debería ser  $\delta(x - x')$ .

Evaluemos separadamente las integrales con las funciones pares e impares. Se obtiene

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} \Psi_k^{(\text{impar})}(x) \Psi_k^{(\text{impar})}(x') dk &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \text{sen}(kx) \text{sen}(kx') dk \\ &= \frac{1}{2} [\delta(x - x') - \delta(x + x')] , \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} \Psi_k^{(\text{par})}(x) \Psi_k^{(\text{par})}(x') dk &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos(k|x|) \cos(k|x'|) dk - \\ &- \frac{W_0^2}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{dk}{k^2 + W_0^2} \cos(k(|x| + |x'|)) + \frac{W_0}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{k dk}{k^2 + W_0^2} \text{sen}(k(|x| + |x'|)) . \end{aligned}$$

La primera de las tres últimas integrales vale  $\frac{1}{2}\delta(|x| - |x'|) + \frac{1}{2}\delta(|x| + |x'|)$ , lo que es lo mismo que

$$\frac{1}{2}\delta(x - x') + \frac{1}{2}\delta(x + x') ,$$

independiente del signo de  $x$  y  $x'$ .

Para evaluar las otras dos integrales realizamos una integración de contorno en el plano complejo  $k$ . Para ello:

- Reemplazamos  $\int_0^{\infty} \dots$  por  $\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots dk$ , ya que el integrando es par,
- escribimos las funciones seno y coseno en términos de exponenciales y
- completamos el camino de integración con semicírculos en el semiplano superior o inferior, según corresponda. Los polos del integrando están ubicados en  $k = \pm |W_0| i$ .

La evaluación de las dos últimas integrales da

$$-\frac{1}{2}|W_0| \exp\{-|W_0|(|x| + |x'|)\}$$

y

$$-\frac{1}{2}W_0 \exp\{-|W_0|(|x| + |x'|)\} ,$$

respectivamente. De esta manera se obtiene que

$$\sum_{\mu} \int_0^{\infty} \Psi_k^{(\mu)}(x) \Psi_k^{(\mu)}(x') dk = \delta(x - x') - \frac{1}{2} (|W_0| - W_0) e^{-|W_0|(|x|+|x'|)} .$$

Si  $W_0$  es positivo, es decir,  $V_0$  es negativo, entonces el conjunto  $\left\{ \Psi_k^{(\mu)}(x) \right\}_{\mu,k}$  efectivamente es completo, ya que el resultado coincide con la delta de Dirac. Note que si  $V_0$  es negativo no hay estados ligados.

Sin embargo, si  $W_0$  es negativo, es decir,  $V_0$  es positivo, en cuyo caso el problema tiene un pozo delta con un estado ligado, entonces

$$\sum_{\mu} \int_0^{\infty} \Psi_k^{(\mu)}(x) \Psi_k^{(\mu)}(x') dk = \delta(x - x') - W_0 e^{-|W_0|(|x|+|x'|)} ,$$

o sea,  $\left\{ \Psi_k^{(\mu)}(x) \right\}_{\mu,k}$  **no** es un conjunto completo. Para que sea completo hay que agregarle al conjunto anterior las funciones de onda correspondientes a los estados ligados. El conjunto de todas las funciones de onda ligadas  $\left\{ \Psi_{E_i}^{(\text{ligados})}(x) \right\}_{E_i < 0}$  deben satisfacer

$$\sum_{E_i} \Psi_{E_i}^{(\text{ligados})}(x) \Psi_{E_i}^{(\text{ligados})}(x') = |W_0| e^{-|W_0|(|x|+|x'|)} .$$

Con  $x = x'$  queda

$$\sum_{E_i} \left| \Psi_{E_i}^{(\text{ligados})}(x) \right|^2 = |W_0| e^{-2|W_0||x|} ,$$

e integrando de  $x = -\infty$  hasta  $x = +\infty$  se obtiene

$$\sum_{E_i} \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \Psi_{E_i}^{(\text{ligados})}(x) \right|^2 dx = 1 .$$

Se deduce, por lo tanto, que hay sólo un estado ligado.

Resumiendo:

Para  $V_0 > 0$ , es decir, para el caso en que el problema tiene un pozo delta, el conjunto de todas las autofunciones de energía positiva del operador  $\hat{H}$  **no** forman un conjunto completo mientras no se le agregue la función de onda

$$\Psi_E^{(\text{ligado})}(x) = \sqrt{|W_0|} e^{-|W_0||x|} ,$$

del único estado ligado del problema. Note que para  $W_0 < 0$ , la definición de  $|W_0|$  coincide con la de  $\kappa$  y por consiguiente la función de onda obtenida para el estado ligado coincide con la obtenida en las primeras partes de este problema.

### 4.3.5 Transformación de Galileo.

Consideremos una partícula de masa  $m$  ligada a un pozo potencial  $V(x - b)$  que se encuentra centrado en el lugar  $x = b$ , con  $b$  fijo. La ecuación de Schrödinger tiempo dependiente que describe el problema es

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x - b) + i \frac{2m}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi_E(x - a) e^{-iEt/\hbar} = 0 ,$$

donde  $\Psi_E(x - b)$  es solución de la ecuación de Schrödinger estacionaria

$$\left( \frac{d^2}{dx^2} + V(x - b) + \kappa^2 \right) \Psi_E(x - b) = 0 .$$

Supongamos ahora que la delta se traslada uniformemente con velocidad  $v_0$ , es decir,  $b(t) = b_0 + v_0 t$ . ¿Cómo deben modificarse las soluciones encontradas para el caso estacionario?

Como se espera que el módulo al cuadrado sea  $|\Psi_E(x - b(t))|^2$ , hacemos el siguiente *Ansatz* para la solución:

$$\Psi_E(x - b(t)) \exp[-iEt/\hbar + i\xi(x, t)] ,$$

con  $\xi(x, t)$  real. Sustituyendo esta hipótesis de trabajo en la ecuación de Schrödinger se obtiene que  $\xi(x, t)$  debe satisfacer la siguiente ecuación:

$$2i\Psi'_E \frac{\partial \xi}{\partial x} - \Psi_E \left( \frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + i\Psi_E \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} - \frac{2m}{\hbar} i v_0 \Psi'_E - \frac{2m}{\hbar} \Psi_E \frac{\partial \xi}{\partial t} = 0 .$$

Como  $\xi$  y  $\Psi_E$  son funciones reales, se deduce que

$$- \left( \frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 - \frac{2m}{\hbar} \frac{\partial \xi}{\partial t} = 0 \tag{4.23}$$

$$\Psi'_E \left( \frac{\partial \xi}{\partial x} - \frac{mv_0}{\hbar} \right) - \frac{1}{2} \Psi_E \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} = 0 .$$

Las funciones  $\Psi'_E$  y  $\Psi_E$  son linealmente independientes, luego la última ecuación se cumple sólo si

$$\frac{\partial \xi}{\partial x} - \frac{mv_0}{\hbar} = 0 , \tag{4.24}$$

y

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} = 0 .$$

Integrando (4.24) se obtiene

$$\xi(x, t) = \frac{mv_0}{\hbar} x + f(t) , \tag{4.25}$$



donde  $f(t)$  es una función arbitraria que se determina sustituyendo (4.25) en (4.23). De esa manera se encuentra que  $f(t)$  debe satisfacer la ecuación

$$\frac{mv_0^2}{\hbar} + 2\frac{df}{dt} = 0 .$$

Integrando nuevamente se encuentra que  $f(t)$  es de la forma

$$f(t) = -\frac{mv_0^2}{2\hbar}t + C .$$

Eligiendo  $C = 0$ ,  $C \neq 0$  sólo contribuiría con una fase global a la función de onda, se obtiene finalmente la expresión

$$\xi(x, t) = \frac{1}{\hbar} \left( mv_0x - \frac{1}{2}mv_0^2t \right) .$$

Usamos estos resultados, obtenidos para un potencial arbitrario, para encontrar la función de onda ligada a una función delta que se traslada con velocidad uniforme  $v_0$ . Se tiene:

$$\langle x | \Psi_0(t) \rangle = \frac{\sqrt{mV_0x_0}}{\hbar} \exp \left( -\frac{mV_0x_0}{\hbar^2} |x - a(t)| \right) \exp \left( \frac{i}{\hbar}x mv_0 \right) \exp \left( -\frac{i}{\hbar}(E_0 + \frac{1}{2}mv_0^2)t \right) .$$

Para el valor esperado del operador energía  $i\hbar\partial/\partial t \check{\mathbf{1}}$  obtenemos

$$\langle \Psi_0(t) | i\hbar\partial/\partial t \check{\mathbf{1}} | \Psi_0(t) \rangle = E_0 + \frac{1}{2}mv_0^2 ,$$

es decir, la energía es la energía intrínseca del estado  $E_0$  más la energía de traslación  $mv_0^2/2$ .

En forma análoga al operador de traslación espacial

$$\check{\mathbf{T}}_{x_0} = \exp(i\check{\mathbf{p}}x_0/\hbar) ,$$

el operador

$$\check{\mathbf{T}}_{p_0} = \exp(i\check{\mathbf{x}}p_0/\hbar) ,$$

corresponde a un operador que traslada a la función de estado en momentum en una magnitud  $p_0$ .

Al observar una partícula de masa  $m$  desde un sistema de referencia que se mueve con velocidad  $v_0$  respecto al potencial, entonces la partícula adquiere un momento adicional  $mv_0$ . Este es precisamente el origen del término  $\exp(ix mv_0/\hbar)$  en la función de onda.

### 4.3.6 Ionización tras una aceleración repentina.

Considere el sistema físico consistente de una delta ubicada en el origen y en reposo con una partícula de masa  $m$  ligada a ella. Supongamos que en el instante  $t = 0$ , una fuerza externa

acelera bruscamente la delta, adquiriendo ésta una velocidad constante. La posición de la delta viene dada por

$$b(t) = v_0 \Theta(t) t ,$$

donde  $\Theta(t)$  es la distribución escalón. Debido a la aceleración brusca de la delta, la partícula de masa  $m$  no necesariamente continuará ligada a ella; de hecho, con cierta probabilidad la partícula pasará al continuo. El objetivo de esta parte del problema es calcular la distribución espectral de la probabilidad de encontrar la partícula en el continuo para  $t > 0$ .

Este problema tiene una clara motivación física. Por ejemplo, podemos pensar en un neutrón que impacta un núcleo atómico, imprimiéndole bruscamente un momento. Como consecuencia de este impacto el núcleo perderá parte de sus electrones externos. (De acá el efecto biológico que tiene un fuerte flujo de neutrones).

Denotemos por  $|\Phi\rangle$  la función de estado del sistema. Para  $t < 0$  la función de onda que describe la partícula de masa  $m$  es

$$\langle x | \Phi(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \exp\left(-\frac{|x|}{2\lambda}\right) \exp\left(-i\frac{E_0 t}{\hbar}\right) ,$$

donde hemos introducido la definición

$$\lambda = \frac{\hbar^2}{2mV_0x_0} .$$

Para  $t > 0$  las funciones de onda del estado ligado y los estados del continuo son

$$\langle x | \Psi_0(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} \exp\left(-\frac{|x - a(t)|}{2\lambda}\right) \exp\left(i\frac{mv_0}{\hbar}x\right) \exp\left(-i\frac{\bar{E}_0 t}{\hbar}\right) ,$$

$$\langle x | \Psi_k^{\text{impar}}(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \text{sen}[k(x - a(t))] \exp\left(i\frac{mv_0}{\hbar}x\right) \exp\left(-i\frac{\bar{E}_k t}{\hbar}\right)$$

y

$$\langle x | \Psi_k^{\text{par}}(t) \rangle = \frac{\cos[k|x - a(t)| + \delta_k]}{\sqrt{\pi}} \exp\left(i\frac{mv_0}{\hbar}x\right) \exp\left(-i\frac{\bar{E}_k t}{\hbar}\right) ,$$

donde  $\bar{E}_0 = E_0 + mv_0^2/2$ ,  $\bar{E}_k = (\hbar k)^2/(2m) + mv_0^2/2$  y

$$\delta_k = \arctan\left(\frac{1}{2k\lambda}\right) .$$

Para  $t > 0$  expresemos la función de estado de la partícula como combinación lineal de las “autofunciones” del sistema, es decir:

$$|\Phi(t)\rangle = A|\Psi_0(t)\rangle + \int_0^\infty dk \left( B_k |\Psi_k^{\text{impar}}(t)\rangle + C_k |\Psi_k^{\text{par}}(t)\rangle \right) .$$

Debemos encontrar los coeficientes de expansión  $A$ ,  $B_k$  y  $C_k$ . Se tiene que  $A = \langle \Psi_0(t) | \Phi(t) \rangle$  y expresiones análogas para  $B_k$  y  $C_k$ . Como los coeficientes son independientes del tiempo, evaluémoslos para  $t = 0$ . Se tiene:

$$\begin{aligned} A &= \langle \Psi_0(0) | \Phi(0) \rangle = \frac{1}{2\lambda} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left(-\frac{|x|}{\lambda}\right) \exp\left(-i\frac{mv_0}{\hbar}x\right) \\ &= \frac{1}{1 + (mv_0\lambda/\hbar)^2} . \end{aligned}$$

Análogamente, se encuentra que

$$\begin{aligned} B_k &= \langle \Psi_k^{(\text{impar})}(0) | \Phi(0) \rangle \\ &= i\sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}} \left[ \frac{1}{1 + \left(\frac{2mv_0\lambda}{\hbar} + 2k\lambda\right)^2} - \frac{1}{1 + \left(\frac{2mv_0\lambda}{\hbar} - 2k\lambda\right)^2} \right] \end{aligned}$$

y

$$C_k = \langle \Psi_k^{(\text{par})}(0) | \Phi(0) \rangle = i \frac{2mv_0\lambda}{\hbar} \frac{B_k}{\sqrt{1 + (2k\lambda)^2}} .$$

Para presentar los resultados es útil medir la energía de la partícula en unidades de  $E_0$ , es decir, definamos

$$\epsilon \equiv \frac{E}{E_0} .$$

También introduzcamos un parámetro adimensional relacionado con la rapidez de la delta. Conviene introducir el parámetro

$$\Gamma \equiv \frac{1}{2}mv_0^2/E_0 .$$

La probabilidad de encontrar la partícula para  $t > 0$  en el continuo con una energía entre  $\epsilon$  y  $\epsilon + d\epsilon$  es

$$P(\epsilon)d\epsilon = (|B_k|^2 + |C_k|^2) dk ,$$

es decir,

$$\begin{aligned} P(\epsilon) &= \left(\frac{dk}{d\epsilon}\right) (|B_k|^2 + |C_k|^2) \\ &= \frac{8}{\pi} \left(1 + \frac{\Gamma}{1 + \epsilon}\right) \frac{\Gamma\sqrt{\epsilon}}{[(1 + \epsilon + \Gamma)^2 - 4\Gamma\epsilon]^2} . \end{aligned}$$

La figura 4.11 muestra la distribución espectral de la densidad de probabilidad  $P(\epsilon)$  para varios valores de  $\Gamma$ .

Para la probabilidad total de encontrar, para  $t > 0$ , la partícula en el continuo, es decir que se ionice, se obtiene,

$$P = \int d\epsilon P(\epsilon) = 1 - |A|^2 = 1 - \frac{1}{(1 + \Gamma/4)^2} .$$

Es decir, la probabilidad de tener la partícula en el continuo más la probabilidad de tenerla ligada es 1. La figura 4.12 muestra  $P$  en función de  $\Gamma = mv_0^2/(2E_0)$ .

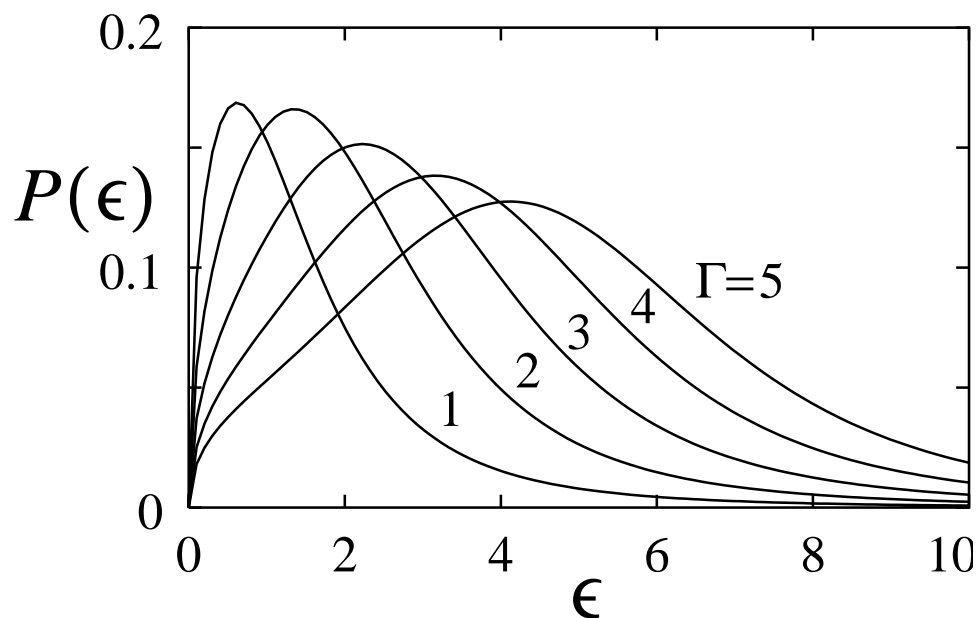


Figura 4.11: Distribución espectral de la densidad de probabilidad de encontrar la partícula, para  $t > 0$ , en el continuo con energía  $\epsilon = E/E_0$ .

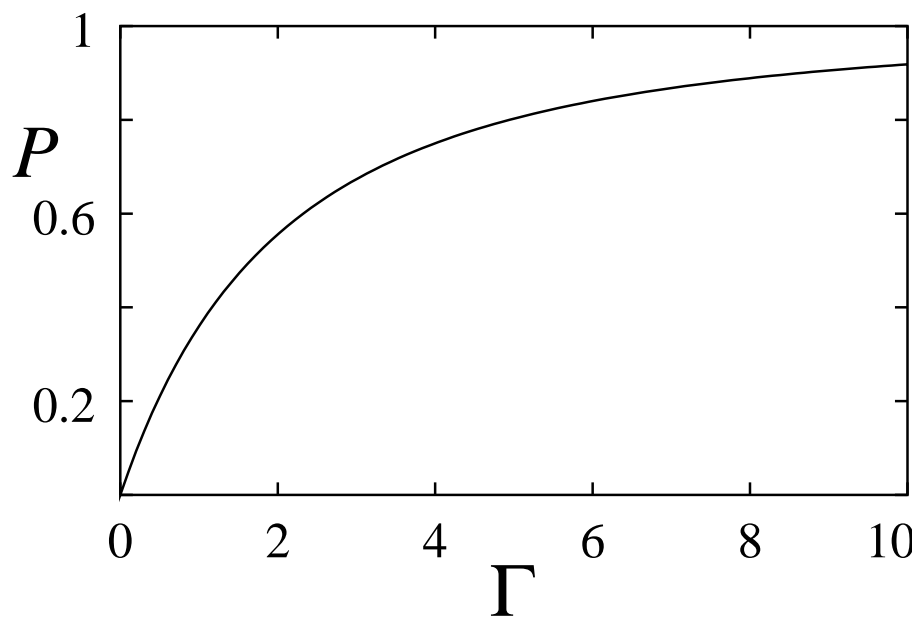


Figura 4.12: Probabilidad de ionización en función de  $\Gamma$ .

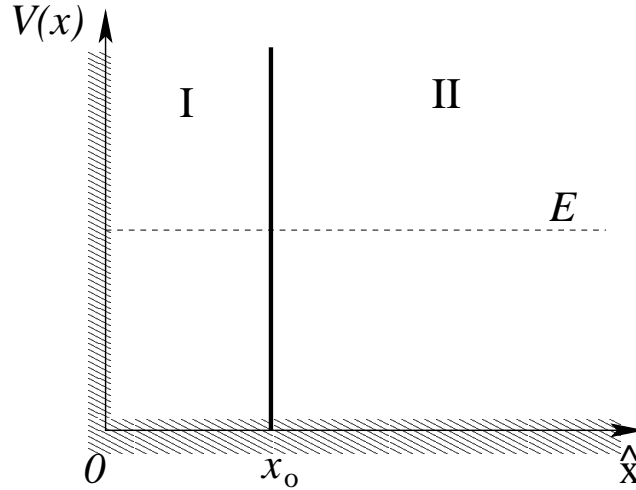


Figura 4.13: Potencial correspondiente a una pared dura con una barrera delta enfrente.

## 4.4 Resonancias y decaimiento exponencial.

Resolvamos el problema de una partícula de masa  $\mu$  moviéndose en el potencial (ver figura 4.13)

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ W_0 \delta(x - x_0) & x \geq 0 \end{cases} .$$

Este problema tiene relevancia para entender algunos fenómenos de la Física Nuclear, como el decaimiento  $\alpha$  y los fenómenos de resonancia en experimentos de scattering.

### 4.4.1 Estados estacionarios y resonancias.

Es claro que el espectro es continuo y no degenerado. Para todo valor positivo de la energía  $E$  existe una solución. Consideremos la ecuación de Schrödinger tiempo independiente

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + W_0 \delta(x - x_0) - E \right) \Psi(x) = 0 ,$$

y encontremos la solución que satisface la condición de borde  $\Psi(0) = 0$ .

Si  $W_0 = 0$  la solución es

$$\Psi_k^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \operatorname{sen}(kx) = \frac{i}{\sqrt{2\pi}} (e^{-ikx} - e^{+ikx}) , \quad (4.26)$$

donde  $k = \sqrt{2\mu E}/\hbar$ . Como el espectro es continuo y no degenerado, todos los estados del sistema se normalizan a la función delta, es decir

$$\int_0^\infty \Psi_k^{(0)*}(x) \Psi_{k'}^{(0)}(x) dx = \delta(k - k') .$$

El primer término al lado derecho de la ecuación (4.26) representa una onda incidente, eso es, una onda que se mueve desde  $+\infty$  hacia el origen, mientras que el segundo término corresponde a una onda emergente.

Si  $W_0 \neq 0$ , es decir, cuando está presente en  $x = x_0$  una barrera delta, la solución de la ecuación de Schrödinger que cumple con las condiciones de borde, viene dada por

$$\Psi_k(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{i\delta_k} \times \begin{cases} A_k \operatorname{sen}(kx) & 0 \leq x \leq x_0 \\ \operatorname{sen}(kx + \delta_k) & x_0 \leq x \end{cases} \quad (4.27)$$

donde,  $\delta_k$  y  $A_k$  vienen dados por

$$\delta_k = -kx_0 + \arctan \left[ \frac{\tan(kx_0)}{1 + \frac{\alpha}{kx_0} \tan(kx_0)} \right] \quad (4.28)$$

y

$$A_k = \left\{ \operatorname{sen}^2(kx_0) + \left( \cos(kx_0) + \frac{\alpha}{kx_0} \operatorname{sen}(kx_0) \right)^2 \right\}^{-1/2}. \quad (4.29)$$

En las ecuaciones anteriores se introdujo un parámetro adimensional

$$\alpha \equiv \frac{2\mu x_0 W_0}{\hbar^2}.$$

Note que  $\delta_k$  es el corrimiento de fase que sufre la onda estacionaria para  $x > x_0$  debido a la barrera delta, mientras que  $A_k$  es la amplitud que la onda estacionaria adquiere en el interior del “pozo” formado por la pared en  $x = 0$  y la barrera delta. Como se verá más adelante,  $\alpha$  está relacionado con la “penetrabilidad” de la barrera delta. Para  $\alpha = 0$  la barrera está ausente y, como se espera, en tal caso  $\delta_k = 0$  y  $A_k = 1$ , es decir,  $\Psi(x) = \Psi^{(0)}(x)$ , mientras que para  $\alpha = \infty$  la barrera es impenetrable y, por lo tanto,  $\delta_k = kx_0$  y  $A_k = 0$ , es decir,  $\Psi(x) = \Psi^{(0)}(x - x_0)$ .

En la figura 4.14 se muestra el corrimiento de fase  $\delta_k$  en función de  $kx_0$  para  $\alpha = 40$ . En la vecindad de  $kx_0 = n\pi$ , con  $n \in \mathbb{N}$ , la fase  $\delta_k$  aumenta rápidamente en  $\pi$ . Esta es una característica típica de *resonancias*.

Sea  $R$  la razón entre la probabilidad de encontrar la partícula en la región I y la probabilidad de encontrarla en la región II en un intervalo de tamaño  $x_0$ , esto es, del mismo tamaño de la región I. Para  $R$  se encuentra

$$R = A_k^2 \left( 1 - \frac{\operatorname{sen}(2kx_0)}{2kx_0} \right).$$

En la figura 4.15 se grafica  $R$  en función de  $E$  para  $\alpha = 40$ . Se observan resonancias que se ensanchan a medida que la energía aumenta.

Estas resonancias están relacionadas con los estados *cuasi-estacionarios* que existen en la región I (ver figura 4.16). Si  $\alpha = \infty$ , entonces en el pozo (entre  $x = 0$  y  $x = x_0$ ) existen estados estacionarios sólo si  $kx_0 = n\pi$ , lo puede comprobar. Si  $\alpha$  es finito, estos estados aparecen a energías levemente menores ( $\bar{k}_n x_0 \approx n\pi(1 - 1/\alpha)$ ) y adquieren un cierto ancho  $\Gamma_n$ .

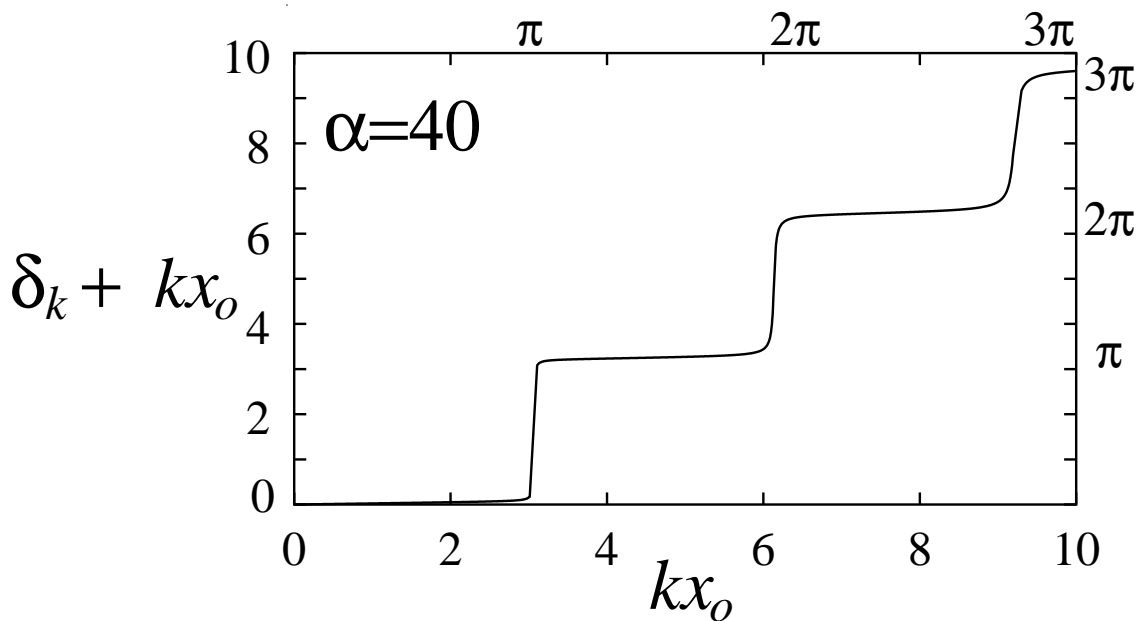


Figura 4.14: Corrimiento de fase  $\delta_k$  en función del momento de la partícula incidente.

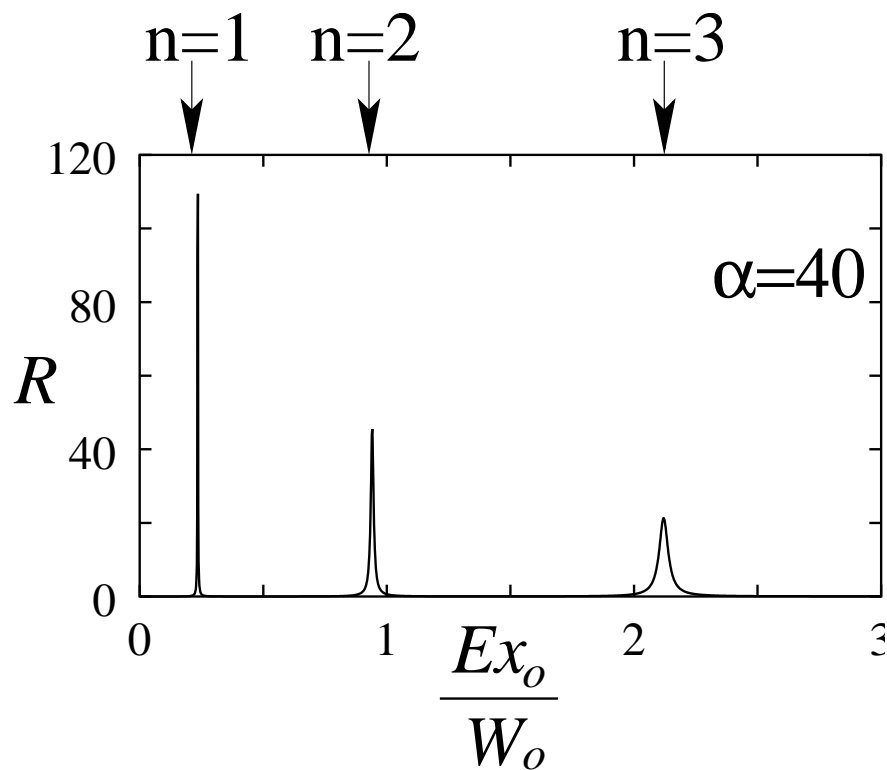


Figura 4.15: Probabilidad relativa de encontrar la partícula al interior del “pozo” en función de la energía incidente.

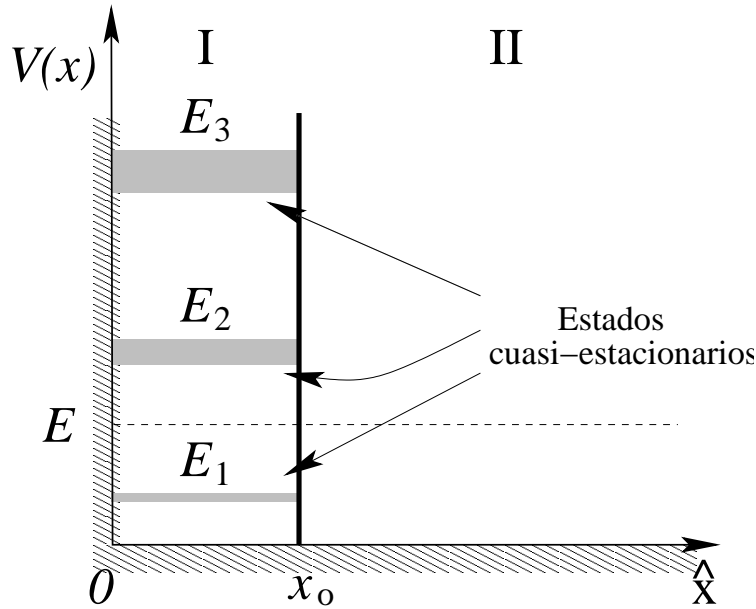


Figura 4.16: Estados cuasi-estacionarios. El ancho de cada nivel se muestra con una banda achurada.

#### 4.4.2 La fórmula de Breit-Wigner.

Para  $x > x_0$ , la función de onda  $\Psi_k(x)$  se puede escribir de la forma

$$\Psi_k(x) = i \sqrt{\frac{2}{\pi}} (e^{-ikx} - e^{2i\delta_k} e^{ikx}) . \quad (4.30)$$

Comparando con  $\Psi_k^{(0)}(x)$  se encuentra, tal como era de esperar, que sólo la parte emergente de la función de onda es modificada por el potencial. Específicamente, ésta es multiplicada por un factor, la así llamada *matriz-S*

$$S = e^{2i\delta_k} .$$

Para este problema la matriz-S es un solo número complejo y viene dada por

$$S = S^{(0)} \exp \left[ 2i \arctan \left( \frac{1}{2\beta} \right) \right] = S^{(0)} \left( 1 + i \frac{1}{\beta - \frac{i}{2}} \right) ,$$

donde  $S^{(0)}$ , que es una función que varía suavemente con  $k$ , y  $\beta$  vienen, respectivamente, dados por

$$S^{(0)} = e^{-2ikx_0} , \quad \beta = \frac{1 + \frac{\alpha}{kx_0} \tan(kx_0)}{2 \tan(kx_0)} . \quad (4.31)$$

Evaluemos  $\beta$  en la vecindad de una resonancia. Las resonancias ocurren cuando

$$\tan(\bar{k}_n x_0) = -\frac{\bar{k}_n x_0}{\alpha} .$$



Si  $k$  es cercano al valor resonante  $\bar{k}_n$ , entonces

$$\tan(kx_0) \approx \tan(\bar{k}_n x_0) + x_0(k - \bar{k}_n) = -\frac{\bar{k}_n x_0}{\alpha} + x_0 \Delta k. \quad (4.32)$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación que define  $\beta$  y reteniendo sólo los términos de menor orden en  $\Delta k = k - \bar{k}_n$ , se encuentra que

$$\beta \approx \frac{\alpha(\alpha + 1)\Delta k}{2\bar{k}_n^2 x_0} \approx \frac{\alpha(\alpha + 1)\mu(E - \bar{E}_n)}{2\hbar^2 x_0 \bar{k}_n^3} = \frac{E - \bar{E}_n}{\Gamma_n}, \quad (4.33)$$

donde  $\Gamma_n$  está definido por

$$\Gamma_n = \frac{2\hbar^2 \bar{k}_n^3 x_0}{\mu\alpha(\alpha + 1)} \stackrel{\alpha \gg 1}{\approx} \frac{2\hbar^2 \pi^3 n^3}{x_0^2 \mu \alpha^2}. \quad (4.34)$$

En el proceso de obtener la ecuación (4.33) se tuvo que suponer que  $\alpha \cdot \Delta k \ll \bar{k} \ll \bar{k}_n$ . Sustituyendo (4.33) en la expresión para la matriz  $S$  se obtiene la así llamada *fórmula de Breit-Wigner* para una resonancia aislada

$$S = S^{(0)} \left( 1 - i \frac{\Gamma_n}{(E - \bar{E}_n) + \frac{i}{2}\Gamma_n} \right).$$

Correspondiendo  $\Gamma_n$  al ancho de la resonancia situada en  $E = \bar{E}_n = \hbar^2 \bar{k}_n^2 / (2\mu)$ .

En la figura 4.17 se grafica  $|S - S^{(0)}|^2$  como función de  $E$  para la primera y la tercera resonancia. La línea llena corresponde al resultado exacto mientras que la línea cortada corresponde al resultado que se obtiene usando la fórmula de Breit-Wigner.

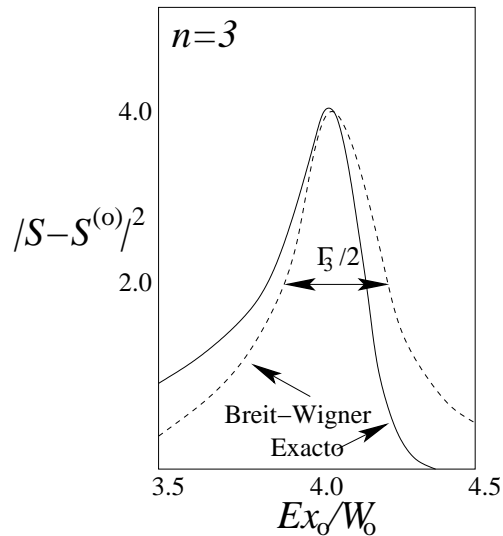


Figura 4.17: Forma de la tercera resonancia, con  $\alpha = 20$ . Comparación entre el resultado exacto y el obtenido con la fórmula de Breit-Wigner.

### 4.4.3 Decaimiento exponencial.

Consideremos ahora el problema tiempo dependiente que se obtiene si el parámetro  $W_0$  que mide la “intensidad” de la barrera delta, lo hacemos depender del tiempo:

$$W_0(t) = \begin{cases} \infty & t < 0 \\ W_0 \quad (0 < W_0 < \infty) & t \geq 0 \end{cases}$$

Para  $t < 0$ , la barrera delta en  $x = x_0$  es impenetrable, y en la región I el sistema tiene estados estacionarios discretos para las energías

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{n^2 \pi^2}{x_0^2}, \quad n \in \mathbb{N},$$

con las autofunciones correspondientes dadas por

$$\phi_n(x, t) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{x_0}} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{x_0} x\right) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} & 0 \leq x \leq x_0 \\ 0 & x < 0, \quad x > x_0. \end{cases}$$

Supongamos que para  $t < 0$  el sistema se encuentra en un particular estado (ligado)  $n$ . Por supuesto que en tal caso uno tiene una probabilidad de 100% de encontrar la partícula en la región I. Aquí la situación física que se está simulando podría corresponder a un núcleo inestable del cual tenemos seguridad que en el instante  $t = 0$  no ha decaído radioactivamente, de modo que la partícula  $\alpha$  está retenida dentro del potencial nuclear.

En el instante  $t = 0$  la barrera se vuelve permeable y, a medida que el tiempo avanza, la probabilidad de encontrar la partícula en la región I disminuirá. Para encontrar la evolución temporal de esta probabilidad se debe estudiar la dependencia temporal del estado  $\phi_n(x, t)$  para  $t > 0$ .

Para  $t > 0$  el potencial es nuevamente independiente del tiempo y las funciones

$$\left\{ \tilde{\Psi}_k(x) \right\}_{k>0} = \left\{ \exp(-i\delta_k) \Psi_k(x) \right\}_{k>0}, = \left\{ \exp(-i\delta_k) \left[ i \sqrt{\frac{2}{\pi}} (e^{-ikx} - e^{2i\delta_k} e^{ikx}) \right] \right\}_{k>0}$$

donde  $\Psi_k(x)$  viene dado por la ecuación (4.30), es un conjunto completo y ortogonal de autofunciones para el problema. Hemos multiplicado las soluciones encontradas en las secciones anteriores por una constante, para así trabajar con funciones reales. Para  $0 \leq x \leq x_0$  las funciones  $\tilde{\Psi}_k(x)$  simplemente vienen dadas por

$$\tilde{\Psi}_k(x) = A_k \sqrt{\frac{2}{\pi}} \operatorname{sen}(kx), \quad 0 \leq x \leq x_0.$$

Expandiendo  $\phi_n(x, 0)$  en términos de este conjunto completo se obtiene

$$\phi_n(x, 0) = \int_0^\infty \gamma_k \tilde{\Psi}_k(x) dk,$$

donde los coeficientes de expansión son

$$\begin{aligned}\gamma_k &= \int_0^{x_0} \phi_n(x, 0) \tilde{\Psi}_k(x) dx \\ &= \frac{2A_k}{\sqrt{\pi x_0}} \int_0^{x_0} \operatorname{sen}\left(\frac{n\pi}{x_0}x\right) \operatorname{sen}(kx) dx .\end{aligned}\tag{4.35}$$

El factor  $A_k$  es una función que varía fuertemente con  $k$  y es significativamente distinto de cero sólo en la vecindad de una resonancia (esto es, en la vecindad de  $k = k_n = n\pi/x_0$ ,  $n \in \mathbb{N}$ ). Por otra parte, la integral que aparece en la ecuación (4.35) varía lentamente con  $k$  y tiene su máximo valor para  $k = n\pi/x_0$  y vale cero para  $k = m\pi/x_0$ ,  $m \in \mathbb{N}$ ,  $m \neq n$ . A partir de estas consideraciones deducimos que  $\gamma_k$  es significativamente distinto de cero sólo en la vecindad de  $k_n = n\pi/x_0$ .

Para  $k$  en la vecindad de  $k_n = n\pi/x_0$ , la integral en la ecuación (4.35) vale esencialmente  $x_0/2$ , luego para  $k$  en la vecindad de  $k_n$  tenemos

$$\gamma_k \approx \sqrt{\frac{x_0}{\pi}} A_k .$$

Conociendo  $\gamma_k$  podemos ahora obtener la evolución temporal de  $\phi_n$ :

$$\phi_n(x, t) = \int_0^\infty \gamma_k \tilde{\Psi}_k(x) \exp\left(i\frac{\hbar k^2}{2\mu}t\right) dk .$$

A partir de este resultado se puede evaluar aproximadamente la dependencia temporal de la probabilidad  $P(t)$  de encontrar la partícula en la región I. Se tiene:

$$\begin{aligned}P(t) &= \int_0^{x_0} dx |\phi_n(x, t)|^2 \\ &= \int_0^{x_0} dx \left| \int_0^\infty \gamma_k \tilde{\Psi}_k(x) \exp\left(i\frac{\hbar k^2}{2\mu}t\right) dk \right|^2 \\ &\approx \int_0^{x_0} dx \left| \int_{k \approx k_n} \sqrt{\frac{x_0}{\pi}} A_k \left( A_k \sqrt{\frac{2}{\pi}} \operatorname{sen}(kx) \right) e^{i\frac{\hbar k^2}{2\mu}t} dk \right|^2 \\ &\approx \frac{2x_0}{\pi^2} \int_0^{x_0} dx \operatorname{sen}^2(k_n x) \left| \int_{k \approx k_n} A_k^2 e^{i\frac{\hbar k^2}{2\mu}t} dk \right|^2 \\ &\approx \left(\frac{x_0}{\pi}\right)^2 \left| \int_{k \approx k_n} A_k^2 e^{i\frac{\hbar k^2}{2\mu}t} dk \right|^2 .\end{aligned}$$

La amplitud  $A_k$  y el corrimiento de fase  $\delta_k$  están estrechamente ligados a través de la continuidad de la función de onda en  $x = x_0$ . De la ecuación (4.27) se encuentra que

$$A_k = \frac{\operatorname{sen}(kx_0 + \delta_k)}{\operatorname{sen}(kx_0)} .$$

Evaluemos ahora  $A_k^2$  en la vecindad de la resonancia localizada en  $k_n = n\pi/x_0$  ( $n \in \mathbb{N}$ ) usando las mismas hipótesis que se usaron anteriormente para derivar la fórmula de Breit-Wigner para la matriz  $S$ , esto es,  $\alpha \gg n\pi$  y  $\alpha\Delta k \ll k_n$ .

De las ecuaciones (4.28) y (4.31) se encuentra que

$$\text{sen}(kx_0 + \delta_k) = \text{sen}\left(\arctan\frac{1}{2\beta}\right) = \left(1 + \frac{\beta^2}{4}\right)^{-1/4}.$$

También, en analogía con la ecuación (4.32)

$$\text{sen}(kx_0) \approx -\frac{\bar{k}x_0}{\alpha} + x_0\Delta k \stackrel{\alpha\Delta k \ll k_n}{\approx} -\frac{\bar{k}_n x_0}{\alpha} \approx -\frac{n\pi}{\alpha}.$$

Para la amplitud se obtiene entonces:

$$A_x^2 \approx \frac{\left(\frac{\alpha}{n\pi}\right)^2}{1 + \frac{\beta^2}{4}} = \frac{\xi}{1 + \xi^2 x_0^2 (k - \bar{k}_n)^2},$$

donde,  $\bar{k}_n$  da la posición de la resonancia y  $\xi$  viene dado por

$$\xi = \left(\frac{\alpha}{n\pi}\right)^2.$$

Con estos resultados se encuentra para la probabilidad  $P(t)$  la expresión

$$\begin{aligned} P(t) &\approx \left(\frac{x_0}{\pi}\right)^2 \left| \int_{k \approx \bar{k}_n} \frac{\xi}{1 + \xi^2 x_0^2 (k - \bar{k}_n)^2} e^{i\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} t} dk \right|^2 \\ &\approx \left(\frac{x_0}{\pi} \xi\right)^2 \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\frac{\hbar k^2}{2\mu} t}}{1 + \xi^2 x_0^2 (k - \bar{k}_n)^2} dk \right|^2 \\ &= \exp(-t/\tau_n), \end{aligned} \tag{4.36}$$

donde  $\tau_n$  viene dado por

$$\tau_n = \frac{\mu x_0^2 \alpha^2}{2 n^3 \pi^3 \hbar}. \tag{4.37}$$

De la ecuación (4.36) se deduce que la probabilidad de encontrar la partícula en la región I decae exponencialmente con una vida media  $\tau_n$ . Comparando (4.37) con (4.34) se obtiene una relación entre la vida media  $\tau_n$  y el ancho de la resonancia  $\Gamma_n$ :

$$\tau_n = \frac{\hbar}{\Gamma_n}. \tag{4.38}$$

#### 4.4.4 Energías complejas.

Deseamos nuevamente describir, procediendo de una manera distinta, el decaimiento de un estado cuasi-estacionario para el caso en que la barrera delta es muy impenetrable.

Al ser la barrera muy impenetrable, tendremos en la región I estados cuasi-estacionarios. Tratemos de describir estos estados usando la ecuación de Schrödinger tiempo dependiente, buscando soluciones que cumplan condiciones de borde “adecuadas”. La ecuación de Schrödinger tiempo dependiente para este problema es:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + W_0 \delta(x - x_0) \right) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) .$$

Busquemos soluciones de esta ecuación que en la región I tengan la forma de las soluciones estacionarias, pero que en la región II, después de atravesar la barrera tienen la forma de ondas planas que se alejan hacia la derecha.

Planteamos el *ansatz*:  $\Psi(x, t) = \Psi_E(x) \exp(-iEt/\hbar)$ . Con  $k = \sqrt{2\mu E}/\hbar$ , la ecuación para  $\Psi_E(x)$  es

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + W_0 \delta(x - x_0) - k^2 \right) \Psi_E(x) = 0 .$$

Busquemos soluciones que en las regiones I y II tienen la forma:

$$\begin{cases} \Psi_I = A \operatorname{sen} kx \\ \Psi_{II} = B e^{ik(x-x_0)} \end{cases} ,$$

$\Psi_I$  se anula en el origen y  $\Psi_{II}$  corresponde a una onda que se traslada hacia la derecha. La continuidad de la onda en  $x = x_0$  implica que

$$A \operatorname{sen}(kx_0) = B .$$

En  $x = x_0$  la derivada de la función de onda debe cumplir

$$\Psi'_{II}(x_0^+) - \Psi'_I(x_0^-) = \frac{2\mu}{\hbar^2} W_0 \Psi(x_0) .$$

Esta condición nos da la relación

$$ik \operatorname{sen}(kx_0) - k \cos(kx_0) = \frac{2\mu}{\hbar^2} W_0 \operatorname{sen}(kx_0) .$$

Introduciendo nuevamente el parámetro adimensional  $\alpha$ , la última ecuación queda

$$ikx_0 \operatorname{sen}(kx_0) - kx_0 \cos(kx_0) = \alpha \operatorname{sen}(kx_0) . \quad (4.39)$$

Para una barrera poco penetrable el valor de  $\alpha \gg 1$ . Las soluciones que buscamos deben tener un valor  $k$  cercano al que tienen los estados cuasi-estacionarios. Por eso ponemos

$$kx_0 = n\pi + \epsilon ,$$

y esperamos poder encontrar soluciones con  $\epsilon \ll 1$ . Se tiene

$$\cos(kx_0) \approx 1$$

y

$$\text{sen}(kx_0) \approx \epsilon .$$

Con estas aproximaciones la ecuación (4.39) queda

$$i(n\pi + \epsilon)\epsilon - (n\pi + \epsilon) = \alpha\epsilon .$$

Despreciando  $\epsilon$  frente a  $n\pi$  la ecuación se simplifica a

$$\epsilon(\alpha - in\pi) = -n\pi ,$$

de donde

$$\epsilon \approx -\frac{n\pi}{\alpha^2} - i \left( \frac{n\pi}{\alpha} \right)^2 .$$

Para el vector de onda y la energía, en el orden más bajo, se obtienen las expresiones

$$kx_0 = n\pi - i \left( \frac{n}{\alpha} \right)^2$$

y

$$E = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2 \mu x_0^2} - i \frac{n^3 \pi^3 \hbar^2}{\mu x_0^2 \alpha^2} .$$

La parte real de la energía coincide con el resultado obtenido para los estados estacionarios del pozo, cuando la barrera es impenetrable. Pero además de tener una parte real, la energía también tiene una parte imaginaria. ¿Cuál será el significado de esto?

Para averiguarlo, escribamos la densidad de probabilidad en la región  $I$  en función del tiempo; se tiene

$$\begin{aligned} \rho_I(x, t) &\approx (\Psi_I(x)e^{-iEt/\hbar})^* (\Psi_I(x)e^{-iEt/\hbar}) \\ &= (\Psi_I^*(x)e^{+iE^*t/\hbar}) (\Psi_I(x)e^{-iEt/\hbar}) \\ &= |\Psi_I(x)|^2 e^{+2 \text{Im}(E)t/\hbar} . \end{aligned}$$

Vemos que la probabilidad de encontrar la partícula en la región I decae exponencialmente con una vida media  $\tau$  dada por

$$\begin{aligned} \tau &= -\frac{\hbar}{2 \text{Im}(E)} \\ &= \frac{\mu x_0^2 \alpha^2}{2 n^3 \pi^3 \hbar} , \end{aligned}$$

resultado que coincide con el obtenido en la subsección anterior. Naturalmente, este artificio de introducir energías complejas sólo es una modalidad cómoda para describir procesos de decaimiento, pero en rigor el Hamiltoniano del sistema persiste con todos sus autovalores reales, dado que se sigue cumpliendo que  $\check{\mathbf{H}}^\dagger = \check{\mathbf{H}}$ .

**4.4.5 Consideraciones semiclásicas.**

En ocasiones, recurriendo a argumentos semiclásicos, es posible obtener, en forma sencilla, resultados que al menos cualitativamente son correctos.

Consideremos una partícula clásica de masa  $\mu$  y energía

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2\mu} ,$$

situada en el pozo, entre la pared en  $x = 0$  y la delta en  $x = x_0$ . El tiempo  $T$  entre colisiones sucesivas contra la delta viene dado por

$$T = \frac{2x_0}{v_n} = \frac{2x_0}{\left(\frac{\hbar k_n}{\mu}\right)} . \quad (4.40)$$

Un simple cálculo (hágalo como ejercicio) muestra que la probabilidad de penetración  $P$  de una partícula a través de una barrera delta aislada  $W_0 \delta(x - x_0)$  viene dada por

$$P = \frac{1}{1 + \left(\frac{\alpha}{2k_n x_0}\right)^2} ,$$

en el caso  $\alpha \gg n\pi$  la expresión anterior se reduce a

$$P \approx \left(\frac{2k_n x_0}{\alpha}\right)^2 . \quad (4.41)$$

El tiempo medio  $\tau$  se define como el tiempo para el cual la probabilidad de que la partícula se encuentre en la región I ha decrecido a  $1/e$ . Si  $P \ll 1$  (lo que es el caso si  $\alpha \gg n\pi$ ), el número de colisiones  $N$  de la partícula contra la barrera para que esto ocurra viene implícitamente dado por la relación

$$(1 - P)^N = \frac{1}{e} .$$

Tomando el logaritmo natural de esta expresión y usando la hipótesis  $P \ll 1$ , se encuentra que

$$N = \frac{1}{P} . \quad (4.42)$$

Multiplicando (4.42) por  $T$ , notando que  $\tau_n = NT$  y usando las ecuaciones (4.40) y (4.41) en el límite  $P \ll 1$ , se obtiene para  $\tau_n$  la expresión

$$\tau_n = \frac{T}{P} = \hbar \left( \frac{\mu \alpha^2}{2\hbar^2 k_n^3 x_0} \right) ,$$

resultado que coincide con el obtenido antes.

## 4.5 Scattering sobre barreras.

### 4.5.1 La matriz de transferencia.

Consideremos una barrera centrada en el origen, descrita por un potencial  $V(x)$ , tal que  $V(x) = 0$  si  $|x| > \Delta$ .

Supongamos que incide sobre la barrera una onda monocromática desde la izquierda con energía  $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ . La función de onda que describe este problema con las condiciones de borde recién mencionadas, es de la forma

$$\Phi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r_{\rightarrow} e^{-ikx} & \text{si } x < -\Delta \\ t_{\rightarrow} e^{ikx} & \text{si } x > +\Delta \end{cases} \quad (4.43)$$

Acá  $r_{\rightarrow}$  y  $t_{\rightarrow}$  son las amplitudes de reflexión y transmisión de la barrera para una onda que incide por la izquierda. Estos números son complejos y satisfacen (conservación de la corriente)

$$|r_{\rightarrow}|^2 + |t_{\rightarrow}|^2 = 1 .$$

Conocido el potencial  $V(x)$  se puede, en principio, evaluar explícitamente las amplitudes  $r_{\rightarrow}$  y  $t_{\rightarrow}$ . En lo que sigue supondremos conocida esta parte del problema.

Deseamos ahora encontrar un resultado más general. Si al lado izquierdo la función de onda es

$$u_1 e^{ikx} + u_2 e^{-ikx} ,$$

¿cómo será la función de onda al lado derecho de la barrera?, es decir, si a la derecha la escribimos de la forma

$$v_1 e^{ikx} + v_2 e^{-ikx} ,$$

¿cuál es la relación que hay entre los coeficientes  $u_1$ ,  $u_2$  y  $v_1$ ,  $v_2$ ? Para poder responder esta interrogante note primeramente que si  $\Phi$ , dado por (4.43), es solución de la ecuación de Schrödinger, entonces  $\Phi^*$  también será solución (con el mismo autovalor). Por supuesto que también lo será la combinación lineal  $\xi\Phi + \eta\Phi^*$ . Escribamos explícitamente la forma que tiene esta última función al lado izquierdo y derecho de la barrera:

$$\xi\Phi + \eta\Phi^* = \begin{cases} (\xi + \eta r_{\rightarrow}^*) e^{ikx} + (\xi r_{\rightarrow} + \eta) e^{-ikx} & \text{si } x < -\Delta \\ \xi t_{\rightarrow} e^{ikx} + \eta t_{\rightarrow}^* e^{-ikx} & \text{si } x > \Delta \end{cases} \quad (4.44)$$

Identificando

$$u_1 = \xi + \eta r_{\rightarrow}^* , \quad u_2 = \xi r_{\rightarrow} + \eta$$

y

$$v_1 = \xi t_{\rightarrow} , \quad v_2 = \eta t_{\rightarrow}^* ,$$



se deduce que

$$u_1 = \frac{1}{t_{\rightarrow}}v_1 + \frac{r_{\rightarrow}^*}{t_{\rightarrow}^*}v_2 \quad \text{y} \quad u_2 = \frac{r_{\rightarrow}}{t_{\rightarrow}}v_1 + \frac{1}{t_{\rightarrow}^*}v_2 .$$

El resultado anterior lo podemos resumir en forma matricial escribiendo

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} , \quad (4.45)$$

con

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} 1/t_{\rightarrow} & r_{\rightarrow}^*/t_{\rightarrow}^* \\ r_{\rightarrow}/t_{\rightarrow} & 1/t_{\rightarrow}^* \end{pmatrix} . \quad (4.46)$$

La matriz  $\mathcal{M}$  se denomina *matriz de transferencia*.

Supongamos ahora que una onda plana de magnitud 1 incide sobre la barrera desde la derecha. La función de onda en este caso tendrá la forma

$$\begin{cases} e^{-ikx} + r_{\leftarrow}e^{ikx} & \text{si } x > +\Delta \\ t_{\leftarrow}e^{-ikx} & \text{si } x < -\Delta \end{cases}$$

¿Cómo están relacionadas las amplitudes  $t_{\leftarrow}$ ,  $r_{\leftarrow}$  y  $t_{\rightarrow}$ ,  $r_{\rightarrow}$ ? Usando las ecuaciones (4.45) y (4.46) se tiene

$$\begin{pmatrix} 0 \\ t_{\leftarrow} \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} r_{\leftarrow} \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/t_{\rightarrow} & r_{\rightarrow}^*/t_{\rightarrow}^* \\ r_{\rightarrow}/t_{\rightarrow} & 1/t_{\rightarrow}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_{\leftarrow} \\ 1 \end{pmatrix} ,$$

es decir,

$$\frac{r_{\leftarrow}}{t_{\rightarrow}} + \frac{r_{\rightarrow}^*}{t_{\rightarrow}^*} = 0 \quad \text{y} \quad r_{\leftarrow} \frac{r_{\rightarrow}}{t_{\rightarrow}} + \frac{1}{t_{\rightarrow}^*} = t_{\leftarrow} .$$

De aquí se encuentran las relaciones buscadas

$$t_{\leftarrow} = t_{\rightarrow} \quad (4.47)$$

y

$$r_{\leftarrow} = -r_{\rightarrow}^* \frac{t_{\rightarrow}}{t_{\rightarrow}^*} . \quad (4.48)$$

Note que las probabilidades de reflexión y transmisión son independientes de si la partícula incide desde la izquierda o de la derecha. No obstante, existen “cambios de fase” en la función de onda al comparar uno y otro caso; como veremos, tales cambios de fase son altamente relevantes para la física del problema.

Al trasladar la barrera desde el origen a la posición  $a$ , el “camino óptico” de la onda reflejada aumenta en  $2a$ ; para la onda transmitida nada cambia. Luego, la única modificación que hay que hacer es:

$$r_{\rightarrow} \longrightarrow r_{\rightarrow} e^{2ika} .$$

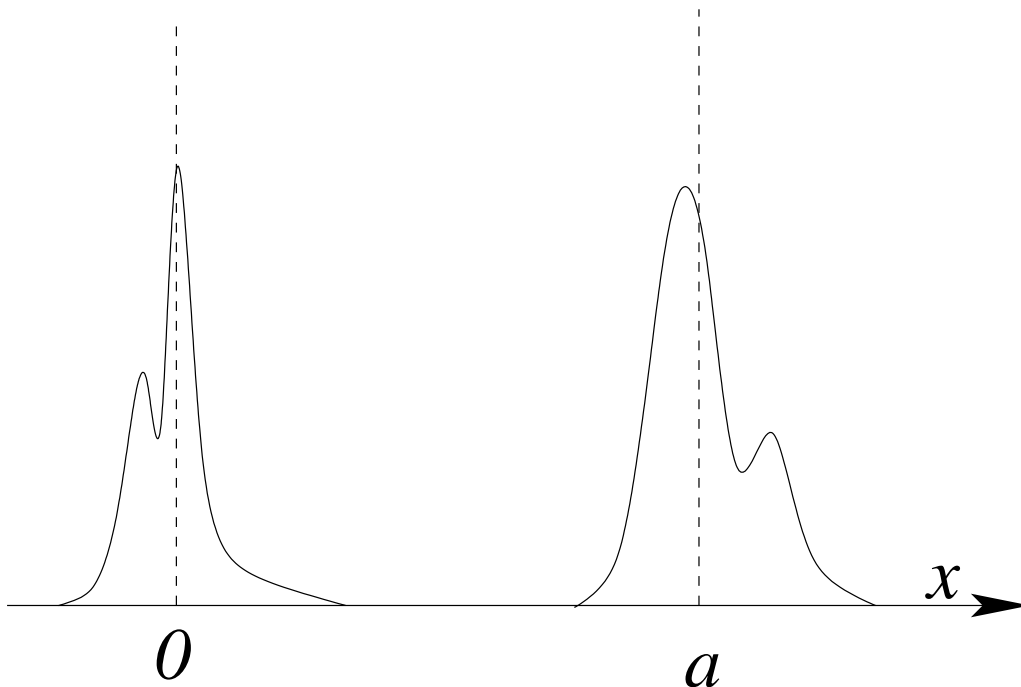


Figura 4.18: Dos barreras, una centrada en  $x = 0$  y la otra en  $x = a$ .

### 4.5.2 El caso de dos barreras.

Consideremos ahora un problema con dos barreras, una en torno a  $x = 0$  y otra en  $x = a$ . Supongamos que las barreras no se interpenetran, es decir, no hay traslape entre  $V_1(x)$  y  $V_2(x)$  (ver figura 4.18). La matriz de transferencia de cada una de las barreras será

$$\mathcal{M}_1 = \begin{pmatrix} 1/t_{\rightarrow}^{(1)} & r_{\rightarrow}^{(1)*}/t_{\rightarrow}^{(1)*} \\ r_{\rightarrow}^{(1)}/t_{\rightarrow}^{(1)} & 1/t_{\rightarrow}^{(1)*} \end{pmatrix}, \quad (4.49)$$

y

$$\mathcal{M}_2 = \begin{pmatrix} 1/t_{\rightarrow}^{(2)} & e^{-2ika} r_{\rightarrow}^{(2)*}/t_{\rightarrow}^{(2)*} \\ e^{2ika} r_{\rightarrow}^{(2)}/t_{\rightarrow}^{(2)} & 1/t_{\rightarrow}^{(2)*} \end{pmatrix}. \quad (4.50)$$

Podemos considerar ahora las dos barreras como una única barrera de estructura más complicada y asociarle a ella una matriz de transferencia

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} 1/t_{\rightarrow} & r_{\rightarrow}^*/t_{\rightarrow}^* \\ r_{\rightarrow}/t_{\rightarrow} & 1/t_{\rightarrow}^* \end{pmatrix}.$$

Es claro que se tiene

$$\mathcal{M} = \mathcal{M}_1 \mathcal{M}_2.$$

Realizando el producto matricial podemos identificar las amplitudes de reflexión y transmisión para la doble barrera; obteniéndose

$$t_{\rightarrow} = \left( \frac{1}{t_{\rightarrow}^{(1)} t_{\rightarrow}^{(2)}} + \frac{r_{\rightarrow}^{(1)*} r_{\rightarrow}^{(2)}}{t_{\rightarrow}^{(1)*} t_{\rightarrow}^{(2)}} e^{2ika} \right)^{-1}$$

y

$$r_{\rightarrow} = -t_{\rightarrow} \left( -\frac{r_{\rightarrow}^{(1)}}{t_{\rightarrow}^{(1)} t_{\rightarrow}^{(2)}} - \frac{1}{t_{\rightarrow}^{(1)*} t_{\rightarrow}^{(2)}} e^{2ika} \right).$$

Estas expresiones, con la ayuda de las ecuaciones (4.47) y (4.48), se pueden reescribir de la manera siguiente:

$$t_{\rightarrow} = \frac{t_{\rightarrow}^{(1)} t_{\rightarrow}^{(2)}}{1 - e^{2ika} r_{\rightarrow}^{(2)} r_{\leftarrow}^{(1)}} \quad (4.51)$$

y

$$r_{\rightarrow} = r_{\rightarrow}^{(1)} + \frac{t_{\rightarrow}^{(1)} r_{\rightarrow}^{(2)} t_{\leftarrow}^{(1)} e^{2ika}}{1 - e^{2ika} r_{\rightarrow}^{(2)} r_{\leftarrow}^{(1)}}. \quad (4.52)$$

Expandiendo estas expresiones en serie podemos identificar cada uno de los términos con un cierto proceso virtual. En efecto,

$$t_{\rightarrow} = t_{\rightarrow}^{(1)} t_{\rightarrow}^{(2)} + e^{2ika} t_{\rightarrow}^{(1)} r_{\rightarrow}^{(2)} r_{\leftarrow}^{(1)} t_{\rightarrow}^{(2)} + e^{4ika} t_{\rightarrow}^{(1)} (r_{\rightarrow}^{(2)} r_{\leftarrow}^{(1)})^2 t_{\rightarrow}^{(2)} + \dots$$

La figura 4.19 muestra los procesos virtuales que corresponden a los primeros tres términos de la serie. Todo calza: el factor de fase da el largo del camino óptico, el número y la dirección de las reflexiones y transmisiones coincide con el observado en la figura 4.19. Por ejemplo, consideremos el proceso “virtual”  $e^{2ika} t_{\rightarrow}^{(1)} r_{\rightarrow}^{(2)} r_{\leftarrow}^{(1)} t_{\rightarrow}^{(2)}$  asociado a un doble rebote entre las dos barreras, después de lo cual la partícula emerge a la derecha. Este proceso involucra, primero, la amplitud de transmisión de la primera barrera,  $t_{\rightarrow}^{(1)}$ , después la amplitud de reflexión sobre la segunda barrera  $r_{\rightarrow}^{(2)}$ , después la reflexión por la primera barrera de una onda que ahora viaja de derecha a izquierda,  $r_{\leftarrow}^{(1)}$  (de acá el cambio de sentido en la flecha), y finalmente la transmisión por la segunda barrera de una onda que viaja de izquierda a derecha,  $t_{\rightarrow}^{(2)}$ . Lo anterior aparece multiplicado por un factor de fase  $\exp(2ika)$  asociado al camino óptico adicional, de valor  $2a$ .

Realizando lo mismo para la amplitud de reflexión se obtiene:

$$r_{\rightarrow} = r_{\rightarrow}^{(1)} + e^{2ika} t_{\rightarrow}^{(1)} r_{\rightarrow}^{(2)} t_{\leftarrow}^{(1)} + e^{4ika} t_{\rightarrow}^{(1)} r_{\rightarrow}^{(2)} r_{\leftarrow}^{(1)} r_{\rightarrow}^{(2)} t_{\leftarrow}^{(1)} + \dots$$

La figura 4.20 muestra los procesos virtuales que corresponden a cada uno de los primeros tres términos de esta serie.

Evaluemos ahora las probabilidades de transmisión y reflexión. Denotemos por  $T_j$  y  $R_j$  las probabilidades de transmisión y reflexión por cada una de las barreras  $j = 1, 2$  en ausencia de la otra:

$$T_j = |t_{\rightarrow}^{(j)}|^2, \quad R_j = |r_{\rightarrow}^{(j)}|^2, \quad j = 1, 2.$$

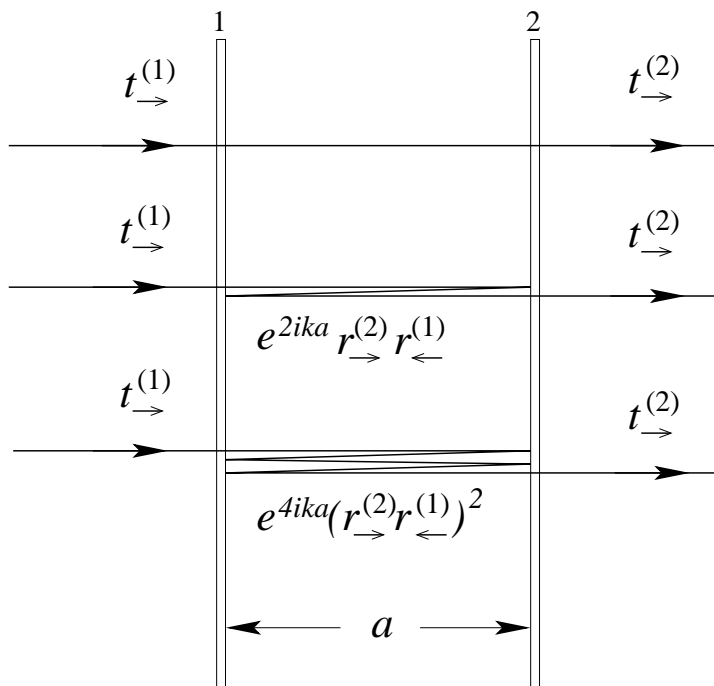


Figura 4.19: Representación gráfica de los procesos de transmisión con 0, 2, y 4 rebotes virtuales entre ambas barreras.

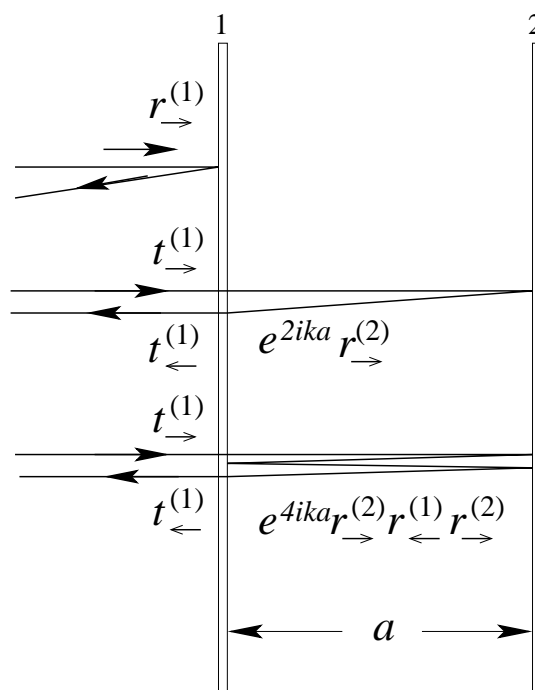


Figura 4.20: Representación de los procesos de reflexión con 0, 1 y 3 rebotes virtuales entre ambas barreras.

Para las probabilidades de transmisión y reflexión (a través de la barrera doble) se obtiene

$$T = \frac{T_1 T_2}{|1 + \sqrt{R_1 R_2} e^{-i\theta}|^2}, \quad (4.53)$$

$$R = \left| \frac{\sqrt{R_1} + \sqrt{R_2} e^{i\theta}}{1 + \sqrt{R_1 R_2} e^{-i\theta}} \right|^2, \quad (4.54)$$

donde

$$\theta = \theta_0 + 2ka,$$

con  $\theta_0$  una fase constante. Es fácil verificar que  $T + R = 1$ .

Al aleatorizar la fase correspondiente a la distancia  $a$  obtenemos el resultado clásico

$$\langle T \rangle_{\text{prom}} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{T_1 T_2}{|1 + \sqrt{R_1 R_2} e^{-i\theta}|^2} = \frac{T_1 T_2}{(1 - R_1 R_2)} = T_{\text{cl}}.$$

Mostremos que esta última expresión efectivamente es el resultado clásico, es decir, es el resultado que se obtiene con la hipótesis de que los múltiples procesos de reflexión y transmisión son procesos *reales* (y no *virtuales*). Para ello, consideremos nuevamente dos barreras con coeficientes de transmisión y reflexión  $T_1$ ,  $R_1$  y  $T_2$ ,  $R_2$ , respectivamente. Sumando los distintos procesos reales, mutuamente excluyentes, mostrados en la figura 4.21, se obtiene

$$\begin{aligned} T_{\text{cl}} &= T_1 T_2 + T_1 R_2 R_1 T_2 + T_1 R_2 R_1 R_2 R_1 T_2 + \dots \\ &= T_1 (1 + R_2 R_1 + R_2 R_1 R_2 R_1 + R_2 R_1 R_2 R_1 R_2 R_1 + \dots) T_2 \\ &= \frac{T_1 T_2}{(1 - R_1 R_2)}. \end{aligned}$$

Análogamente, para el coeficiente de reflexión se obtiene

$$R_{\text{cl}} = R_1 + \frac{(T_1)^2 R_2}{1 - R_1 R_2}.$$

Note que  $T_{\text{cl}} < T_1$  y  $T_{\text{cl}} < T_2$ , es decir, la transmisión clásica a través de las dos barreras es menor que la transmisión por cada una de las barreras por separado. Estas desigualdades son bastante intuitivas. El resultado cuántico, sin embargo, no cumple con desigualdades análogas. Esto se debe a que el razonamiento clásico asume que los distintos procesos (transmisión con cero, uno, dos, ... rebotes) son opciones mutuamente excluyentes. Cuánticamente debe considerarse como que todas estas opciones están simultáneamente contribuyendo a un proceso real de transmisión. Esto es completamente ajeno a toda experiencia macroscópica, y, sin embargo, da cuenta de notables efectos, como la transmisión resonante.

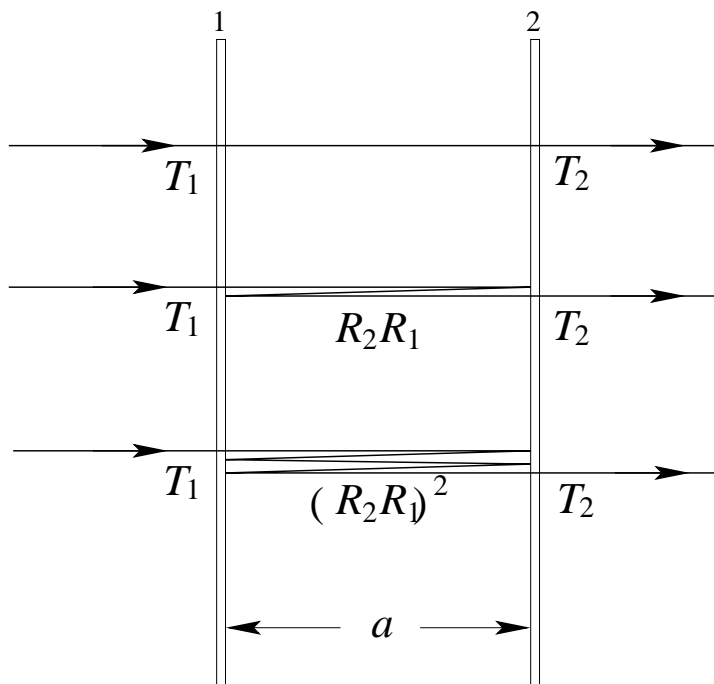


Figura 4.21: Representación de los procesos de transmisión con 0, 2, y 4 rebotes reales entre ambas barreras.

### 4.5.3 Transmisión resonante.

Supongamos que  $T_1 \ll 1$ , es decir, supongamos que la primera barrera (en ausencia de la otra) es muy reflectante. A pesar de eso, ¿se podrá obtener una transmisión importante a través de las dos barreras? La respuesta es **sí**. En efecto, si  $T_1 = T_2$  y  $\theta = 2\pi n$ , con  $n$  entero, entonces la doble barrera es totalmente permeable:

$$T(T_1 = T_2, \theta = 2\pi n) = 1 .$$

Lo anterior se conoce con el nombre de *transmisión resonante*.

Clásicamente, esto resulta muy asombroso, pues la condición de resonancia involucra información precisa sobre lo que ocurre al otro lado de una barrera casi impenetrable, y, sin embargo, se puede llegar a una transmisión del 100 % .

Si las dos barreras tienen reflectividades muy distintas, no es posible conseguir una transmisión resonante. Esto guarda relación con el hecho que los estados de un sistema unidimensional desordenado son localizados no hay posibilidad de transmisión por una barrera de potenciales no equivalentes dispuestos desordenadamente. Sólo hay transmisión si existe una unidad básica que se repite idénticamente o con una regularidad particular.

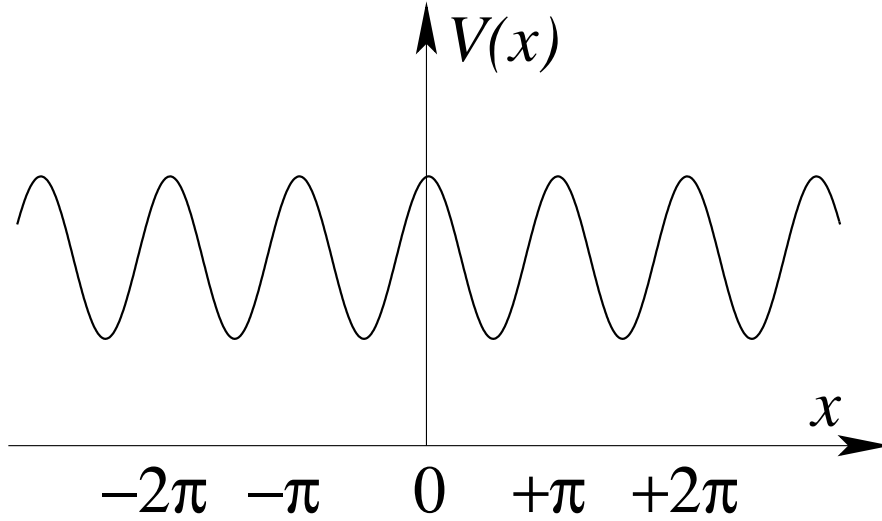


Figura 4.22: Potencial periódico.

## 4.6 Potenciales periódicos unidimensionales.

Consideremos un potencial unidimensional periódico

$$V(x) = V(x - a) \quad \forall x ,$$

donde  $a$  es una distancia fija. Un potencial de este tipo modela a un electrón en una red cristalina unidimensional con sus átomos separados una distancia  $a$ . (Ver figura 4.22)

### 4.6.1 Teorema de Bloch.

Consideremos una partícula de masa  $m$  en un potencial periódico unidimensional, la generalización a potenciales que son periódicos en dos o más dimensiones no presenta mayor dificultad.

En primer lugar, notemos que

$$\check{H}(\check{x} + a\check{\mathbf{1}}, \check{\mathbf{p}}) = \check{H}(\check{x}, \check{\mathbf{p}}) ,$$

es decir, el hamiltoniano  $\check{H}$  es invariante frente a una traslación  $x \rightarrow x + a$ . Se tiene, por lo tanto, que

$$\check{U}_a^{-1} \check{H}(\check{x}, \check{\mathbf{p}}) \check{U}_a = \check{H}(\check{x}, \check{\mathbf{p}}) ,$$

es decir,  $\check{H}$  conmuta con el operador de traslaciones  $\check{U}_a = \exp(-ia\check{\mathbf{p}}/\hbar)$ . Lo anterior nos permite elegir las autofunciones del problema de manera que sean autofunciones simultáneamente de  $\check{H}$  como de  $\check{U}_a$ .

¿Cuáles son las autofunciones de  $\check{U}_{-a}$ ? Sea  $|\Psi\rangle$  una autofunción de  $\check{U}_{-a}$  con autovalor  $\lambda$ , es decir

$$\check{U}_{-a}|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle .$$

Dado que  $\check{U}_{-a}$  es un operador unitario, sus autovalores poseen módulo 1, siendo del tipo

$$\lambda \equiv e^{ika} ,$$

esto define  $k$ . Luego tenemos

$$\check{U}_{-a} | \Psi \rangle = e^{ika} | \Psi \rangle .$$

Esta última relación, en la representación de coordenadas, queda

$$\begin{aligned} \langle x | \check{U}_{-a} | \Psi \rangle &= \langle x | (\check{U}_{-a} | \Psi \rangle) = e^{ika} \langle x | \Psi \rangle = e^{ika} \Psi(x) \\ \langle x | \check{U}_{-a} | \Psi \rangle &= (\langle x | \check{U}_{-a} | \Psi \rangle) = \langle x + a | \Psi \rangle = \Psi(x + a) \end{aligned}$$

combinandolas ecuaciones anteriores

$$\Psi(x + a) = e^{ika} \Psi(x) .$$

Definamos  $u_k(x)$  por

$$u_k(x) \equiv e^{-ikx} \Psi(x) . \quad (4.55)$$

Demostremos que entonces  $u_k(x)$  es una función periódica con período  $a$ . En efecto:

$$\begin{aligned} u_k(x + a) &= e^{-ik(x+a)} \Psi(x + a) \\ &= e^{-ikx} e^{-ika} e^{ika} \Psi(x) = e^{-ikx} \Psi(x) = u_k(x) . \end{aligned}$$

El vector de onda  $k$  es real, ya que, si no lo fuera, la onda divergería en una de las dos direcciones  $x \rightarrow \pm\infty$ , lo cual no es físicamente aceptable. De lo anterior concluimos:

**Teorema 4.1** Las autofunciones del Hamiltoniano correspondiente a una partícula en un potencial periódico siempre se pueden elegir de la forma  $u_k(x) \exp(ikx)$ , donde  $k$  es real y  $u_k(x)$  es un función periódica con el mismo período del potencial. La función  $u_k(x)$  se denomina *onda de Bloch*.

Note que las ondas de Bloch son funciones no localizadas, la probabilidad de encontrar la partícula está dispersa sobre toda la red.

Un comentario sobre los autovalores del operador  $\check{U}_{-a}$ : Todos los vectores de onda  $k + 2\pi na$ , con  $n \in \mathbb{Z}$ , dan origen al mismo autovalor  $e^{ika}$  de  $\check{U}_{-a}$ , o sea, los valores de  $k$  en el intervalo

$$-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a} ,$$

generan todos los autovalores posibles de  $\check{U}_{-a}$ .



### 4.6.2    Modelo de Kroning-Penney.

Existe un caso de un potencial periódico unidimensional que es relativamente fácil de tratar; es el modelo de Kroning-Penney. Este modelo consiste en un arreglo periódico de potenciales tipo delta:

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} W_0 \delta(x - na) ,$$

donde  $W_0$  tiene las dimensiones de energía por unidad de longitud. La periodicidad del potencial nos permite buscar soluciones del tipo (4.55). El problema se reduce a calcular las funciones periódicas  $u_k(x)$  y encontrar la relación entre  $k$  y la energía  $E$ .

En el intervalo  $0 < x < a$ , el potencial se anula y, por lo tanto, la solución general de la ecuación de Schrödinger es:

$$\Psi(x) = Ae^{iqx} + Be^{-iqx} ,$$

donde  $\hbar q = \sqrt{2mE}$ . Para la onda de Bloch se tiene, entonces:

$$u_k(x) = Ae^{i(q-k)x} + Be^{-i(q+k)x} . \quad (4.56)$$

Para determinar los coeficientes de expansión  $A$ ,  $B$ , imponemos las dos condiciones de borde usuales:

- (a) La función de onda  $\Psi(x)$  debe ser continua en los lugares  $na$ , ( $n \in \mathbb{Z}$ ). Esto implica que también  $u_k(x)$  debe ser continua en esos lugares, es decir:

$$u_k(\epsilon) - u_k(-\epsilon) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0 .$$

Pero

$$u_k(-\epsilon) = u_k(a - \epsilon)$$

de modo que

$$u_k(\epsilon) - u_k(a - \epsilon) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0 .$$

Usando la ecuación (4.56), la condición de continuidad queda

$$A + B = Ae^{i(q-k)a} + Be^{-i(q+k)a} . \quad (4.57)$$

- (b) La función de onda  $\Psi(x)$  debe ser solución de la ecuación de Schrödinger también sobre los puntos de la red, es decir,

$$\left( E + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dx^2} \right) \Psi(x) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} W_0 \delta(x - na) \Psi(x) .$$

Integrando esta ecuación sobre un pequeño intervalo  $-\epsilon < x < \epsilon$ , se encuentra

$$E \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \Psi(x) dx + \frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{d\Psi(x)}{dx} \Big|_{x=\epsilon} - \frac{d\Psi(x)}{dx} \Big|_{x=-\epsilon} \right] = W_0 \Psi(0) \quad (4.58)$$

Ahora bien:

$$\frac{d\Psi(x)}{dx} \Big|_{x=\epsilon} = iqAe^{iq\epsilon} - iqBe^{-iq\epsilon} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} iq(A - B) ,$$

y, aprovechando la periodicidad de  $u_k(x)$ :

$$\begin{aligned} \frac{d\Psi}{dx} \Big|_{x=-\epsilon} &= \frac{d}{dx} (u_k(x)e^{ikx}) \Big|_{x=-\epsilon} \\ &= \frac{d}{d(x-a)} (u_k(x-a)e^{ik(x-a)}) \Big|_{x=a-\epsilon} \\ &= \frac{d}{dx} (u_k(x)e^{ikx}e^{-ika}) \Big|_{x=a-\epsilon} \\ &= e^{-ika} \left( \frac{d\Psi(x)}{dx} \right)_{x=a-\epsilon} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} e^{-ika} iq (Ae^{iqa} - Be^{-iqa}) \end{aligned}$$

Además,

$$E \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \Psi(x) dx \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0 ,$$

y

$$\Psi(0) = A + B ,$$

luego (4.58) queda:

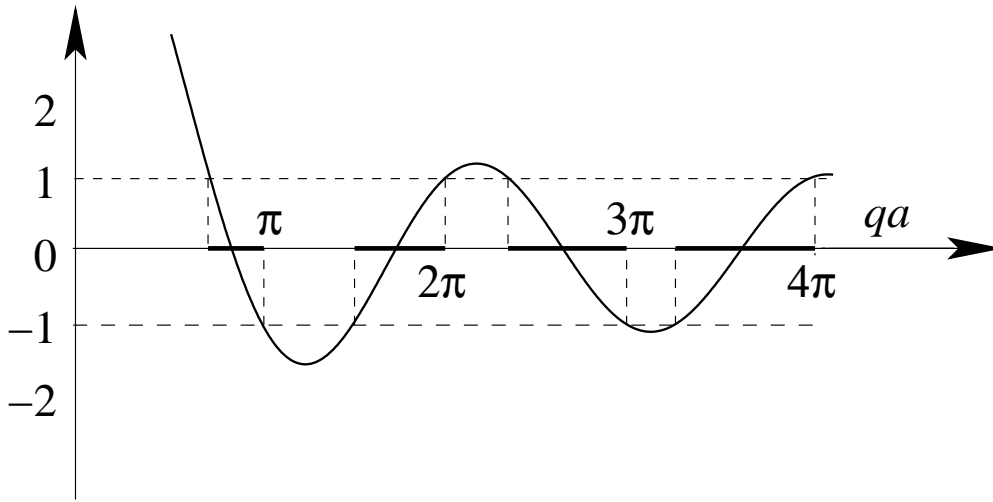
$$\frac{\hbar^2}{2m} iq (A - B - Ae^{i(q-k)a} + Be^{-i(q+k)a}) = W_0(A + B) . \quad (4.59)$$

Las condiciones de borde anteriores nos dan un sistema homogéneo de dos ecuaciones para los coeficientes  $A$  y  $B$ . De (4.57) se deduce que

$$B = A \frac{1 - e^{i(q-k)a}}{e^{-i(q+k)a} - 1} ,$$

y reemplazando este resultado en (4.59) se obtiene

$$\frac{A\hbar^2}{2m} iq \left[ 1 + \frac{1 - e^{i(q-k)a}}{1 - e^{-i(q+k)a}} - e^{i(q-k)a} - \frac{e^{-i(q+k)a} (1 - e^{i(q-k)a})}{1 - e^{-i(q+k)a}} \right] = W_0 A \left[ 1 - \frac{1 - e^{i(q-k)a}}{1 - e^{-i(q+k)a}} \right] ,$$


 Figura 4.23: Gráfico de la ecuación (4.60) para  $mW_0a/\hbar^2 = 3\pi/2$ .

de donde

$$A (e^{ika} - e^{-iqa} - e^{iqa} + e^{-ika}) = A \frac{mW_0}{\hbar^2 qi} (e^{iqa} - e^{-iqa}) ,$$

es decir,

$$\left( \cos ka - \cos qa - \frac{mW_0}{\hbar^2 q} \operatorname{sen} qa \right) A = 0$$

Puesto que nos interesan las soluciones no triviales, el coeficiente de  $A$  en la última ecuación debe anularse, lo que nos da la siguiente relación entre  $q$  y  $k$ , es decir, entre la energía y el vector de onda:

$$\cos ka = \cos qa + \frac{mW_0a}{\hbar^2} \frac{\operatorname{sen} qa}{qa} . \quad (4.60)$$

Esta ecuación puede ser resuelta gráficamente. Notando que para un dado valor de  $k$  el lado izquierdo no puede exceder el valor de uno, se obtiene que los valores de  $qa$  deben estar en las zonas “gruesas” del eje  $qa$  (ver figura).

Utilizando que  $E = \hbar^2 q^2/2m$  podemos graficar  $E$  en función de  $k$  en la zona “reducida”  $-\pi/a < k \leq \pi/a$ . Para un  $k$  dado existe una cantidad infinita de soluciones para  $E$ , las cuales se distribuyen en “bandas” con “brechas” (gaps) entre ellas. La figura 4.24 muestra las primeras dos bandas de energía  $E$  en función de  $k$ , para los mismos parámetros de la figura anterior. Este gráfico revela claramente la existencia de “gaps” o “zonas prohibidas” para la energía. Esta es una característica general que se observa en todos los potenciales periódicos, ya sea en una o tres dimensiones.

Estas bandas de energía, con sus zonas prohibidas, están estrechamente relacionadas con el hecho de que algunos cristales son conductores y otros son aisladores.

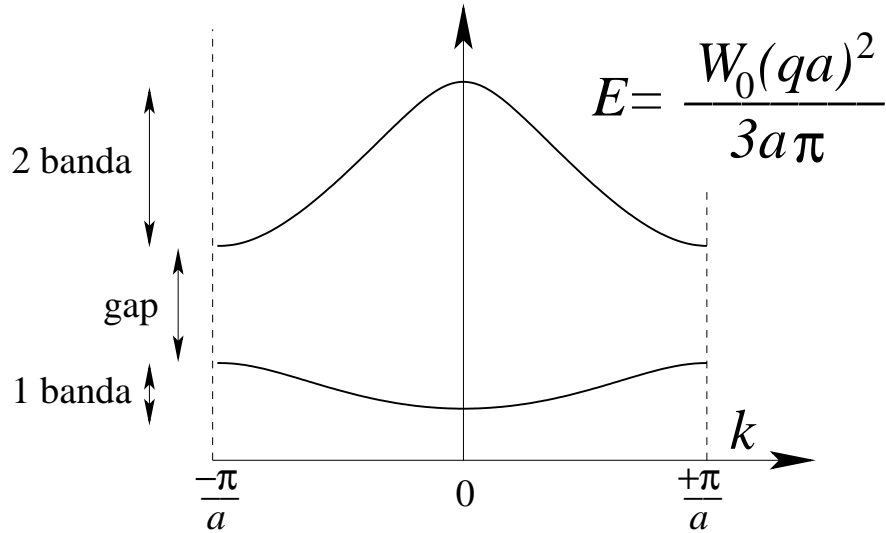


Figura 4.24: Bandas de energía del modelo de Kroning-Penney.

## 4.7 Efecto Aharanov-Bohm.

En esta sección analizaremos un problema que está relacionado con el efecto de Aharanov-Bohm.

### 4.7.1 Partícula en movimiento circular.

Consideremos una partícula de masa  $\mu$  y carga  $q$  que está constreñida a moverse en el plano  $x - y$  sobre una órbita circular de radio  $\rho_0$  alrededor del origen, pero que por lo demás está libre. Encontramos los autovalores de la energía y las correspondientes autofunciones.

Usemos coordenadas cilíndricas con  $\rho = \text{constante} = \rho_0$  y  $z = 0$ :

$$\Psi = \Psi(\rho, \phi, z) = \Psi(\phi) .$$

La ecuación de Schrödinger “libre”, en coordenadas polares, para  $\rho = \rho_0$ , viene dada por

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{\rho_0^2} \frac{\partial^2 \Psi(\phi)}{\partial \phi^2} + E \Psi(\phi) = 0 .$$

Dos soluciones linealmente independientes son:

$$\Psi^\pm(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(\pm i \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar} \rho_0 \phi\right) ,$$

soluciones que están normalizadas de acuerdo a

$$\int_0^{2\pi} |\Psi^\pm(\phi)|^2 d\phi = 1 .$$

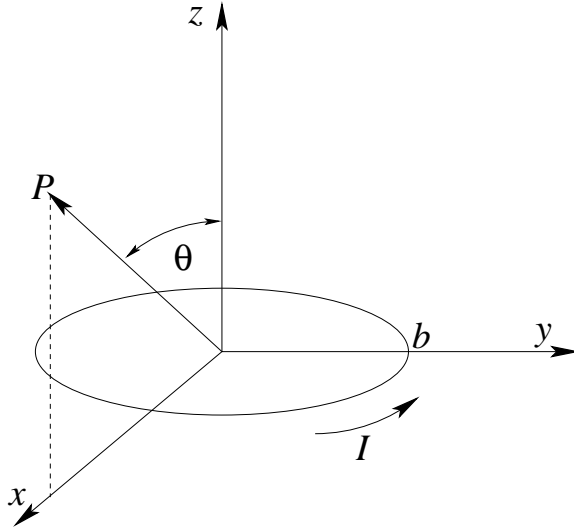


Figura 4.25: Espira circular de radio  $b$  por la cual circula una corriente  $I$ .

La condición de que la función  $\Psi(\phi)$  no sea multivaluada, da la cuantización de la energía:

$$\Psi(\phi + 2\pi) = \Psi(\phi) \implies \frac{\sqrt{2\mu E} \rho_0}{\hbar} = \text{entero} ,$$

es decir, el espectro de energías y autofunciones son

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{2\mu \rho_0^2}$$

y

$$\Psi_n^\pm(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm in\phi} .$$

### 4.7.2 Potencial vectorial magnético.

Introduzcamos ahora un campo magnético representado por el potencial vectorial:

$$\vec{A} = \frac{\Phi \hat{z} \times \vec{r}}{2\pi(\hat{z} \times \vec{r})^2} \quad (4.61)$$

y mostremos que el campo magnético  $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$  asociado a tal potencial vectorial corresponde aproximadamente al de un fino y largo solenoide con flujo  $\Phi$ , colocado a lo largo del eje  $\hat{z}$ . En la subsección siguiente estudiaremos el movimiento de una partícula cargada en movimiento circular, en la presencia de tal campo.

El potencial magnético  $\vec{A}$  en un punto  $P = (r, \theta, \phi)$ , producida por una espira de radio  $b$ , por la cual circula una corriente  $I$ , para  $r \gg b$ , es (ver figura 4.25)

$$\vec{A} = \vec{A}(r, \theta) = A_\phi(r, \theta) \hat{\phi} ,$$

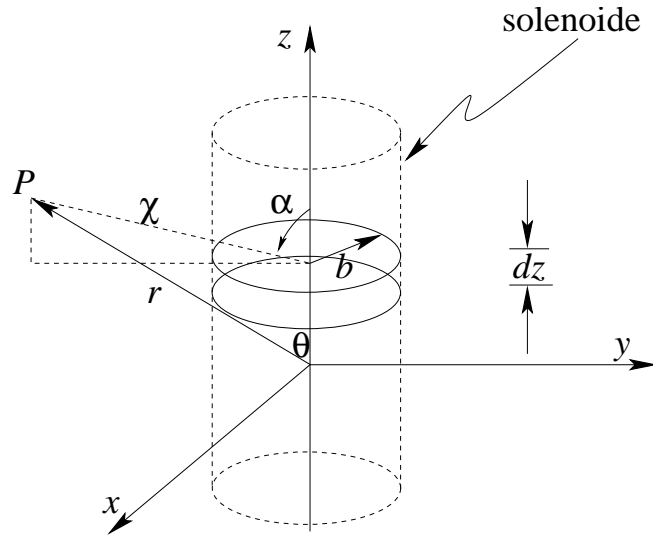


Figura 4.26: Solenoide, de longitud infinita, con  $n$  vueltas por unidad de longitud, por la cual circula una corriente  $I$ . Note que  $r \sin \theta = \chi \sin \alpha$ .

con

$$A_{\phi}(r, \theta) = \frac{I\pi b^2}{c} \cdot \frac{r \sin \theta}{(b^2 + r^2 + 2br \sin \theta)^{3/2}}.$$

A partir de este resultado, para un solenoide que tiene  $n$  vueltas por unidad de longitud (ver figura 4.26), se deduce que

$$A_{\phi}(r, \theta) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{I\pi b^2}{c} n \frac{\chi \sin \alpha}{(b^2 + 2b\chi \sin \alpha + \chi^2)^{3/2}} dz.$$

El campo magnético generado por tal solenoide es

$$\vec{B} = \begin{cases} \frac{4\pi In}{c} \hat{z} & \text{en el interior} \\ 0 & \text{fuera del solenoide} \end{cases}.$$

Para el flujo magnético  $\Phi$  se encuentra el resultado:

$$\Phi = \pi b^2 B = \frac{4\pi^2 b^2 n}{c},$$

es decir,

$$\frac{I\pi b^2 n}{c} = \frac{\Phi}{4\pi}.$$

Con esta expresión, para el potencial  $\vec{A}$  se obtiene

$$A_{\phi}(r, \theta) = \frac{\Phi}{4\pi} r \sin \theta \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{(b^2 + r^2 + z^2 + 2br \sin \theta - 2rz \cos \theta)^{3/2}}.$$

En el límite  $b \rightarrow 0$ , es decir, para un solenoide muy fino, queda

$$\begin{aligned} A_\phi(r, \theta) &= \frac{\Phi r \operatorname{sen} \theta}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{(r^2 + z^2 - 2rz \cos \theta)^{3/2}} \\ &= \frac{\Phi r \operatorname{sen} \theta}{4\pi} \cdot \frac{2}{r^2 \operatorname{sen}^2 \theta} , \end{aligned}$$

es decir,

$$\vec{A} = \frac{\Phi}{2\pi} \frac{\hat{z} \times \vec{r}}{(\hat{z} \times \vec{r})^2} .$$

Así, hemos demostrado que el potencial magnético dado por la ecuación (4.61) da origen a un campo magnético que es nulo en todas partes, excepto sobre el eje  $\hat{z}$ .

### 4.7.3 Partícula cargada en un campo potencial magnético.

Volvamos al problema de la primera subsección, es decir, consideremos nuevamente el movimiento de una partícula de masa  $\mu$ , restringida a moverse sobre un círculo de radio  $\rho_0$ . Adicionalmente, supongamos que la partícula posee una carga  $q$  y que normal a la espira, por el centro, pasa un solenoide del tipo analizado en la subsección anterior.

Si bien, en todos los lugares por donde se encuentra la espira, el campo magnético  $\vec{B}$  es nulo, no lo es el potencial magnético.

Es nuestro objetivo determinar el espectro de energía y mostrar que éste coincide con el espectro que se obtuvo para  $\Phi = 0$  (primera subsección de la presente sección) si el flujo  $\Phi$  toma ciertos valores cuantizados.

Al moverse una partícula cargada en presencia de un potencial magnético  $\vec{A}$ , el momento  $\vec{p}$  en el Hamiltoniano debe ser reemplazado por

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} + \frac{q}{c} \vec{A} ,$$

resultado bien conocido de la mecánica clásica.

En lugar de  $-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2$ , en la ecuación de Schrödinger debe introducirse el operador

$$\frac{1}{2\mu} \left( -i\hbar \vec{\nabla} + \frac{q}{c} \vec{A} \right)^2 .$$

La ecuación de Schrödinger que debemos resolver es por lo tanto

$$\frac{1}{2\mu} \left( -i\hbar \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{q}{c} A_\phi \right)^2 \Psi(\phi) = E \Psi(\phi) .$$

En el plano  $x - y$ , a una distancia  $\rho_0$  del origen, el potencial magnético es

$$A_\phi = \frac{\Phi}{2\pi \rho_0} ,$$

luego la ecuación de Schrödinger queda

$$\frac{1}{2\mu} \left( -i\hbar \frac{1}{\rho_0} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{q\Phi}{2\pi\rho_0 c} \right)^2 \Psi(\phi) = E\Psi(\phi) ,$$

o sea,

$$\left[ \frac{1}{2\mu} \left( -\frac{\hbar^2}{\rho_0^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} - i\hbar \frac{q\Phi}{\pi\rho_0^2 c} \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{q^2\Phi^2}{4\pi^2\rho_0^2 c^2} \right) - E \right] \Psi(\phi) = 0 .$$

Esta ecuación la reescribimos de la forma

$$\alpha \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \phi^2} + \beta \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} + \gamma \Psi = 0 , \quad (4.62)$$

con

$$\alpha = -\frac{\hbar^2}{2\mu\rho_0^2} ,$$

$$\beta = -\frac{i\hbar q\Phi}{2\pi\mu\rho_0^2 c} ,$$

y

$$\gamma = \frac{q^2\Phi^2}{8\pi^2\rho_0^2 c^2 \mu} - E .$$

Busquemos soluciones del tipo

$$\Psi(\phi) = e^{\Gamma\phi} .$$

Reemplazando este *ansatz* en (4.62) se obtiene la relación que debe satisfacer  $\Gamma$ :

$$\alpha\Gamma^2 + \beta\Gamma + \gamma = 0 .$$

Resolviendo la ecuación cuadrática se obtienen dos valores para  $\Gamma$ :

$$\Gamma = -\frac{i}{\hbar} \left( \frac{q\Phi}{2\pi c} \mp \rho_0 \sqrt{2\mu E} \right) .$$

La función de onda para el problema es, por lo tanto,

$$\Psi^\pm(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \left( \frac{q\Phi}{2\pi c} \mp \rho_0 \sqrt{2\mu E} \right) \phi \right] .$$

La condición de que  $\Psi$  sea monovaluada (i.e.,  $\Psi^\pm(\phi + 2\pi) = \Psi^\pm(\phi)$ ) nos da ahora la cuantización de la energía:

$$\frac{q\Phi}{2\pi\hbar c} \mp \rho_0 \sqrt{\frac{2\mu E_m}{\hbar^2}} = m , \quad \text{con } m \in \mathbb{Z}$$



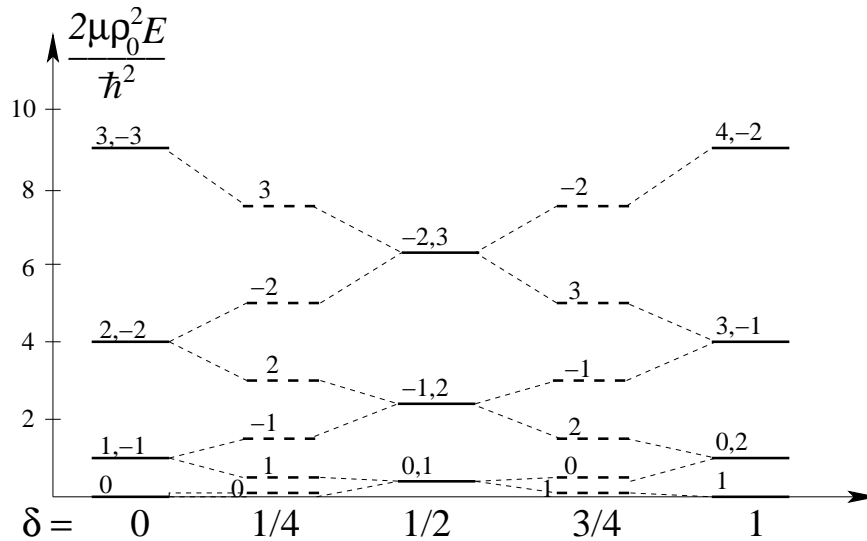


Figura 4.27: Espectro de energía para diversas intensidades del flujo magnético.

es decir,

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2\mu\rho_0^2} \left( m - \frac{q\Phi}{2\pi\hbar c} \right)^2, \quad \text{con } m \in \mathbb{Z}.$$

La función de onda correspondiente viene dada por

$$\Psi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi}.$$

Si

$$\frac{q\Phi}{2\pi\hbar c} = \delta = \text{entero},$$

entonces el espectro coincide con el que se obtuvo en la primera parte para  $\Phi = 0$ . Caractericemos el flujo  $\Phi$  con el parámetro de intensidad  $\delta$ , es decir, escribamos

$$\Phi = \Phi_\delta = \frac{2\pi\hbar c\delta}{q}.$$

El espectro tiene degeneración doble si  $\delta$  es semientero. Con  $\delta$  entero el espectro también es doblemente degenerado, con la excepción del estado fundamental (ver figura 4.27). En los demás casos el espectro es no degenerado.

Note que los niveles de energía dependen de la intensidad del campo magnético  $\vec{B}$  al cual la partícula **no** está expuesta. Contrariamente a lo que ocurre en la electrodinámica clásica, donde los potenciales eléctricos y magnéticos son sólo magnitudes auxiliares que ayudan a una formulación más elegante de la teoría, en la mecánica cuántica el potencial magnético  $\vec{A}$  genera un efecto observable, efecto de Aharanov-Bohm.

Para un visión sobre la verificación experimental del efecto de Aharanov-Bohm recomendamos leer el artículo *Quantum Interference and the Aharanov-Bohm Effect*, aparecido en Scientific American, Abril 1989.

## 4.8 Problemas

4-1) Verifique la siguiente expresión numéricamente

$$\sum_{\substack{n>0 \\ n \text{ impar}}} \frac{1}{(n^2 - 4)^2} = \frac{\pi^2}{64}.$$

4-2) Considere el estado  $\Psi = (\phi_0 + \phi_1)/\sqrt{2}$  en  $t = 0$ . Encuentre cómo evoluciona  $\Psi$  temporalmente y demuestre que es una función periódica del tiempo con período  $T = h/(E_1 - E_0)$ . Grafique  $|\Psi(x, t)|^2$  para  $t = 0, \pi/4$  y  $\pi/2$ . Interprete semiclásicamente la evolución temporal como un “rebote”; calcule el período  $T$  y muestre que, en orden de magnitud, coincide con el de una partícula clásica de energía  $E = \langle \hat{\mathbf{H}} \rangle$ . Usted concluirá de este ejercicio que un factor de fase en una superposición  $\psi_0 + e^{i\alpha}\psi_1$  es altamente relevante:  $\psi_0 + e^{i\alpha}\psi_1 \neq \psi_0 + \psi_1$ . Aunque un factor global de fase es irrelevante:  $\Psi$  y  $e^{i\beta}\Psi$  describen al mismo estado.

4-3) Repita el análisis realizado para el potencial coulombiano en la subsección 4.2.1 para el oscilador armónico.

4-4) Verifique que si  $\Phi(t = 0) = \Phi_{\nu R}(x)$ , entonces  $\Phi(t)$  se alterna periódicamente entre los estados  $\Phi_{\nu R}$  y  $\Phi_{\nu L}$ , con un tiempo de intercambio

$$\tau_\nu = \frac{\hbar\pi}{E_{\nu-} - E_{\nu+}}.$$

4-5) ) Analice el potencial

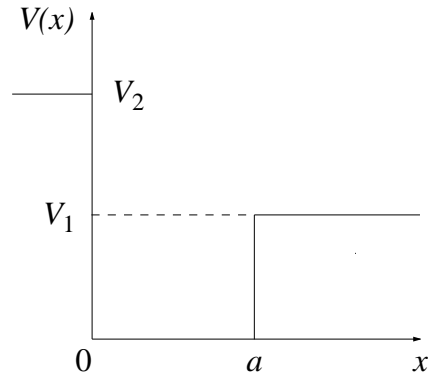
$$V(x) = \begin{cases} +\infty & \text{si } |x| > a/2 \\ W_0 \delta(x) & \text{si } |x| < a/2 \end{cases}$$

Ponga  $W_0 = \hbar^2 Q/m$  y tome el límite  $a \rightarrow \infty$ . Haga ver que se obtiene un espectro similar al de la figura 4.10. Interprete sus resultados analizando las autofunciones de cada doblete  $\Phi_{\nu\pm}(x)$ .

4-6) ) Reproducir los resultados para el potencial delta atractivo usando la solución del pozo cuadrado con  $a \rightarrow 0$ ,  $V_0 \rightarrow \infty$  de modo que  $aV_0 = \text{constante}$ . Muestre que sólo aparece una solución y que ésta es par.

4-7) Una partícula (en dos dimensiones) está encerrada en una caja rectangular de paredes impenetrables, dentro de la cual se puede mover libremente. Encuentre las autofunciones y autovalores del Hamiltoniano del sistema. ¿Qué se puede afirmar acerca de la degeneración de los autovalores?

4-8) Encuentre las autofunciones y autovalores del operador de Hamilton para el siguiente potencial:



4-9) Estudie los estados ligados y no ligados del potencial:

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & \text{si } |x| < a \\ 0 & \text{si } |x| > a \end{cases} .$$

Haga el límite  $V_0 \rightarrow \infty$ ,  $a \rightarrow 0$ , con  $2V_0a = Vx_0$ , y compare con el resultado para un potencial delta atractivo,  $V(x) = -Vx_0\delta(x)$ .

4-10) Considere el pozo de potencial, nulo en el intervalo  $[0, a]$ , infinito en el resto del eje real.

(a) Mostrar que para una partícula en este pozo infinito valen las siguientes relaciones, en el  $n$ -ésimo estado:

$$\langle x \rangle = \frac{1}{2}a ,$$

$$(\Delta x)^2 = \frac{a^2}{12} \left( 1 - \frac{6}{n^2\pi^2} \right) .$$

¿Cómo se entiende que la probabilidad de encontrar la partícula en  $a/2$  sea nula para los estados con  $n$  par?

(b) Determine la función distribución de probabilidad de momentum para una partícula en el  $n$ -ésimo estado.

# Capítulo 5

## El oscilador armónico.

En muchos problemas de la Física se está interesado en analizar problemas para los cuales el sistema sólo está levemente fuera del equilibrio. En ese caso el problema generalmente se puede describir como un conjunto de osciladores independientes. Lo último es cierto en la Mecánica Clásica como también en la Mecánica Cuántica, que es el formalismo que debe usarse para estudiar las oscilaciones de núcleos, moléculas y sólidos.

En este capítulo consideraremos la solución cuántica al problema del oscilador armónico unidimensional, cuyo Hamiltoniano está dado por:

$$\check{H} = \check{H}(\check{x}, \check{p}) = \frac{\check{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\check{x}^2 \quad (5.1)$$

### 5.1 Energía de punto cero.

En esta sección estimaremos la mínima energía que puede poseer un oscilador armónico de acuerdo al principio de incerteza. Para ello notemos primeramente que

$$(\Delta x)^2 = \langle \check{x}^2 \rangle - \langle \check{x} \rangle^2 = \langle \check{x}^2 \rangle, \quad (5.2)$$

y

$$(\Delta p)^2 = \langle \check{p}^2 \rangle - \langle \check{p} \rangle^2 = \langle \check{p}^2 \rangle, \quad (5.3)$$

pues, por simetría,  $\langle \check{x} \rangle = \langle \check{p} \rangle = 0$ .

De acuerdo al Principio de Incerteza, siempre se tiene que

$$(\Delta x)^2(\Delta p)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}.$$

Supongamos que la función de onda para el estado fundamental es tal que en la última ecuación se puede usar el símbolo de igualdad, o sea, que se tiene

$$\langle \check{x}^2 \rangle \langle \check{p}^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}. \quad (5.4)$$

Evaluemos el valor esperado de la energía. A partir de (5.1), se obtiene

$$\langle E \rangle = \langle \check{\mathbf{H}} \rangle = \frac{1}{2m} \langle \check{\mathbf{p}}^2 \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle \check{\mathbf{x}}^2 \rangle .$$

Luego, usando (5.4) se obtiene

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar^2}{8m \langle \check{\mathbf{x}}^2 \rangle} + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle \check{\mathbf{x}}^2 \rangle .$$

Minimizamos  $\langle E \rangle$  con respecto a  $\langle \check{\mathbf{x}}^2 \rangle$ :

$$\frac{d\langle E \rangle}{d\langle \check{\mathbf{x}}^2 \rangle} = -\frac{\hbar^2}{8m \langle \check{\mathbf{x}}^2 \rangle^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 = 0 .$$

El valor de  $\langle \check{\mathbf{x}}^2 \rangle$  que minimiza  $\langle E \rangle$  es, por lo tanto,

$$\langle \check{\mathbf{x}}^2 \rangle_{\min}^2 = \frac{\hbar^2}{4m^2 \omega^2} .$$

Con este valor se obtiene para  $\langle E \rangle_{\min}$  el resultado

$$\langle E \rangle_{\min} = \frac{1}{2} \hbar \omega .$$

Como el valor esperado de la energía de un estado estacionario coincide con la autoenergía de tal estado, se tiene que

$$E_{\min} = \frac{1}{2} \hbar \omega ,$$

resultado que, como veremos, coincide con el resultado exacto.

Es importante notar que la energía del estado fundamental del oscilador armónico no es nula. Esta energía mínima, que ningún oscilador puede perder, se llama *energía de punto cero*.

### 5.1.1 Regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld.

Antes de desarrollar formalmente el problema del oscilador armónico, evaluemos el resultado que arroja la *regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld* para el espectro de energía.

La Regla de Cuantización de Bohr-Sommerfeld exige que

$$\oint p(x) dx = nh , \quad \text{con } n \in \mathbb{N}_0 . \quad (5.5)$$

Para el momento  $p$ , en función de la coordenada  $x$ , se tiene la expresión

$$p(x) = \pm \sqrt{2mE - m^2 \omega^2 x^2} .$$

Luego

$$\oint p(x) dx = 2 \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{2mE - m^2 \omega^2 x^2} dx ,$$

donde  $x_0$  es la amplitud clásica del oscilador:

$$x_0 = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}} .$$

Para evaluar la integral realizamos el cambio de variable  $u = \sqrt{\frac{m}{2E}} \omega x$ . Se obtiene

$$\oint p(x) dx = 4\sqrt{2mE} \sqrt{\frac{2E}{m}} \frac{1}{\omega} \int_0^1 \sqrt{1-u^2} du = \frac{2\pi E}{\omega} .$$

Combinando este resultado con (5.5) queda

$$\frac{2\pi E_n}{\omega} = n2\pi\hbar ,$$

es decir,

$$E_n = n\hbar\omega , \quad \text{con } n = 0, 1, 2, \dots .$$

Esta expresión da el correcto espaciamiento de los niveles del oscilador armónico, pero erróneamente la energía del punto cero.

## 5.2 Los operadores $\check{a}$ , $\check{a}^\dagger$ y $\check{n}$ .

Comenzamos el tratamiento formal del oscilador armónico introduciendo variables adimensionales. Definimos los operadores  $\check{\xi}$ ,  $\check{\pi}$  y el escalar  $\sigma$  por

$$\check{\xi} \equiv \frac{\check{x}}{\sqrt{\hbar/m\omega}} , \quad \check{\pi} \equiv \frac{\check{p}}{\sqrt{m\omega\hbar}}$$

y

$$\sigma + \frac{1}{2} \equiv \frac{E}{\hbar\omega} .$$

Note que  $\sqrt{\hbar/m\omega}$  y  $\sqrt{m\omega\hbar}$  son la amplitud máxima y el momento máximo que tiene un oscilador clásico si su energía es  $E = \frac{1}{2}\hbar\omega$ . El conmutador de estos operadores viene dado por

$$[\check{\xi}, \check{\pi}] = \left[ \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \check{x}, \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} \check{p} \right] = \frac{1}{\hbar} [\check{x}, \check{p}] = \frac{i\hbar}{\hbar} = i .$$

Con estas definiciones el Hamiltoniano para el oscilador armónico queda expresado por

$$\check{H}(\check{\xi}, \check{\pi}) = \frac{1}{2}\hbar\omega \left( \check{\pi}^2 + \check{\xi}^2 \right) ,$$

mientras que la ecuación de Schrödinger tiempo independiente,  $\check{H}|\Psi_E\rangle = E|\Psi_E\rangle$ , queda

$$\frac{1}{2} \left( \check{\pi}^2 + \check{\xi}^2 \right) |\Psi_\sigma\rangle = \left( \sigma + \frac{1}{2} \right) |\Psi_\sigma\rangle .$$

Introduzcamos el operador  $\check{\mathbf{a}}$  definido por

$$\check{\mathbf{a}} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\check{\xi} + i\check{\pi}) .$$

Su hermítico conjugado es

$$\check{\mathbf{a}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\check{\xi} + i\check{\pi})^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\check{\xi}^\dagger - i\check{\pi}^\dagger) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\check{\xi} - i\check{\pi}) ,$$

ya que  $\check{\xi}$  y  $\check{\pi}$  son operadores autohermíticos.

Si  $\check{\xi}$  y  $\check{\pi}$  fuesen variables clásicas, sería natural la factorización

$$\frac{1}{2} (\check{\pi}^2 + \check{\xi}^2) = \check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} .$$

Sin embargo, debido a que los operadores momento y posición no conmutan hay un término correctivo adicional:

$$\check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} = \frac{1}{2} \left( \check{\pi}^2 + \check{\xi}^2 + i [\check{\xi}, \check{\pi}] \right) ,$$

de modo que

$$\frac{1}{2} (\check{\pi}^2 + \check{\xi}^2) = \check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} + \frac{1}{2} .$$

Conviene definir el operador  $\check{\mathbf{n}}$  por

$$\boxed{\check{\mathbf{n}} = \check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} .}$$

Este sí es un operador autohermítico (dado un operador  $\check{\mathbf{A}}$  arbitrario, el producto  $\check{\mathbf{A}}^\dagger \check{\mathbf{A}}$  es siempre autohermítico). Con esta definición el Hamiltoniano toma la forma

$$\check{\mathbf{H}} = \hbar\omega \left( \check{\mathbf{n}} + \frac{1}{2} \right) .$$

Para completitud, escribamos también las relaciones inversas para los operadores  $\check{\xi}$  y  $\check{\pi}$ , es decir, estos últimos en términos de los operadores  $\check{\mathbf{a}}$  y  $\check{\mathbf{a}}^\dagger$ :

$$\check{\xi} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\check{\mathbf{a}} + \check{\mathbf{a}}^\dagger)$$

y

$$\check{\pi} = \frac{1}{i\sqrt{2}} (\check{\mathbf{a}} - \check{\mathbf{a}}^\dagger) .$$

Como  $\check{\mathbf{a}}^\dagger \neq \check{\mathbf{a}}$  se tiene que  $\check{\mathbf{a}}$  no es autohermítico y, por consiguiente, no es un operador asociado a un observable.

Usando el operador  $\check{\mathbf{n}}$  y la definición de  $\sigma$ , la ecuación de Schrödinger queda de la forma:

$$\check{\mathbf{n}}|\Psi_\sigma\rangle = \sigma|\Psi_\sigma\rangle.$$

Evaluemos el conmutador  $[\check{\mathbf{a}}, \check{\mathbf{a}}^\dagger]$ :

$$\begin{aligned} [\check{\mathbf{a}}, \check{\mathbf{a}}^\dagger] &= \frac{1}{2} [\check{\xi} + i\check{\pi}, \check{\xi} - i\check{\pi}] \\ &= \frac{1}{2} [\check{\xi}, -i\check{\pi}] + \frac{1}{2} [i\check{\pi}, \check{\xi}] \\ &= -i [\check{\xi}, \check{\pi}] = \check{\mathbf{1}}. \end{aligned}$$

### Proposición 5.1

$$\check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle \propto |\Psi_{\sigma-1}\rangle$$

y

$$\check{\mathbf{a}}^\dagger|\Psi_\sigma\rangle \propto |\Psi_{\sigma+1}\rangle.$$

En el lenguaje técnico se dice que  $\check{\mathbf{a}}$  es el operador de *bajada* y  $\check{\mathbf{a}}^\dagger$  es el operador de *subida*.

### Demostración

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{n}}(\check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle) &= \check{\mathbf{a}}^\dagger\check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle = (\check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{a}}^\dagger - \check{\mathbf{1}})\check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle \\ &= \check{\mathbf{a}}(\check{\mathbf{a}}^\dagger\check{\mathbf{a}})|\Psi_\sigma\rangle - \check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle = \check{\mathbf{a}}(\check{\mathbf{n}} - \check{\mathbf{1}})|\Psi_\sigma\rangle \\ &= \check{\mathbf{a}}(\sigma - 1)|\Psi_\sigma\rangle, \end{aligned}$$

es decir,

$$\check{\mathbf{n}}(\check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle) = (\sigma - 1)(\check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle).$$

Luego  $\check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle$  es proporcional a  $|\Psi_{\sigma-1}\rangle$ , pues, para el oscilador armónico, el espectro es **no** degenerado. Esta última relación enseña que, si  $\sigma$  es autovalor de  $\check{\mathbf{n}}$ , en general  $\sigma - 1$  también será autovalor de  $\check{\mathbf{n}}$ , a menos que  $\check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle = 0$ . En forma análoga se demuestra que

$$\check{\mathbf{a}}^\dagger|\Psi_\sigma\rangle \propto |\Psi_{\sigma+1}\rangle.$$

**Proposición 5.2** Se cumple que  $\sigma \geq 0$ , es decir,  $E \geq \frac{1}{2}\hbar\omega$ .

**Demostración**  $0 \leq (\langle\Psi_\sigma|\check{\mathbf{a}}^\dagger)(\check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle) = \langle\Psi_\sigma|\check{\mathbf{n}}|\Psi_\sigma\rangle = \sigma$ .

**Corolario:** Sea  $|\Psi_\sigma\rangle$  un autoestado para el oscilador armónico, entonces la serie  $|\Psi_\sigma\rangle$ ,  $\check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle$ ,  $\check{\mathbf{a}}^2|\Psi_\sigma\rangle$ , ... debe terminar, o sea,  $\exists \sigma_0 \geq 0$  tal que

$$\check{\mathbf{a}}|\Psi_{\sigma_0}\rangle = 0.$$

En otras palabras, existe un estado fundamental un autoestado con energía mínima, ver figura 5.1. Una vez determinado  $\sigma_0$ , sabemos (al aplicar  $\check{\mathbf{a}}^\dagger$ ) que el espectro de  $\check{\mathbf{n}}$  será  $\sigma_0$ ,  $\sigma_0 + 1$ ,  $\sigma_0 + 2$ , ... Otro autovalor de  $\check{\mathbf{n}}$  llevaría a la violación del carácter positivo de  $\check{\mathbf{n}}$ , como se ve al aplicar reiteradamente el operador de bajada  $\check{\mathbf{a}}$ .



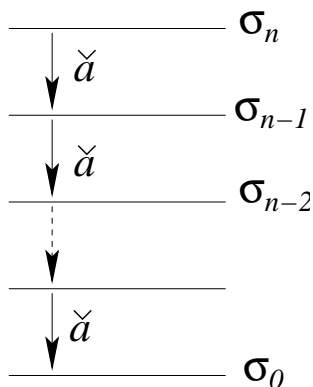


Figura 5.1: Una aplicación sucesiva de  $\check{a}$  a un estado lleva al estado fundamental.

**Proposición 5.3**  $\sigma_0 = 0$ .

**Demostración** Como  $\check{a}|\Psi_{\sigma_0}\rangle = 0$ , se tiene que

$$\check{n}|\Psi_{\sigma_0}\rangle = \check{a}^\dagger \check{a}|\Psi_{\sigma_0}\rangle = 0.$$

Por otra parte,

$$\check{n}|\Psi_{\sigma_0}\rangle = \sigma_0|\Psi_{\sigma_0}\rangle,$$

luego  $\sigma_0 = 0$ .

De las proposiciones anteriores se deduce:

**Corolario:** El autovalor  $\sigma$  de la ecuación  $\check{n}|\Psi_\sigma\rangle = \sigma|\Psi_\sigma\rangle$ , es un entero no negativo, o sea,

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \text{ con } n = 0, 1, 2, \dots$$

Note que el estado fundamental tiene energía  $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ , resultado que coincide con el obtenido en la primera sección de este capítulo usando el Principio de Incerteza.

**Notación:** A  $\sigma$ , por ser un entero, de aquí en adelante lo denotaremos por  $n$ , mientras que para los autoestados  $|\Psi_\sigma\rangle$  usaremos la notación  $|n\rangle$ , con  $n = 0, 1, 2, \dots$

De esta manera, la ecuación de autovalores queda

$$\check{n}|n\rangle = n|n\rangle.$$

Sabemos que  $\check{a}|n\rangle$  es proporcional a  $|n-1\rangle$ . Evaluemos la constante de proporcionalidad, es decir, escribamos

$$\check{a}|n\rangle = b_n|n-1\rangle, \quad b_n \in \mathbb{C}.$$

y evaluemos  $b_n$ . Se tiene

$$\langle n | \check{\mathbf{n}} | n \rangle = \langle n | n | n \rangle = n \langle n | n \rangle = n .$$

Por otra parte,

$$\begin{aligned} \langle n | \check{\mathbf{n}} | n \rangle &= \langle n | \check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} | n \rangle = (\check{\mathbf{a}} | n \rangle)^\dagger (\check{\mathbf{a}} | n \rangle) \\ &= b_n^* b_n \langle n-1 | n-1 \rangle = |b_n|^2 . \end{aligned}$$

De estas ecuaciones se deduce que  $|b_n|^2 = n$ , o sea,

$$b_n = \sqrt{n} e^{i\beta_n} , \quad \text{con } \beta_n \in \mathbb{R} .$$

Eligiendo los  $b_n$  de manera que sean reales positivos, se obtiene finalmente

$$\boxed{\check{\mathbf{a}} | n \rangle = \sqrt{n} | n-1 \rangle} . \quad (5.6)$$

Repitamos lo mismo pero para el operador  $\check{\mathbf{a}}^\dagger$ . Escribamos

$$\check{\mathbf{a}}^\dagger | n \rangle = c_n | n+1 \rangle , \quad \text{con } c_n \in \mathbb{C} .$$

y evaluemos  $c_n$ . Se tiene

$$\begin{aligned} n &= \langle n | \check{\mathbf{n}} | n \rangle = \langle n | \check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} | n \rangle \\ &= \langle n | (\check{\mathbf{a}} \check{\mathbf{a}}^\dagger - \check{\mathbf{1}}) | n \rangle \\ &= (\check{\mathbf{a}}^\dagger | n \rangle)^\dagger (\check{\mathbf{a}}^\dagger | n \rangle) - \langle n | n \rangle \\ &= c_n^* c_n \langle n+1 | n+1 \rangle - 1 , \end{aligned}$$

o sea,

$$|c_n|^2 = n+1 .$$

Eligiendo nuevamente los coeficientes de manera que sean reales y positivos, queda

$$c_n = \sqrt{n+1} ,$$

obteniéndose finalmente

$$\boxed{\check{\mathbf{a}}^\dagger | n \rangle = \sqrt{n+1} | n+1 \rangle} . \quad (5.7)$$

Otra manera de obtener este último resultado es la siguiente: Sabemos que (ver ecuación (5.6))

$$(\check{\mathbf{a}})_{mn} \equiv \langle m | \check{\mathbf{a}} | n \rangle = \delta_{m,n-1} \sqrt{n} .$$

Esta relación implica que

$$(\check{\mathbf{a}}^\dagger)_{m,n} = (\check{\mathbf{a}})_{n,m}^* = \delta_{n,m-1} \sqrt{m} = \delta_{m,n+1} \sqrt{n+1} ,$$

es decir,

$$\check{a}^\dagger |n\rangle = \sum_m (a^\dagger)_{m,n} |m\rangle = \sum_m \delta_{m,n+1} \sqrt{n+1} |m\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle .$$

El Hamiltoniano en términos de  $\check{n}$  queda

$$\check{H} = \hbar\omega \left( \check{a}^\dagger \check{a} + \frac{1}{2} \right) = \left( \check{n} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega .$$

Así pues,  $\check{n}$  es el *operador de número* (o de cantidad) y da el número de cuantos  $\hbar\omega$  del estado  $|n\rangle$ . En la teoría cuántica de campos:

- $\check{n}$  cuenta el número de fotones que posee un cierto modo.
- $\check{a}$  aniquila un fotón (operador de aniquilación).
- $\check{a}^\dagger$  crea un fotón (operador de creación).

Evaluemos los conmutadores de  $\check{n}$  con  $\check{a}$  y  $\check{a}^\dagger$ . Se tiene:

$$\begin{aligned} [\check{n}, \check{a}] &= \check{n}\check{a} - \check{a}\check{n} = \check{a}^\dagger \check{a}\check{a} - \check{a}\check{a}^\dagger \check{a} \\ &= (\check{a}\check{a}^\dagger - \check{1})\check{a} - \check{a}\check{a}^\dagger \check{a} = -\check{a} . \end{aligned}$$

De manera análoga se encuentra que

$$[\check{n}, \check{a}^\dagger] = \check{a}^\dagger .$$

La relación (5.7) permite obtener las funciones de estado en función del estado base  $|0\rangle$ , el estado fundamental  $|0\rangle$  es también conocido como “vacío” de excitaciones. En efecto, aplicando en forma consecutiva  $\check{a}^\dagger$  sobre el estado fundamental se encuentra

$$\begin{aligned} (\check{a}^\dagger)^n |0\rangle &= (\check{a}^\dagger)^{n-1} \sqrt{1} |1\rangle \\ &= (\check{a}^\dagger)^{n-2} \sqrt{1} \sqrt{2} |2\rangle \\ &= (\check{a}^\dagger)^{n-3} \sqrt{1 \cdot 2 \cdot 3} |3\rangle \\ &\vdots \\ &= \sqrt{n!} |n\rangle , \end{aligned}$$

es decir

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\check{a}^\dagger)^n |0\rangle .$$

### 5.3 Función de onda del estado fundamental.

En la sección anterior se encontró el espectro de energía del oscilador. Encontremos ahora las funciones de estado para el oscilador armónico en la representación de posición. Comenzamos el análisis encontrando la función de onda  $\langle \xi | 0 \rangle = \Psi_0(\xi)$  del estado fundamental.

Escribamos la ecuación (5.6), pero con  $n = 0$ :

$$\check{\mathbf{a}}|0\rangle = 0.$$

Realizando el producto interno con el “bra”  $\langle \xi |$ , se obtiene

$$\begin{aligned} \langle \xi | \check{\mathbf{a}} | 0 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \xi | (\check{\xi} + i\check{\pi}) | 0 \rangle \\ &= \frac{\xi}{\sqrt{2}} \langle \xi | 0 \rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} \langle \xi | \check{\pi} | 0 \rangle \\ &= \frac{\xi}{\sqrt{2}} \langle \xi | 0 \rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} \left( -i \frac{d}{d\xi} \langle \xi | 0 \rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{d}{d\xi} \right) \Psi_0(\xi). \end{aligned}$$

De las expresiones anteriores se deduce que la función de onda  $\Psi_0(\xi)$  satisface la bien conocida ecuación diferencial

$$\left( \xi + \frac{d}{d\xi} \right) \Psi_0(\xi) = 0.$$

Es inmediato ver que la solución de esta ecuación es la gaussiana

$$\Psi_0(\xi) = A e^{-\xi^2/2}.$$

El valor de  $A = \pi^{-1/4}$  se obtiene normalizando la función de onda. De esta manera se obtiene

$$\Psi_0(\xi) = \pi^{-1/4} e^{-\xi^2/2} = \langle \xi | 0 \rangle,$$

o

$$\Psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) = \langle x | 0 \rangle.$$

Evaluemos el ancho  $(\Delta\xi)^2$  para el estado fundamental:

$$\begin{aligned} (\Delta\check{\xi})^2 &= \langle \check{\xi}^2 \rangle - \langle \check{\xi} \rangle^2 = \langle \check{\xi}^2 \rangle \\ &= \langle 0 | \check{\xi}^2 | 0 \rangle = \frac{1}{2} \langle 0 | (\check{\mathbf{a}} + \check{\mathbf{a}}^\dagger)^2 | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{2} [ \langle 0 | \check{\mathbf{a}}^2 | 0 \rangle + \langle 0 | \check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{a}}^\dagger | 0 \rangle + \langle 0 | \check{\mathbf{a}}^\dagger\check{\mathbf{a}} | 0 \rangle + \langle 0 | \check{\mathbf{a}}^{\dagger 2} | 0 \rangle ] \\ &= \frac{1}{2} \langle 0 | \check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{a}}^\dagger | 0 \rangle = \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

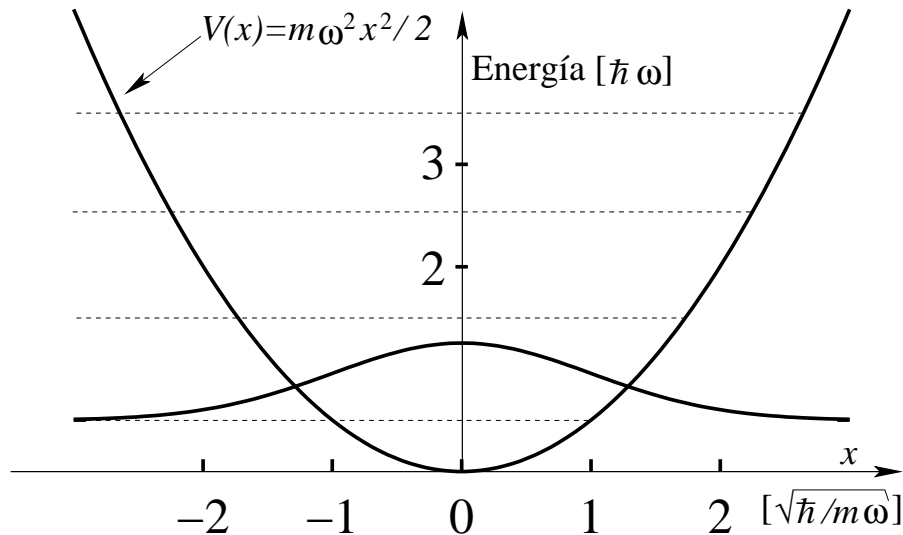


Figura 5.2: Estado fundamental del oscilador armónico.

Escrito en términos de  $x$

$$(\Delta\check{x})^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} .$$

La evolución temporal de  $\Psi_0(\xi)$  viene dada por

$$\begin{aligned} \Psi_0(\xi, t) &= \pi^{-1/4} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2} - \frac{i}{\hbar} \left(\frac{1}{2}\hbar\omega\right) t\right) \\ &= \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\xi^2/2} e^{-i\omega t/2} . \end{aligned}$$

Es importante notar que, de acuerdo a la última ecuación, el paquete de ondas Gaussiano que representa al estado fundamental no se dispersa a medida que transcurre el tiempo; siempre se mantiene Gaussiano y (contrario a lo que ocurre para una partícula libre) seguirá cumpliendo en todo instante la relación  $\Delta x \Delta p = \hbar/2$ .

Un gráfico de la función de onda del estado fundamental se muestra en la figura 5.2.

## 5.4 Estados excitados.

Comenzamos evaluando explícitamente la función de onda del primer estado excitado ( $n = 1$ ) en la representación de posición. Se tiene:

$$\langle \xi | 1 \rangle = \Psi_1(\xi) = \langle \xi | \hat{\mathbf{a}}^\dagger | 0 \rangle ,$$

o sea,

$$\begin{aligned}
 \Psi_1(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \xi | \check{\mathbf{X}} - i\check{\mathbf{P}} | 0 \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi - i \left( -i \frac{d}{d\xi} \right) \right) \langle \xi | 0 \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi - \frac{d}{d\xi} \right) \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\xi^2/2} \\
 &= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt[4]{\pi}} \xi e^{-\xi^2/2} .
 \end{aligned}$$

En general, para el  $n$ -ésimo estado excitado, se obtiene:

$$\begin{aligned}
 \Psi_n(\xi) &= \langle \xi | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle \xi | \check{\mathbf{a}}^\dagger{}^n | 0 \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{2^{n/2}} \left( \xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n \langle \xi | 0 \rangle \\
 &= \frac{1}{\sqrt{n!} \sqrt[4]{\pi} 2^{n/2}} \left( \xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2/2} .
 \end{aligned}$$

Consideremos la expresión

$$\begin{aligned}
 -e^{\xi^2/2} \frac{d}{d\xi} \left( e^{-\xi^2/2} \phi(\xi) \right) &= -e^{\xi^2/2} \left( -\xi e^{-\xi^2/2} \phi(\xi) + e^{-\xi^2/2} \frac{d\phi(\xi)}{d\xi} \right) \\
 &= \left( \xi - \frac{d}{d\xi} \right) \phi(\xi) .
 \end{aligned}$$

Deducimos que el operador diferencial  $\xi - d/d\xi$  se comporta igual que el operador

$$-e^{\xi^2/2} \frac{d}{d\xi} e^{-\xi^2/2} ,$$

luego

$$\begin{aligned}
 \left( \xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n &= (-1)^n e^{\xi^2/2} \frac{d}{d\xi} e^{-\xi^2/2} \cdot e^{\xi^2/2} \frac{d}{d\xi} e^{-\xi^2/2} \dots e^{\xi^2/2} \frac{d}{d\xi} e^{-\xi^2/2} \\
 &= (-1)^n e^{\xi^2/2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2/2} .
 \end{aligned}$$

Con esta expresión, la  $n$ -ésima función de onda del oscilador armónico se puede escribir de la forma

$$\Psi_n(\xi) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n!} \sqrt[4]{\pi}} e^{\xi^2/2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2/2} \cdot e^{-\xi^2/2} .$$

**Definición 5.1**

$$H_n(\xi) \equiv (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} . \quad (5.8)$$

reves momentos de reflexión muestran que los  $\{H_n(\xi)\}_n$ , con  $n \in \mathbb{N}$ , son polinomios, los así llamados *Polinomios de Hermite*.

Con esta definición, las funciones de onda quedan

$$\Psi_n(\xi) = \frac{e^{-\xi^2/2}}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(\xi) = \langle \xi | n \rangle . \quad (5.9)$$

Los polinomios de Hermite tienen paridad bien definida:

$$H_n(-\xi) = (-1)^n H_n(\xi) ,$$

luego, también la tendrán las funciones de onda del oscilador armónico,

$$\Psi_n(-\xi) = (-1)^n \Psi_n(\xi) .$$

Esto coincide con un resultado general obtenido anteriormente, donde se notó que todo potencial par  $V(x) = V(-x)$ , poseía autofunciones con paridad definida.

La figura 5.3 muestra un gráfico de las funciones de onda  $\Psi_n(\xi)$  y la densidad de probabilidad cuántica  $\rho_{\text{cuant}}(\xi) = |\langle \xi | n \rangle|^2$  para varios estados.

La densidad de probabilidad clásica de encontrar la partícula en el lugar  $\xi$  al oscilar ésta con una energía igual a la del  $n$ -ésimo estado cuántico, viene dada por

$$\rho_{\text{cl}}(\xi) = \frac{1}{\pi \sqrt{\xi_n^2 - \xi^2}} ,$$

donde  $\xi_n$  es la amplitud clásica del oscilador, es decir,

$$\xi_n = \sqrt{2n + 1} .$$

En la figura 5.3 también se muestra la distribución de probabilidad clásica.

Los aspectos de la figura 5.3 que valen la pena destacar son:

- El número de ceros de las funciones de onda es igual al número cuántico  $n$  que caracteriza el estado. Cada estado tiene un cero más que el estado inmediatamente inferior en energía.
- Las funciones de onda tienen una paridad bien definida, siendo ésta  $(-1)^n$ .
- La distribución clásica diverge en los puntos de retroceso  $\xi = \xi_n$ . Más allá de estos puntos, la densidad de probabilidad clásica es nula.
- La distribución de probabilidad cuántica muestra oscilaciones y sí penetra en la región *clásicamente prohibida*.
- Si bien, para los estados de menor energía, las densidades de probabilidad clásica y cuántica son muy distintas, a medida que  $n$  crece la distribución clásica comienza a representar bastante bien al promedio de la distribución cuántica.

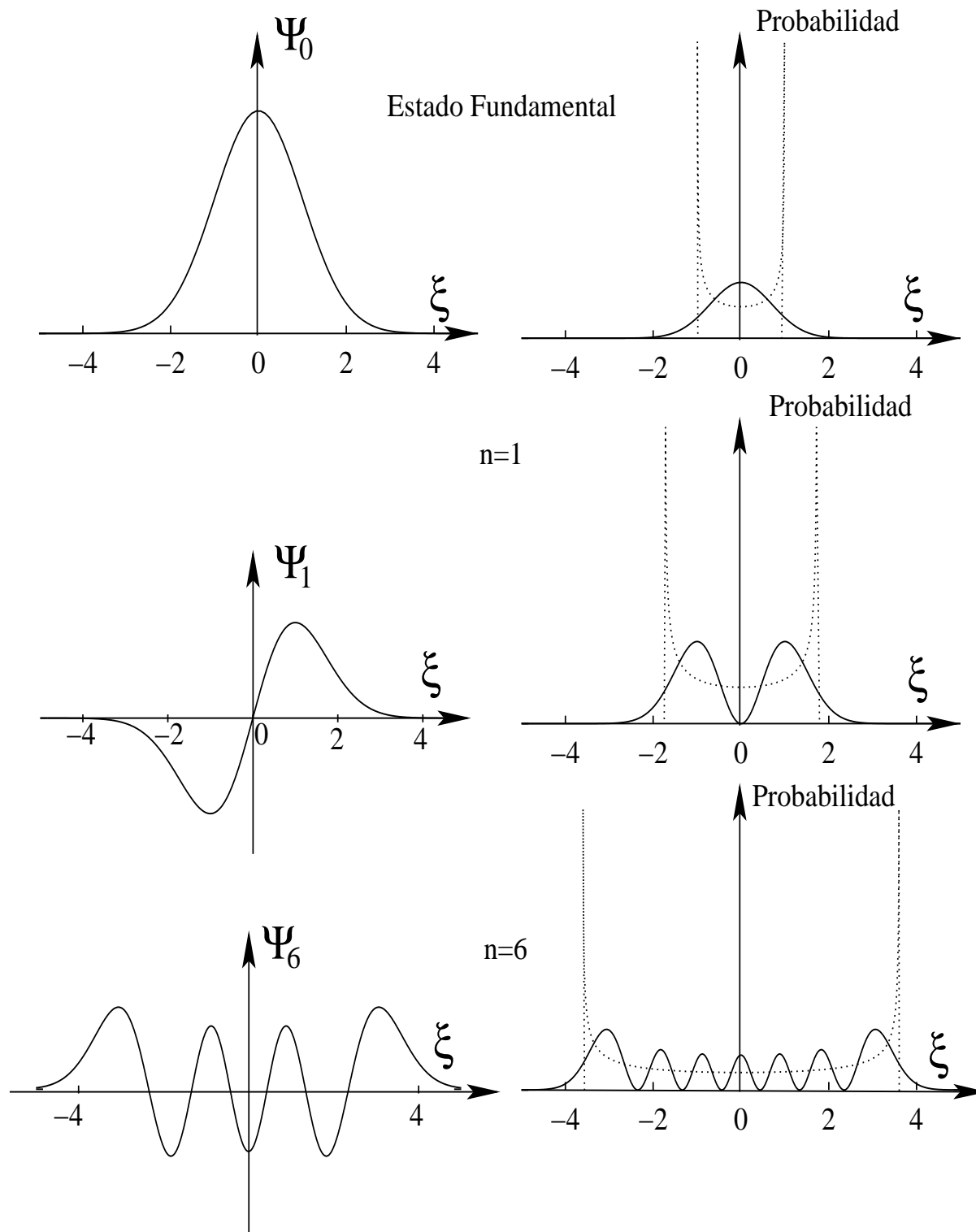


Figura 5.3: Función de onda y distribuciones de probabilidad clásica (línea punteada) y cuántica (línea llena) para varios estados del oscilador armónico.



## 5.5 Polinomios de Hermite.

En esta sección resumiremos algunas de las propiedades que cumplen los Polinomios de Hermite. Partiendo de la definición que hemos dado, los polinomios de Hermite los podemos reescribir de la forma:

$$\begin{aligned}
 H_n(\xi) &= (-1)^n \left( e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \right) \\
 &= (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-(\xi-s)^2} \Bigg|_{s=0} \\
 &= (-1)^n e^{\xi^2} \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{-(\xi-s)^2} \Bigg|_{s=0} (-1)^n \\
 &= \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{\xi^2 - (\xi-s)^2} \Bigg|_{s=0} .
 \end{aligned} \tag{5.10}$$

Definamos la función generatriz de los polinomios de Hermite

$$F(s, \xi) \equiv e^{\xi^2 - (\xi-s)^2} = e^{-s^2 + 2s\xi} .$$

Al expandir  $F(s, \xi)$  en torno a  $s = 0$  obtenemos

$$F(s, \xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left( \frac{\partial^n}{\partial s^n} F(s, \xi) \right) \Bigg|_{s=0} s^n .$$

Pero los términos

$$\left( \frac{\partial^n}{\partial s^n} F(s, \xi) \right) \Bigg|_{s=0} ,$$

son precisamente los polinomios de Hermite (ver ecuación (5.10)), luego

$$F(s, \xi) = e^{-s^2 + 2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) s^n . \tag{5.11}$$

En el curso de Métodos de la Física Matemática II demostramos que

$$\bar{F}(s, \xi) \equiv \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-\xi^2/2 + \sqrt{2}s\xi - s^2/2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Psi_n(\xi)}{n!} s^n .$$

$\bar{F}(s, \xi)$  es la función generatriz de las autofunciones del oscilador armónico.

Partiendo de la definición de la función generatriz podemos encontrar relaciones de recurrencia. Por ejemplo, se tiene:

$$\frac{\partial F}{\partial \xi} = 2sF .$$

Usando el desarrollo en serie de  $F$  dado por la ecuación (5.11), esta relación queda

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H'_n(\xi)s^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2H_n(\xi)s^{n+1}}{n!} .$$

Igualando los términos de la misma potencia  $s^n$ , se encuentra la relación de recurrencia

$$\boxed{H'_n(\xi) = 2nH_{n-1}(\xi) .}$$

Del mismo modo, se obtiene que

$$\frac{\partial F}{\partial s} = (-2s + 2\xi)F .$$

Luego, usando (5.11)

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)ns^{n-1}}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)(-2)s^{n+1}}{n!} + 2\xi \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)s^n}{n!} ,$$

de donde, igualando términos de la misma potencia  $s^n$ , se encuentra la relación de recurrencia

$$\boxed{2\xi H_n(\xi) = 2nH_{n-1}(\xi) + H_{n+1}(\xi) .}$$

También se tiene que

$$\frac{\partial F}{\partial s} = \left( 2\xi - \frac{d}{d\xi} \right) F .$$

Procediendo en forma análoga a los casos anteriores, se encuentra la relación

$$\left( 2\xi - \frac{d}{d\xi} \right) H_n(\xi) = H_{n-1}(\xi) .$$

Los primeros polinomios de Hermite son:

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1 \\ H_1(\xi) &= 2\xi \\ H_2(\xi) &= -2 + 4\xi^2 \\ H_3(\xi) &= -12\xi + 8\xi^3 \\ H_4(\xi) &= 12 - 48\xi^2 + 16\xi^4 \end{aligned}$$

La relación de ortonormalización queda de la forma

$$\begin{aligned} \langle n | m \rangle &= \delta_{nm} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \langle n | \xi \rangle \xi m \\ &= \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) , \end{aligned}$$

es decir,

$$\boxed{\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm} .}$$

## 5.6 Función de Green.

De la definición de los polinomios de Hermite (5.8) y la igualdad

$$e^{-\xi^2} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(-t^2 \pm 2i\xi t) ,$$

sigue que

$$H_n(\xi) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt (\mp 2it)^n \exp(\xi^2 - t^2 \pm 2i\xi t) . \quad (5.12)$$

Evaluemos ahora la expresión

$$F(\xi, \eta, \alpha) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^n H_n(\xi) H_n(\eta) . \quad (5.13)$$

Al usar (5.12) se sigue

$$\begin{aligned} F(\xi, \eta, \alpha) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^n H_n(\eta) \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt (2it)^n \exp(\xi^2 - t^2 - 2i\xi t) \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (i\alpha t)^n H_n(\eta) \right] \exp(\xi^2 - t^2 - 2i\xi t) \end{aligned}$$

Usando ahora la función generatriz (5.11) se obtiene

$$F(\xi, \eta, \alpha) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{-(1-\alpha^2)t^2 + 2i(\alpha\eta - \xi)t + \xi^2} .$$

Completando cuadrado e integrando se obtiene

$$F(\xi, \eta, \alpha) = \frac{1}{\sqrt{1-\alpha^2}} \exp \left[ \frac{-1}{1-\alpha^2} (\alpha^2(\xi^2 + \eta^2) - 2\alpha\xi\eta) \right] . \quad (5.14)$$

Si  $\{E_n\}$  y  $\{\phi_n(\xi)\}$  son las autofunciones del Hamiltoniano de un sistema, la función de Green para ese sistema se escribe de la forma (ver ecuación (3.72))

$$G(\xi, \eta, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-iE_n t/\hbar) \phi_n^*(\xi) \phi_n(\eta) .$$

Usando (5.9) y (5.13), se encuentra

$$\begin{aligned} G(\xi, \eta, t) &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega(n+1/2)t} \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} e^{-(\xi^2 + \eta^2)/2} H_n(\xi) H_n(\eta) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-i\omega t/2} e^{-(\xi^2 + \eta^2)/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{e^{-i\omega t}}{2}\right)^n H_n(\xi) H_n(\eta) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-i\omega t/2} e^{-(\xi^2 + \eta^2)/2} F(\xi, \eta, e^{-i\omega t}) . \end{aligned}$$

Ahora usamos (5.14), obteniéndose

$$\begin{aligned} G(\xi, \eta, t) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{e^{-i\omega t/2} e^{-(\xi^2 + \eta^2)/2}}{\sqrt{1 - \exp(-2i\omega t)}} \cdot \\ &\exp \left[ -\frac{(\exp(-2i\omega t) (\xi^2 + \eta^2) - 2 \exp(-2i\omega t) \xi \eta)}{1 - \exp(-2i\omega t)} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi i \operatorname{sen}(\omega t)}} \exp \left[ \frac{i}{\operatorname{sen}(\omega t)} \left( \frac{1}{2} (\xi^2 + \eta^2) \cos(\omega t) - \xi \eta \right) \right]. \end{aligned}$$

Por ejemplo, si  $2\omega t = \epsilon \rightarrow 0$ , entonces,

$$G(\xi, \eta, 0^+) = \frac{1}{\sqrt{\pi i \epsilon}} \exp \left( \frac{i}{\epsilon} (\xi - \eta)^2 \right) = \delta(\xi - \eta),$$

tal como debe ser. Esta última relación demuestra que

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) H_n(\eta) = \delta(\xi - \eta).$$

## 5.7 Representación matricial de los operadores.

Consideremos la base ortonormal de  $\mathcal{H}$  formada por los autovectores del operador  $\check{\mathbf{n}}$ . Evaluemos los elementos de matriz y escribamos la representación matricial de los operadores  $\check{\mathbf{a}}^\dagger$ ,  $\check{\mathbf{a}}$ ,  $\check{\boldsymbol{\pi}}$ ,  $\check{\boldsymbol{\xi}}$ ,  $\check{\mathbf{n}}$  y  $\check{\mathbf{H}}$ , en esta base.

$$(i) \quad (\check{\mathbf{a}})_{nm} = \langle n | \check{\mathbf{a}} | m \rangle = \sqrt{m} \delta_{n, m-1}$$

$$(\check{\mathbf{a}}) = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & & 0 & \sqrt{4} & \ddots \\ \cdot & \cdot & & & 0 & \ddots \end{pmatrix}.$$

Para el operador hermítico conjugado se tiene

$$(\check{\mathbf{a}}^\dagger) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & \ddots \\ \vdots & & 0 & \ddots \end{pmatrix}.$$

(ii)  $\check{\xi} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\check{\mathbf{a}} + \check{\mathbf{a}}^\dagger)$ , luego

$$(\check{\xi})_{n,m} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sqrt{n} \delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} \right) .$$

$$(\check{\xi}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} & \ddots \\ \vdots & \vdots & & \sqrt{4} & 0 & \ddots \\ \cdot & \cdot & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix} .$$

(iii)  $\check{\pi} = \frac{1}{i\sqrt{2}}(\check{\mathbf{a}} - \check{\mathbf{a}}^\dagger)$ , luego

$$(\check{\pi}) = \frac{1}{i\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots & \dots \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \dots & \dots \\ \vdots & & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} .$$

(iv)  $(\check{\mathbf{n}})_{nm} = \langle n | \check{\mathbf{n}} | m \rangle = m \delta_{nm}$ , luego

$$(\check{\mathbf{n}}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ \vdots & \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} .$$

(v)  $\check{\mathbf{H}} = \hbar\omega (\check{\mathbf{n}} + \frac{1}{2})$ , luego

$$(\check{\mathbf{H}}) = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & & \\ 0 & 3/2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 5/2 & & \\ & 0 & & 7/2 & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix} .$$

(vi)  $\check{\xi}^2 = \check{\xi} \cdot \check{\xi}$ .

$$(\check{\xi}^2) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{1 \cdot 2} & 0 & \dots \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{2 \cdot 3} & 0 \\ \sqrt{1 \cdot 2} & 0 & 5 & 0 & \sqrt{3 \cdot 4} & 0 \\ 0 & \sqrt{2 \cdot 3} & 0 & 7 & 0 & \\ 0 & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix} .$$

Consideremos un estado  $|\Psi\rangle$ , superposición de autoestados del oscilador armónico:

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|\Psi\rangle .$$

La dependencia temporal de  $|\Psi\rangle$  viene dada por:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle \langle n|\Psi\rangle e^{-i\omega(n+1/2)t} .$$

Evaluemos el valor esperado del operador posición y mostremos que éste satisface la misma ecuación que la variable de posición clásico. Tenemos:

$$\begin{aligned} \langle \check{\xi}(t) \rangle &= \langle \Psi(t) | \check{\xi} | \Psi(t) \rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle \Psi(t) | n \rangle \langle n | \check{\xi} | m \rangle \langle m | \Psi(t) \rangle \\ &= \sum_{n,m} \langle \Psi | n \rangle \langle n | \check{\xi} | m \rangle \langle m | \Psi \rangle e^{-i\omega(m-n)t} . \end{aligned}$$

Pero  $\xi_{nm} = \langle n | \check{\xi} | m \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{n}\delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1}\delta_{m,n+1})$ , luego

$$\begin{aligned} \langle \check{\xi}(t) \rangle &= \sum_n \left( \langle \Psi | n \rangle \sqrt{\frac{n}{2}} \langle n-1 | \Psi \rangle e^{i\omega t} + \langle \Psi | n \rangle \sqrt{\frac{n+1}{2}} \langle n+1 | \Psi \rangle e^{-i\omega t} \right) \\ &= \sum_n \sqrt{2n} \operatorname{Re} \{ \langle \Psi | n \rangle \langle n-1 | \Psi \rangle e^{i\omega t} \} . \end{aligned}$$

Tomando la segunda derivada se concluye que

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \check{\xi}(t) \rangle + \omega^2 \langle \check{\xi}(t) \rangle = 0 ,$$

es decir, el valor promedio de la posición efectivamente cumple con la ecuación clásica para el oscilador armónico.

Estos resultados también se pueden obtener usando el teorema de Ehrenfest. En efecto, de acuerdo a la ecuaciones (3.57) y (3.59), se tiene:

$$\frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{p}} \rangle = \langle \check{\mathbf{F}} \rangle = -m\omega^2 \langle \check{\mathbf{x}} \rangle ,$$

y

$$m \frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{x}} \rangle = \langle \check{\mathbf{p}} \rangle .$$

Combinando estas ecuaciones y escribiéndolas en términos de las variables adimensionales, se encuentra

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \check{\xi} \rangle = -\omega^2 \langle \check{\xi} \rangle .$$

## 5.8 El oscilador armónico en el cuadro de Heisenberg.

Recordamos las expresiones que relacionan los operadores y funciones de onda en los cuadros de Schrödinger y de Heisenberg. Se tiene:

$$\check{\mathbf{A}}_H(t) = e^{i\check{\mathbf{H}}t/\hbar} \check{\mathbf{A}}_S e^{-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar} ,$$

y

$$\begin{aligned} \Psi_S(\xi, t) &= e^{-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar} \Psi_S(\xi, 0) \\ &= e^{-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar} \Psi_H(\xi) . \end{aligned}$$

Los dos cuadros coinciden en el instante  $t = 0$ . En el cuadro de Heisenberg las funciones de estado no varían en el tiempo; son los operadores los que evolucionan. La ecuación dinámica para los operadores es la ecuación de Heisenberg:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \check{\mathbf{A}}_H = [ \check{\mathbf{A}}_H, \check{\mathbf{H}} ] .$$

### 5.8.1 Ecuaciones de movimiento.

Escribamos la ecuación de evolución temporal para los operadores de posición y momento en el cuadro de Heisenberg. Se tiene:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \check{\boldsymbol{\xi}}_H = [ \check{\boldsymbol{\xi}}_H, \check{\mathbf{H}} ] .$$

El Hamiltoniano para el oscilador armónico es

$$\check{\mathbf{H}} = \frac{1}{2} \hbar \omega \left( \check{\boldsymbol{\xi}}_H^2 + \check{\boldsymbol{\pi}}_H^2 \right) .$$

Para el conmutador entre  $\check{\boldsymbol{\xi}}_H$  y  $\check{\mathbf{H}}$  se tiene:

$$[ \check{\boldsymbol{\xi}}_H, \check{\mathbf{H}} ] = \frac{1}{2} \hbar \omega [ \check{\boldsymbol{\xi}}_H, \check{\boldsymbol{\pi}}_H^2 ] = i\hbar \omega \check{\boldsymbol{\pi}}_H ,$$

luego,

$$\frac{d}{dt} \check{\boldsymbol{\xi}}_H = \omega \check{\boldsymbol{\pi}}_H .$$

Análogamente, se deduce que

$$\frac{d}{dt} \check{\boldsymbol{\pi}}_H = -\omega \check{\boldsymbol{\xi}}_H .$$

Derivando respecto al tiempo las dos últimas ecuaciones se obtiene

$$\frac{d^2 \check{\boldsymbol{\xi}}_H}{dt^2} + \omega^2 \check{\boldsymbol{\xi}}_H = 0$$

y

$$\frac{d^2 \check{\pi}_H}{dt^2} + \omega^2 \check{\pi}_H = 0 ,$$

ecuaciones que son idénticas a las ecuaciones clásicas de movimiento. Las soluciones de estas ecuaciones diferenciales son

$$\begin{aligned} \check{\xi}_H(t) &= \check{\xi}_H(0) \cos(\omega t) + \check{\pi}_H(0) \operatorname{sen}(\omega t) \\ &= \check{\xi}_S \cos(\omega t) + \check{\pi}_S \operatorname{sen}(\omega t) \end{aligned} \quad (5.15)$$

y

$$\check{\pi}_H(t) = \check{\pi}_S \cos(\omega t) - \check{\xi}_S \operatorname{sen}(\omega t) . \quad (5.16)$$

De acuerdo a (5.15) y (5.16), los valores esperados de los operadores de posición y momento vienen dados por

$$\langle \check{\xi}_H(t) \rangle = \langle \check{\xi}_S \rangle \cos(\omega t) + \langle \check{\pi}_S \rangle \operatorname{sen}(\omega t) \quad (5.17)$$

y

$$\langle \check{\pi}_H(t) \rangle = \langle \check{\pi}_S \rangle \cos(\omega t) - \langle \check{\xi}_S \rangle \operatorname{sen}(\omega t) . \quad (5.18)$$

Al tomar promedios vemos que los resultados concuerdan con los obtenidos anteriormente usando el teorema de Ehrenfest; es decir, el valor medio de la posición y el momento evolucionan clásicamente; aunque, naturalmente, nuestra solución mantiene peculiaridades de los sistemas cuánticos (principio de incerteza, espectro de energías discreto, etc.).

Escribamos ahora las ecuaciones de movimiento para los operadores de subida y bajada. Se tiene:

$$i\hbar \frac{d\check{\mathbf{a}}_H}{dt} = [\check{\mathbf{a}}_H, \check{\mathbf{H}}] = \hbar\omega \left[ \check{\mathbf{a}}_H, \check{\mathbf{a}}_H^\dagger \check{\mathbf{a}}_H + \frac{1}{2} \right] = \hbar\omega \check{\mathbf{a}}_H ,$$

es decir,

$$\frac{d\check{\mathbf{a}}_H}{dt} = -i\omega \check{\mathbf{a}}_H .$$

En forma análoga se obtiene

$$\frac{d\check{\mathbf{a}}_H^\dagger}{dt} = +i\omega \check{\mathbf{a}}_H^\dagger .$$

La solución de estas ecuaciones viene dada por

$$\check{\mathbf{a}}_H(t) = \check{\mathbf{a}}_S e^{-i\omega t} , \quad \text{y} \quad \check{\mathbf{a}}_H^\dagger(t) = \check{\mathbf{a}}_S^\dagger e^{+i\omega t} .$$



Hacemos notar que estas relaciones se pueden obtener directamente usando la definición de  $\check{\mathbf{a}}_H$  y la ecuación (2.19). En efecto,

$$\begin{aligned}\check{\mathbf{a}}_H &= e^{i\check{\mathbf{H}}t/\hbar} \check{\mathbf{a}}_S e^{-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar} = e^{i\omega t \check{\mathbf{n}}} \check{\mathbf{a}}_S e^{-i\omega t \check{\mathbf{n}}} \\ &= \check{\mathbf{a}}_S + i\omega t [\check{\mathbf{n}}, \check{\mathbf{a}}_S] + \frac{(i\omega t)^2}{2!} [\check{\mathbf{n}}, [\check{\mathbf{n}}, \check{\mathbf{a}}_S]] + \dots\end{aligned}$$

Pero  $[\check{\mathbf{n}}, \check{\mathbf{a}}_S] = -\check{\mathbf{a}}_S$ , luego,

$$\check{\mathbf{a}}_H(t) = \check{\mathbf{a}}_S - i\omega t \check{\mathbf{a}}_S + \frac{(i\omega t)^2}{2!} \check{\mathbf{a}}_S - \dots = \check{\mathbf{a}}_S e^{-i\omega t}.$$

Tomando el hermítico conjugado sigue

$$\check{\mathbf{a}}_H^\dagger(t) = \check{\mathbf{a}}_S^\dagger e^{+i\omega t}.$$

### 5.8.2 Interpretación del cuadro de Heisenberg.

En el cuadro de Heisenberg no evoluciona la función de onda, sino los operadores. Veamos qué se obtiene para los operadores en el cuadro de Heisenberg si para la función de estado  $\Psi_H(\xi)$  se elige la función de onda tiempo independiente correspondiente al estado fundamental del oscilador armónico, es decir:

$$\Psi_H(\xi) = \Psi_0(\xi) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right).$$

Al aplicar la relación (5.17) al estado fundamental, se obtiene que en todo instante los valores esperados de los operadores momento y posición en el cuadro de Heisenberg son nulos, es decir,

$$\langle \check{\xi}_H(t) \rangle = \langle \check{\pi}_H(t) \rangle = 0 \quad \forall t.$$

Esto en realidad era lo que se esperaba.

¿Qué sucederá si la función de estado del sistema es la misma gaussiana, pero desplazada en una cantidad  $\xi_0$  respecto al punto de equilibrio  $\xi = 0$ ? Analicemos la situación que se obtiene en ese caso. Elijamos la función de estado como sigue (ver también figura 5.4):

$$\Psi_H(\xi) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp\left(-\frac{(\xi - \xi_0)^2}{2}\right).$$

En este caso se tiene:

$$\langle \check{\xi}_H(t=0) \rangle = \langle \Psi_H | \check{\xi}_S | \Psi_H \rangle = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \xi \exp(-(\xi - \xi_0)^2) = \xi_0.$$

También se demuestra que

$$\langle \check{\pi}_H(t=0) \rangle = 0.$$

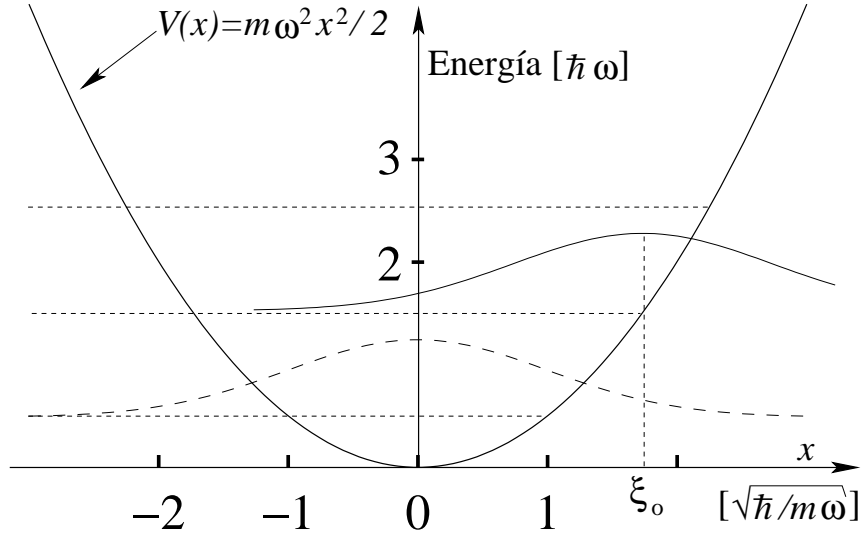


Figura 5.4: Función de estado correspondiente a la función de onda del estado fundamental desplazado.

Luego, la evolución temporal de los valores esperados de los operadores posición y momento viene dada por:

$$\langle \check{\xi}_H(t) \rangle = \xi_0 \cos(\omega t) , \quad y \quad \langle \check{\pi}_H(t) \rangle = -\xi_0 \text{sen}(\omega t) .$$

Estas ecuaciones son idénticas a las correspondientes ecuaciones clásicas.

¿Qué pasa con el paquete de ondas  $\Psi_S(\xi, t)$  en el cuadro de Schrödinger? Ya sabemos que el valor esperado de la posición oscila igual que un oscilador clásico, pero ¿el paquete de ondas cambiará su forma a medida que oscila? Analicemos este problema en detalle. Se tiene:

$$\Psi_S(\xi, t) = e^{-i\check{H}t/\hbar} \Psi_H(\xi) .$$

Para la función de onda de Heisenberg, que no depende del tiempo, estamos tomando el estado fundamental desplazado en  $\xi_0$ :

$$\Psi_H(\xi) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\xi - \xi_0)^2\right) = e^{-i\xi_0\check{\pi}_S} \Psi_0(\xi) ,$$

donde  $\Psi_0(\xi)$  es la solución de la ecuación de Schrödinger tiempo independiente correspondiente al estado fundamental del oscilador armónico. Luego, se obtiene:

$$\begin{aligned} \Psi_S(\xi, t) &= e^{-i\check{H}t/\hbar} e^{-i\xi_0\check{\pi}_S} \Psi_0(\xi) \\ &= e^{-i\check{H}t/\hbar} e^{-i\xi_0\check{\pi}_S} e^{+i\check{H}t/\hbar} e^{-i\check{H}t/\hbar} \Psi_0(\xi) \\ &= e^{-i\xi_0\check{\pi}_H(-t)} e^{-i\check{H}t/\hbar} \Psi_0(\xi) \\ &= e^{-i\xi_0\check{\pi}_H(-t)} e^{-i\omega t/2} \Psi_0(\xi) . \end{aligned}$$

Usando (5.17), se tiene que

$$\begin{aligned} e^{-i\xi_0 \tilde{\pi}_H(-t)} &= e^{-i\xi_0(\check{\xi}_S \sin(\omega t) + \tilde{\pi}_S \cos(\omega t))} \\ &= e^{-i\xi_0 \check{\xi}_S \sin(\omega t)} e^{-i\xi_0 \tilde{\pi}_S \cos(\omega t)} e^{-(-i\xi_0)^2 [\check{\xi}_S, \tilde{\pi}_S] \sin(\omega t) \cos(\omega t)/2} \\ &= e^{-i\xi_0 \check{\xi}_S \sin(\omega t)} e^{-i\xi_0 \cos(\omega t) \tilde{\pi}_S} e^{i\xi_0^2 \sin(2\omega t)/4} . \end{aligned}$$

Con este resultado, para la función de onda se obtiene

$$\begin{aligned} \Psi_S(\xi, t) &= e^{-i\omega t/2} e^{i\xi_0^2 \sin(2\omega t)/4} e^{-i\xi_0 \check{\xi}_S \sin(\omega t)} e^{-i\xi_0 \cos(\omega t) \tilde{\pi}_S} \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\xi^2/2} \\ &= e^{-i\omega t/2} e^{i\xi_0^2 \sin(2\omega t)/4} e^{-i\xi_0 \check{\xi}_S \sin(\omega t)} \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-(\xi - \xi_0 \cos(\omega t))^2/2} \\ &= e^{-i(\omega t/2 - \xi_0^2 \sin(2\omega t)/4 + \xi_0 \xi \sin(\omega t))} \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-(\xi - \xi_0 \cos(\omega t))^2/2} , \end{aligned}$$

y para la densidad de probabilidad se encuentra:

$$|\Psi_S(\xi, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-(\xi - \xi_0 \cos(\omega t))^2} .$$

Como se ve, la densidad de probabilidad en todo instante es Gaussiana y oscila entre  $-\xi_0$  y  $+\xi_0$ , sin cambiar su forma. Este estado, correspondiente al estado fundamental desplazado, es el que presenta la mayor analogía con el oscilador clásico.

### 5.8.3 Descomposición de $\Psi_H(\xi)$ en autoestados del oscilador armónico.

Escribamos la función de onda del estado fundamental desplazado,

$$\langle \xi | \Psi_H \rangle = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-(\xi - \xi_0)^2/2} = \langle \xi | e^{-i\xi_0 \tilde{\pi}} | 0 \rangle ,$$

en términos de las autofunciones del oscilador armónico  $\{|n\rangle\}$ ,

$$|\Psi_H\rangle = \sum_n c_n |n\rangle . \quad (5.19)$$

y evaluemos los coeficientes de expansión. Para ello expresamos el operador de traslación como sigue:

$$\begin{aligned} e^{-i\xi_0 \tilde{\pi}} &= \exp\left(-i\xi_0 \frac{1}{i\sqrt{2}}(\tilde{\mathbf{a}} - \tilde{\mathbf{a}}^\dagger)\right) \\ &= \exp\left(\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\tilde{\mathbf{a}}^\dagger\right) \exp\left(-\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\tilde{\mathbf{a}}\right) \exp\left(\frac{1}{2}\left(\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\right)^2 [\tilde{\mathbf{a}}^\dagger, \tilde{\mathbf{a}}]\right) \\ &= \exp\left(-\frac{\xi_0^2}{4}\right) \exp\left(\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\tilde{\mathbf{a}}^\dagger\right) \exp\left(-\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\tilde{\mathbf{a}}\right) , \end{aligned}$$

luego,

$$\begin{aligned} e^{-i\xi_0\tilde{\pi}}|0\rangle &= \exp\left(-\frac{\xi_0^2}{4}\right) \exp\left(\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\tilde{\mathbf{a}}^\dagger\right) \left(1 - \frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\tilde{\mathbf{a}} + \frac{\xi_0^2}{4}\tilde{\mathbf{a}}^2 - \dots\right) |0\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{\xi_0^2}{4}\right) \exp\left(\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\tilde{\mathbf{a}}^\dagger\right) |0\rangle. \end{aligned}$$

Expandiendo la exponencial en series de Taylor, y usando

$$\frac{(\tilde{\mathbf{a}}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle = |n\rangle,$$

concluimos

$$|\Psi_H\rangle = e^{-\xi_0^2/4} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\right)^n |n\rangle,$$

de modo que

$$c_n = \frac{\xi_0^n}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\xi_0^2/4}. \quad (5.20)$$

Al realizar una medición de energía, la probabilidad de encontrar el oscilador con energía  $(n + 1/2)\hbar\omega$  es

$$|c_n|^2 = \frac{1}{n!} \left(\frac{\xi_0^2}{2}\right)^n e^{-\xi_0^2/2}. \quad (5.21)$$

Esta distribución es una *Distribución de Poisson*.

Reemplazando (5.20) en (5.19) se encuentra que el estado fundamental desplazado en  $\xi_0$  queda expresado por

$$|\Psi_H\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi_0^n}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\xi_0^2/4} |n\rangle. \quad (5.22)$$

¿Cuál es la energía más probable? Evaluémosla para el caso de un oscilador con amplitud grande (es decir,  $\xi_0 \gg 1$ ). En ese caso el máximo ocurre para  $n$  grande y podemos usar la fórmula de Stirling,  $n! \sim n^n e^{-n}$ . Se encuentra que

$$|c_n|^2 \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \left(\frac{\xi_0^2}{2n}\right)^n \exp\left(-\frac{\xi_0^2}{2} - n\right).$$

El valor máximo de esta distribución se obtiene para el valor  $n_o = \xi_0^2/2$ . El valor más probable de la energía es, por lo tanto,

$$E = (n_o + 1/2)\hbar\omega \approx n_o\hbar\omega = \frac{\xi_0^2}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2,$$

es decir, si desplazamos el estado fundamental del oscilador en una magnitud  $x_0$ , la energía más probable del oscilador será  $\frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2$ , coincidiendo con el resultado que se obtendría clásicamente. Esto es natural, puesto que hemos considerado grandes desplazamientos en comparación a la escala cuántica de distancia ( $\xi_0 \gg 1$  si y sólo si  $x_0 \gg \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$ ).

## 5.9 Estados coherentes.

En esta sección se generalizarán, en cierto modo, los resultados de la sección anterior.

### 5.9.1 Definición.

Definimos el espacio coherente por el conjunto  $\{|\alpha\rangle\}_{\alpha\in\mathbb{C}}$  de estados que satisfacen

$$\check{a}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle .$$

Sean  $\{|n\rangle\}$  los autoestados del operador  $\check{n}$ . Supongamos que existen estos estados coherentes, “autofunciones” del operador de bajada. Consideremos a uno de tales estados y supongamos que está normalizado, es decir, supongamos que cumple con  $\langle\alpha|\alpha\rangle = 1$ . Expandamos  $|\alpha\rangle$  en la base  $\{|n\rangle\}$ :

$$|\alpha\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n\rangle\langle n|\alpha\rangle .$$

Evaluemos los coeficientes de expansión. Tenemos

$$\langle n|\alpha\rangle = \langle 0|\frac{\check{a}^n}{\sqrt{n!}}|\alpha\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\langle 0|\alpha\rangle .$$

Con este resultado, el estado coherente  $|\alpha\rangle$  queda

$$|\alpha\rangle = \langle 0|\alpha\rangle \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle .$$

Como  $|\alpha\rangle$  está normalizado, usando esta última relación se obtiene

$$\begin{aligned} \langle\alpha|\alpha\rangle &= |\langle 0|\alpha\rangle|^2 \sum_{m,n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{*m}\alpha^n}{\sqrt{m!n!}} \langle m|n\rangle \\ &= |\langle 0|\alpha\rangle|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!} = |\langle 0|\alpha\rangle|^2 e^{|\alpha|^2} = 1 . \end{aligned}$$

De esta relación se concluye que

$$\langle 0|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} ,$$

finalmente, los estados coherentes normalizados se escriben de la forma

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle . \quad (5.23)$$

Note que esta expresión, con  $\alpha = \xi_0/\sqrt{2}$  es idéntica a la ecuación (5.22), o sea, el estado fundamental desplazado es un caso particular de estado coherente.

### 5.9.2 Valores promedios de algunos operadores.

Calculemos el valor promedio de la energía para un estado coherente  $|\alpha\rangle$ :

$$\begin{aligned}\langle \check{\mathbf{H}} \rangle_\alpha &= \langle \alpha | \check{\mathbf{H}} | \alpha \rangle = \langle \alpha | \hbar\omega \left( \check{\mathbf{n}} + \frac{1}{2} \right) | \alpha \rangle \\ &= \hbar\omega \langle \alpha | \left( \check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} + \frac{1}{2} \right) | \alpha \rangle = \hbar\omega \left( |\alpha|^2 + \frac{1}{2} \right) .\end{aligned}$$

Evaluemos también la varianza de la energía. Para  $\langle \check{\mathbf{H}}^2 \rangle_\alpha$  se encuentra

$$\begin{aligned}\langle \check{\mathbf{H}}^2 \rangle_\alpha &= \langle \alpha | \check{\mathbf{H}}^2 | \alpha \rangle = \langle \langle \alpha | \hbar^2\omega^2 \left( \check{\mathbf{n}} + \frac{1}{2} \right)^2 | \alpha \rangle \\ &= \hbar^2\omega^2 \langle \alpha | \left( \check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} \check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} + \check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} + \frac{1}{4} \right) | \alpha \rangle \\ &= \hbar^2\omega^2 \left\{ |\alpha|^2 \langle \alpha | \check{\mathbf{a}} \check{\mathbf{a}}^\dagger | \alpha \rangle + |\alpha|^2 + \frac{1}{4} \right\} \\ &= \hbar^2\omega^2 \left\{ |\alpha|^4 + 2|\alpha|^2 + \frac{1}{4} \right\} .\end{aligned}$$

Para la varianza se tiene entonces

$$(\Delta H)_\alpha^2 = \langle (\check{\mathbf{H}} - \langle \check{\mathbf{H}} \rangle_\alpha)^2 \rangle_\alpha = \hbar^2\omega^2 |\alpha|^2 .$$

De los resultados anteriores también se deduce que

$$\frac{\Delta H_\alpha}{\langle \check{\mathbf{H}} \rangle_\alpha} = \frac{|\alpha|}{|\alpha|^2 + \frac{1}{2}} \xrightarrow{|\alpha| \text{ grande}} \frac{1}{|\alpha|} \xrightarrow{|\alpha| \rightarrow \infty} 0 ,$$

es decir, para  $|\alpha| \gg 1$  la desviación de la energía relativa al valor promedio es muy pequeña.

Calculemos los promedios  $\langle \check{\mathbf{n}} \rangle_\alpha$  y  $\langle \check{\mathbf{n}}^2 \rangle_\alpha$ :

$$\begin{aligned}\langle \check{\mathbf{n}} \rangle_\alpha &= \langle \alpha | \check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} | \alpha \rangle = |\alpha|^2 \\ \langle \check{\mathbf{n}}^2 \rangle_\alpha &= |\alpha|^2 \langle \alpha | (\check{\mathbf{1}} + \check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}}) | \alpha \rangle = |\alpha|^2 + |\alpha|^4 ,\end{aligned}$$

luego para la varianza se obtiene:

$$\Delta n_\alpha = \left( \langle \check{\mathbf{n}}^2 \rangle_\alpha - \langle \check{\mathbf{n}} \rangle_\alpha^2 \right)^{1/2} = |\alpha| .$$

También se tiene

$$\frac{\Delta n_\alpha}{\langle \check{\mathbf{n}} \rangle_\alpha} = \frac{1}{|\alpha|} ,$$

es decir, en el límite  $|\alpha| \rightarrow \infty$  la dispersión es grande, ya que una gran cantidad de estados participa en forma sustancial en la formación del estado coherente  $|\alpha\rangle$ . Sin embargo, la dispersión relativa tiende a cero en este límite.

Note que el valor esperado de la energía también se puede escribir de la forma

$$\langle \check{\mathbf{H}} \rangle_{\alpha} = \hbar\omega \left( \langle \check{\mathbf{n}} \rangle_{\alpha} + \frac{1}{2} \right) .$$

Encontremos también los promedios de la posición y del momento para un estado coherente. Tenemos

$$\langle \alpha | \check{\mathbf{a}} | \alpha \rangle = \alpha$$

y

$$\langle \alpha | \check{\mathbf{a}}^{\dagger} | \alpha \rangle = \alpha^* ,$$

luego

$$\langle \alpha | \check{\xi} | \alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \alpha | (\check{\mathbf{a}} + \check{\mathbf{a}}^{\dagger}) | \alpha \rangle = \sqrt{2} \operatorname{Re}(\alpha) .$$

Para los valores esperados del momento se encuentra

$$\langle \alpha | \check{\pi} | \alpha \rangle = \sqrt{2} \operatorname{Im}(\alpha) .$$

### 5.9.3 Forma explícita para $|\alpha\rangle$ .

Tenemos

$$\begin{aligned} \langle \xi | \check{\mathbf{a}} | \alpha \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{d}{d\xi} \right) \langle \xi | \alpha \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi + \frac{d}{d\xi} \right) \Phi_{\alpha}(\xi) = 0 . \end{aligned}$$

Para encontrar la solución de esta ecuación diferencial, usamos el *Ansatz*

$$\Phi_{\alpha}(\xi) = \langle \xi | \alpha \rangle = e^{f(\xi)} .$$

Para  $f(\xi)$  se encuentra la ecuación diferencial

$$\xi + f'(\xi) = \sqrt{2}\alpha ,$$

cuya solución es

$$f(\xi) = -\frac{1}{2}(\xi - \sqrt{2}\alpha)^2 + \text{cte.} .$$

La función  $\Phi_{\alpha}(\xi)$ , entonces, viene dada por

$$\Phi_{\alpha}(\xi) = A \exp \left( -\frac{1}{2}(\xi - \sqrt{2}\alpha)^2 \right) .$$

A se encuentra exigiendo que  $\Phi_\alpha(\xi)$  esté normalizado:

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \Phi_\alpha^*(\xi) \Phi_\alpha(\xi) = 1.$$

Eligiendo la fase arbitraria de  $A$  de manera que  $A$  sea real y positivo, se obtiene

$$A = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\text{Im}(\alpha)^2}.$$

De esta manera, en forma explícita, en la representación de coordenadas, el estado coherente queda expresado por

$$\Phi_\alpha(\xi) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\text{Im}(\alpha)^2} \exp\left(-\frac{1}{2}(\xi - \sqrt{2}\alpha)^2\right). \quad (5.24)$$

#### Proposición 5.4

$$|\alpha\rangle = e^{\alpha\check{\mathbf{a}}^\dagger - \alpha^*\check{\mathbf{a}}} |0\rangle \equiv \check{\mathbf{A}}|0\rangle, \quad (5.25)$$

donde  $|0\rangle$  es tanto el estado fundamental del operador  $\check{\mathbf{n}}$  como del operador  $\check{\mathbf{a}}$ .

#### Demostración

$$\begin{aligned} e^{\alpha\check{\mathbf{a}}^\dagger - \alpha^*\check{\mathbf{a}}} |0\rangle &= e^{\alpha\check{\mathbf{a}}^\dagger} e^{\alpha^*\check{\mathbf{a}}} e^{|\alpha|^2[\check{\mathbf{a}}^\dagger, \check{\mathbf{a}}]/2} |0\rangle \\ &= e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha\check{\mathbf{a}}^\dagger} |0\rangle \\ &= e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n \check{\mathbf{a}}^{\dagger n}}{n!} |0\rangle \\ &= e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle = |\alpha\rangle \end{aligned}$$

q.e.d.

#### 5.9.4 Evolución temporal.

Analicemos brevemente la evolución temporal de un estado coherente  $|\alpha\rangle$ :

$$|\Psi_\alpha(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\check{\mathbf{H}}t} |\alpha\rangle.$$

Note que  $|\Psi_\alpha(0)\rangle = |\alpha\rangle$ . Se tiene

$$\begin{aligned} |\Psi_\alpha(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\check{\mathbf{H}}t} |\alpha\rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\check{\mathbf{H}}t} \exp[\alpha\check{\mathbf{a}}_S^\dagger - \alpha^*\check{\mathbf{a}}_S] |0\rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\check{\mathbf{H}}t} \exp[\alpha\check{\mathbf{a}}_S^\dagger - \alpha^*\check{\mathbf{a}}_S] e^{+\frac{i}{\hbar}\check{\mathbf{H}}t} e^{-\frac{i}{\hbar}\check{\mathbf{H}}t} |0\rangle \\ &= e^{-i\omega t/2} \exp[\alpha\check{\mathbf{a}}_H^\dagger(t) - \alpha^*\check{\mathbf{a}}_H(t)] |0\rangle \end{aligned}$$



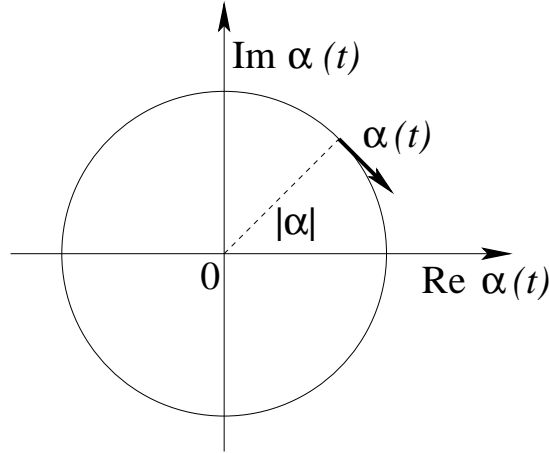


Figura 5.5: Evolución temporal del oscilador en el espacio  $\alpha$ .

Pero  $\check{\mathbf{a}}_H(t) = \check{\mathbf{a}}_S e^{-i\omega t}$  y  $\check{\mathbf{a}}_H^\dagger(t) = \check{\mathbf{a}}_S^\dagger e^{+i\omega t}$ , luego,

$$|\Psi_\alpha(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} \exp[\alpha(t) \check{\mathbf{a}}_S^\dagger - \alpha^*(t) \check{\mathbf{a}}_S] |0\rangle = e^{-i\omega t/2} |\alpha(t)\rangle,$$

con

$$\alpha(t) \equiv \alpha e^{-i\omega t}. \quad (5.26)$$

Note que  $|\Psi_\alpha(t)\rangle$  no es idéntico a  $|\alpha(t)\rangle$ ; casi coinciden, difieren en un factor de fase. Sin embargo, al evaluar promedios de operadores, ambos estados dan el mismo resultado.

Todos los promedios temporales siguen de los promedios en el instante  $t = 0$  al remplazar  $\alpha$  por  $\alpha(t) = \alpha \exp(-i\omega t)$ . En particular se tiene

$$\langle \check{\xi} \rangle_{\alpha(t)} = \sqrt{2} \operatorname{Re} (\alpha(t))$$

y

$$\langle \check{\pi} \rangle_{\alpha(t)} = \sqrt{2} \operatorname{Im} (\alpha(t)).$$

El gráfico 5.5 es ilustrativo: El punto  $\alpha(t)$  representa el estado coherente del oscilador en cada instante, dando (excepto por un factor  $\sqrt{2}$ ) la parte real e imaginaria de  $\alpha(t)$  la posición y momentum promedios. Este punto rota con frecuencia angular  $\omega$  sobre la circunferencia de radio  $|\alpha|$ . La frecuencia angular  $\omega$  es la del oscilador clásico. Ejercicio: (Problema 5-3) Demuestre las siguientes relaciones:

(a)  $\langle \check{\xi}^2 \rangle_t = \frac{1}{2} (\alpha^2 e^{2i\omega t} + \alpha^{*2} e^{-2i\omega t} + 2|\alpha|^2 + 1)$

(b)  $\langle \check{\pi}^2 \rangle_t = -\frac{1}{2} (\alpha^2 e^{2i\omega t} + \alpha^{*2} e^{-2i\omega t} - 2|\alpha|^2 - 1)$

(c) Con estos resultados evalúe las varianzas de la posición y el momento y demuestre que  $(\Delta\xi)^2 = (\Delta\pi)^2 = 1/2$ . De esta manera queda demostrado que en todo instante

$$\Delta\xi \Delta\pi = 1/2.$$

### 5.9.5 Comentarios.

Los estados coherentes son autoestados del operador de bajada  $\check{a}$ . Este operador no es hermítico. Como consecuencia de esto se tiene que:

- No existe un observable asociado a este operador. El autovalor  $\alpha$ , por lo tanto, no necesariamente es real, En efecto, aún si en  $t = 0$  es real, al transcurrir el tiempo  $\alpha$  evoluciona de acuerdo a la ecuación (5.26), siendo en general un número complejo.
- El conjunto de vectores  $\{|\alpha\rangle\}$  no tiene por qué ser ortogonal, de hecho, no lo es. Analicemos que pasa con la ortogonalidad de los estados coherentes:

$$\begin{aligned} \langle \alpha | \beta \rangle &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2 - \frac{1}{2}|\beta|^2} \sum_{m,n} \frac{(\alpha^*)^m \beta^n}{\sqrt{m!n!}} \langle m | n \rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2)} \sum_n \frac{(\alpha^* \beta)^n}{n!} \\ &= e^{\alpha^* \beta - \frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2)}, \end{aligned}$$

por lo tanto

$$|\langle \alpha | \beta \rangle|^2 = e^{-|\alpha - \beta|^2}.$$

Deducimos que la distancia entre los puntos  $\alpha$  y  $\beta$  del plano complejo es una medida de la ortogonalidad de los estados coherentes  $|\alpha\rangle$  y  $|\beta\rangle$ .

- A pesar que los estados coherentes no son ortogonales, sí forman un conjunto completo. En efecto, mostraremos a continuación que

$$\check{Q} \equiv \frac{1}{\pi} \int |\alpha\rangle \langle \alpha| d(\text{Re}(\alpha)) d(\text{Im}(\alpha)) = \check{1}. \quad (5.27)$$

Para ello, usemos la ecuación (5.23) e introduzcamos coordenadas polares en el plano complejo  $\alpha$ :

$$\begin{aligned} \check{Q} &= \frac{1}{\pi} \int e^{-|\alpha|^2} \sum_{m,n} \frac{\alpha^m \alpha^{*n}}{\sqrt{n!m!}} |m\rangle \langle n| d(\text{Re}(\alpha)) d(\text{Im}(\alpha)) \\ &= \sum_{m,n} \frac{|m\rangle \langle n|}{\sqrt{m!n!}} \frac{1}{\pi} \int_0^\infty e^{-r^2} r^{m+n} r dr \underbrace{\int_0^{2\pi} d\theta e^{i(m-n)\theta}}_{2\pi\delta_{nm}} \\ &= \sum_m |m\rangle \langle m| \frac{1}{m!} \int_0^\infty \underbrace{dr^2 e^{-r^2} r^{2m}}_{m!} \\ &= \sum_m |m\rangle \langle m| = \check{1}. \end{aligned}$$

Usando (5.27), cualquier vector de estado del oscilador armónico se puede expresar en términos de estados coherentes. En efecto:

$$|\Psi\rangle = \check{1} |\Psi\rangle = \frac{1}{\pi} \int |\alpha\rangle \langle \alpha| \Psi\rangle d^2\alpha.$$

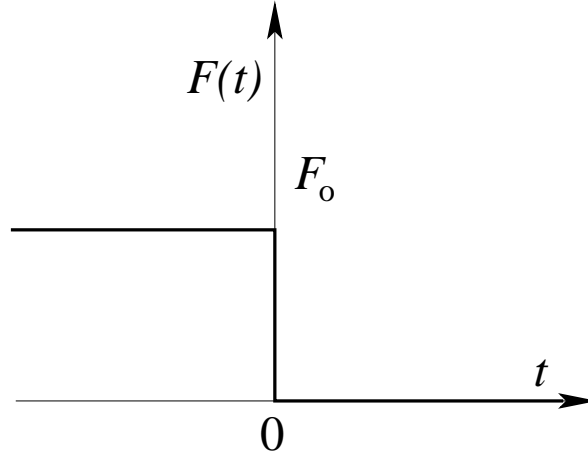


Figura 5.6: Fuerza externa que actúa sobre el oscilador analizado en el texto.

- En realidad, el conjunto de estados coherentes es sobrecompleto. En efecto, como  $\alpha$  puede tomar cualquier valor complejo, hay  $\aleph$  (infinito no numerable) estados coherentes. La dimensión del espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$  del oscilador armónico es sólo  $\aleph_0$  (infinito numerable).
- El operador  $\check{\mathbf{a}}^\dagger$  no tiene autoestados físicamente aceptables. Los autoestados del operador  $\check{\mathbf{a}}^\dagger$  divergen. En efecto, en lugar de ser “gaussianas” son proporcionales a  $e^{\xi^2/2}$ .

La importancia de los estados coherentes radica en que es ésta la realización que tienen los osciladores armónicos en el mundo macroscópico, y no simplemente el límite  $n \rightarrow \infty$  y  $\hbar \rightarrow 0$  de los autoestados  $|n\rangle$ . Para representar a un oscilador clásico es necesaria la superposición de muchos autoestados de energía del oscilador armónico.

### 5.9.6 Primera ilustración.

En esta sección encontraremos la solución a un problema que corresponde a un caso muy particular de un oscilador armónico forzado.

Consideremos un oscilador armónico sometido a la siguiente fuerza externa, ver figura 5.6:

$$F(t) = F_0 \Theta(-t) .$$

Para  $t < 0$  sobre el oscilador actúa una fuerza constante  $F_0$  que desaparece bruscamente a  $t = 0$ . Clásicamente esta fuerza da origen a un potencial tiempo dependiente  $V(x, t) = -F(t)x$ . Cuánticamente éste queda representado por

$$\check{V} = -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} F(t) (\check{\mathbf{a}} + \check{\mathbf{a}}^\dagger) .$$

El Hamiltoniano para el problema es, por lo tanto,

$$\check{H} = \hbar\omega \left( \check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} + \frac{1}{2} \right) - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} F(t) (\check{\mathbf{a}} + \check{\mathbf{a}}^\dagger) . \quad (5.28)$$

Denotemos por  $|\bar{0}\rangle, |\bar{1}\rangle, \dots, |\bar{n}\rangle, \dots$  a los autoestados de  $\check{\mathbf{H}}$  para  $t < 0$ , y por  $|0\rangle, |1\rangle, \dots, |n\rangle, \dots$  a los autoestados de  $\mathbf{H}$  para  $t > 0$ . Supongamos que para  $t < 0$  el sistema está en su estado fundamental  $|\bar{0}\rangle$ . En el instante  $t = 0^+$  la función de onda aún será  $\psi_0(\xi) = \langle \xi | \bar{0} \rangle$ , pero los autoestados del Hamiltoniano ahora son los estados  $|0\rangle, |1\rangle, \dots, |n\rangle$ , etc. Como  $|\bar{0}\rangle \neq |0\rangle$  el sistema no estará en el estado fundamental para  $t > 0$ .

Reescribamos el Hamiltoniano (5.28) de manera de expresarlo, para  $t < 0$ , explícitamente como un operador desplazado. Se tiene

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{H}} &= \hbar\omega \left( \check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} + \frac{1}{2} \right) - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} F(t) (\check{\mathbf{a}} + \check{\mathbf{a}}^\dagger) \\ &= \hbar\omega \left[ \left( \check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} + \frac{1}{2} \right) - \frac{\xi_0}{\sqrt{2}} (\check{\mathbf{a}} + \check{\mathbf{a}}^\dagger) \right], \end{aligned}$$

donde  $\xi_0$  es la posición clásica de equilibrio para  $t < 0$ , es decir,  $\xi_0 = \sqrt{m\omega/\hbar} x_0$  con  $x_0 = F_0/(m\omega^2)$ . Introduciendo el operador  $\check{\mathbf{a}} = \check{\mathbf{a}} - \xi_0/\sqrt{2}$  el Hamiltoniano se puede reescribir de la forma

$$\check{\mathbf{H}} = \hbar\omega \left( \check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega \frac{\xi_0^2}{4}.$$

Consideremos el operador  $\check{\mathbf{A}}(\alpha)$ , definido en la ecuación (5.25), con  $\alpha = \xi_0/\sqrt{2}$ :

$$\check{\mathbf{A}}(\alpha) = e^{-i\pi\xi_0}.$$

De acuerdo a un ejercicio se tiene que

$$\check{\mathbf{A}}^\dagger(-\alpha) \check{\mathbf{a}} \check{\mathbf{A}}(-\alpha) = \check{\mathbf{a}} - \xi_0/\sqrt{2} = \check{\mathbf{a}}.$$

Usando este resultado, el Hamiltoniano para  $t < 0$  se escribe de la forma

$$\check{\mathbf{H}} = e^{-i\pi\xi_0} \hbar\omega \left( \check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} + \frac{1}{2} \right) e^{+i\pi\xi_0},$$

siendo los autoestados

$$|\bar{n}\rangle = e^{-i\pi\xi_0} |n\rangle.$$

De la discusión anterior es claro que el estado inicial en que se encuentra el sistema para  $t < 0$  corresponde al estado fundamental desplazado

$$|\bar{0}\rangle = e^{-i\pi\xi_0} |0\rangle = \left| \frac{\xi_0}{\sqrt{2}} \right\rangle,$$

es decir, un estado coherente.

En el instante  $t = 0^+$  el valor de  $\alpha$  es  $\xi_0/\sqrt{2}$ , donde  $\xi_0$  es la amplitud de la oscilación que tendría el análogo clásico.

La expansión de  $|\bar{0}\rangle$  en términos de los estados del oscilador armónico es

$$|\bar{0}\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle.$$

La probabilidad de encontrar para  $t > 0$  al sistema en el estado  $|n\rangle$  viene dada por la distribución de Poisson:

$$P_n = \frac{1}{n!} \left( \frac{m\omega}{2\hbar} x_o^2 \right)^n \exp \left( -\frac{m\omega}{2\hbar} x_o^2 \right).$$

### 5.9.7 Segunda ilustración.

Consideremos la luz de un láser. Este produce una onda electromagnética coherente, siendo los campos eléctrico y magnético de la forma

$$\langle \vec{E} \rangle = \vec{E}_0 \cos(\omega t) \quad \text{y} \quad \langle \vec{B} \rangle = \vec{B}_0 \cos(\omega t),$$

donde  $\vec{E}_0$  y  $\vec{B}_0$  son grandes, o sea, corresponden a un oscilador armónico desplazado en una magnitud grande, cerca del límite clásico.

Hacemos incidir la luz sobre un fotocátodo adosado a un fotomultiplicador. El voltaje del pulso generado por el fotomultiplicador es proporcional al número de fotoelectrones generados en el fotocátodo, el que, a su vez, es igual al número de fotones que inciden sobre éste. En otras palabras, el fotocátodo corresponde al operador de número  $\hat{n}$ . La probabilidad de encontrar  $n$  fotones es  $|c_n|^2$ , dado por la ecuación (5.21). Al observar el resultado de este experimento en un multicanal se encuentra una distribución de Poisson (ver figura 5.7).

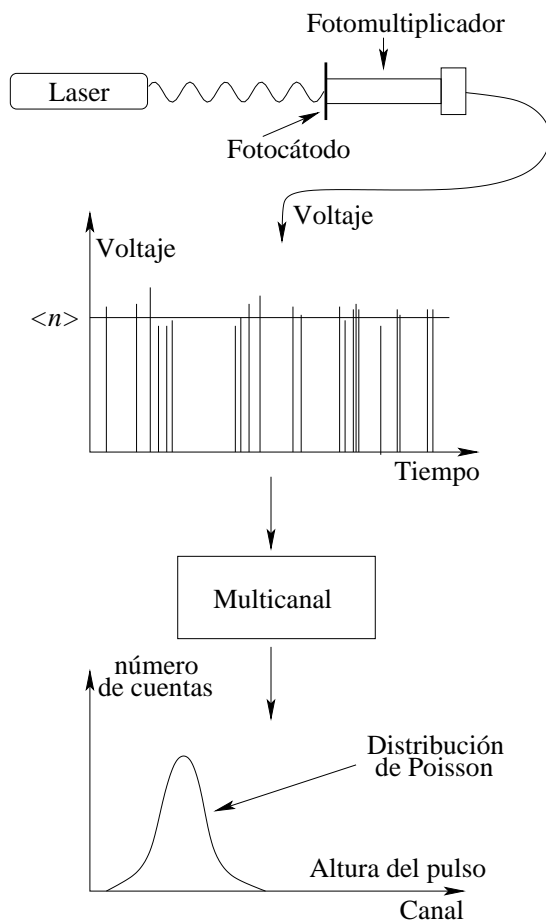


Figura 5.7: Luz coherente incidiendo sobre un fotocátodo. Se muestra esquemáticamente la disposición experimental y el resultado que finalmente se observa en un multicanal para la distribución de fotones de una onda electromagnética clásica.

## 5.10 El oscilador armónico en tres dimensiones.

Consideremos una partícula de masa  $m$  moviéndose en el espacio tridimensional bajo el efecto del potencial

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 .$$

En coordenadas cartesianas el Hamiltoniano de este problema es

$$\check{H} = \check{H}_x + \check{H}_y + \check{H}_z ,$$

donde

$$\check{H}_i = \frac{\check{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \check{r}_i^2 , \quad i = x, y, z .$$

es el Hamiltoniano de un oscilador armónico para cada una de las tres direcciones espaciales. La ecuación de Schrödinger estacionaria que debemos resolver es

$$\check{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle .$$

Notemos que  $\{\check{H}_x, \check{H}_y, \check{H}_z\}$  es un conjunto (completo) de observables compatibles; además cada uno de estos operadores depende de variables mutuamente independientes, luego su diagonalización conjunta se obtiene multiplicando autofunciones independientes<sup>1</sup>. En otras palabras,  $\langle \vec{r} | \psi \rangle = \psi(\vec{r})$  se puede escribir de la forma

$$\psi(\vec{r}) = \psi_x(x) \psi_y(y) \psi_z(z) .$$

La ecuación de Schrödinger queda

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 - E \right] \psi_x(x) \psi_y(y) \psi_z(z) = 0 .$$

Dividiendo por la función de onda se obtiene

$$\underbrace{\frac{1}{\psi_x} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right] \psi_x}_{\text{sólo depende de } x} + \underbrace{\frac{1}{\psi_y} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 \right] \psi_y}_{\text{sólo depende de } y} + \underbrace{\frac{1}{\psi_z} \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 z^2 \right] \psi_z}_{\text{sólo depende de } z} - E = 0 .$$

<sup>1</sup>Sea  $\mathcal{H}$  un espacio de Hilbert constituido por el producto tensorial de espacios de Hilbert  $\mathcal{H}_1$  y  $\mathcal{H}_2$ , es decir,  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . Denotemos por  $\check{A}_j$ , con  $j = 1, 2$ , a los conjuntos completos de operadores compatibles para cada uno de los espacios de Hilbert  $\mathcal{H}_j$ , siendo  $|\alpha_j\rangle$  los autoestados, es decir,  $\check{A}_j|\alpha_j\rangle = \alpha_j|\alpha_j\rangle$ ,  $j = 1, 2$ . Entonces una base de  $\mathcal{H}$  viene dada por el producto tensorial  $\{|\alpha_1, \alpha_2\rangle = |\alpha_1\rangle \otimes |\alpha_2\rangle\}$ . Esta base diagonaliza  $\{\check{A}_1 \otimes \check{1}, \check{1} \otimes \check{A}_2\}$ . En la representación de coordenadas estos autoestados son representados por un producto ordinario de funciones.

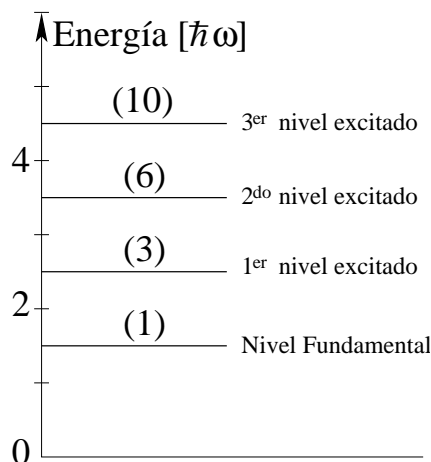


Figura 5.8: Espectro de energía de un oscilador tridimensional.

Denotemos las constantes de separación por  $E_x$ ,  $E_y$  y  $E_z$ . Entonces

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x_j^2 \right] \psi_j(x_j) = E_j \psi_j(x_j), \quad j = x, y, z,$$

con

$$E_x + E_y + E_z = E.$$

Hemos reducido el oscilador armónico tridimensional a tres osciladores en una dimensión, todos de la misma frecuencia.

Los autoestados del oscilador tridimensional son, por lo tanto,

$$\psi_{n_x n_y n_z}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | n_x n_y n_z \rangle = \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z) = \langle x | n_x \rangle \langle y | n_y \rangle \langle z | n_z \rangle,$$

donde  $|n\rangle$  son los autoestados de un oscilador armónico. Para los autovalores se tiene:

$$E = \hbar\omega \sum_{j=x,y,z} (n_j + 1/2) = \hbar\omega \left( n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right).$$

La energía del punto cero, es decir, la energía del estado fundamental, es  $E = \frac{3}{2}\hbar\omega$ . La tabla 5.1 da los niveles de energía que se obtienen con los distintos números cuánticos. Note que con combinaciones de números cuánticos distintas es generalmente posible obtener reiteradas veces el mismo valor para la autoenergía, es decir, los niveles del oscilador armónico tridimensional son degenerados (ver también figura 5.8).

Podemos introducir el número cuántico  $N$  dado por

$$N = n_x + n_y + n_z,$$

el cual puede tomar cualquier valor entero no negativo. La energía sólo depende de  $N$ ; en efecto,  $E_N = \hbar\omega(N + 3/2)$ . La paridad de los autoestados también sólo depende de  $N$ , siendo  $(-1)^N$ .

$n_x$	$n_y$	$n_z$	$N$	$E_N$	paridad	degeneración
0	0	0	0	$\frac{3}{2}\hbar\omega$	+	1
1	0	0	1	$\frac{5}{2}\hbar\omega$	-	3
0	1	0	1		-	
0	0	1	1		-	
2	0	0	2	$\frac{7}{2}\hbar\omega$	+	6
0	2	0	2		+	
0	0	2	2		+	
1	1	0	2		+	
1	0	1	2		+	
0	1	1	2		+	
3	0	0	3	$\frac{9}{2}\hbar\omega$	-	10
0	3	0	3		-	
0	0	3	3		-	
2	1	0	3		-	
2	0	1	3		-	
0	2	1	3		-	
1	2	0	3		-	
1	0	2	3		-	
0	1	2	3		-	
1	1	1	3		-	

Tabla 5.1: Oscilador armónico tridimensional en coordenadas cartesianas.

La alta degeneración que muestran los niveles de este oscilador tridimensional no es casual. Como hemos ya mencionado, cada simetría del problema suele estar asociado con una degeneración. El oscilador en tres dimensiones considerado en esta sección es isotrópico y además es invariante ante el intercambio  $\check{\xi}$  y  $\check{\pi}$ , o sea, al intercambio de la posición y el momento. Estas simetrías del Hamiltoniano dan origen a las degeneraciones de su espectro.



## 5.11 Problemas

5-1) Demuestre que el operador  $\check{\mathbf{A}} = e^{\alpha\check{\mathbf{a}}^\dagger - \alpha^*\check{\mathbf{a}}}$  satisface las siguientes relaciones:

- (a)  $\check{\mathbf{A}}^\dagger(\alpha) = \check{\mathbf{A}}(-\alpha)$
- (b)  $\check{\mathbf{A}}^\dagger(\alpha)\check{\mathbf{A}}(\alpha) = \check{\mathbf{A}}(\alpha)\check{\mathbf{A}}^\dagger(\alpha) = \check{\mathbf{1}}$ ,  
o sea, el operador  $\check{\mathbf{A}}$  es unitario.
- (c)  $\check{\mathbf{A}}(-\alpha)\check{\mathbf{A}}(\alpha) = \check{\mathbf{A}}^\dagger(\alpha)\check{\mathbf{A}}^\dagger(-\alpha) = \check{\mathbf{1}}$
- (d)  $\check{\mathbf{A}}^\dagger(\alpha)\check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{A}}(\alpha) = \check{\mathbf{a}} + \alpha\check{\mathbf{1}}$
- (e)  $\check{\mathbf{A}}^\dagger(\alpha)\check{\mathbf{a}}^\dagger\check{\mathbf{A}}(\alpha) = \check{\mathbf{a}}^\dagger + \alpha^*\check{\mathbf{1}}$

5-2) Demuestre que el operador  $\check{\mathbf{Q}} = \alpha\check{\mathbf{a}}^\dagger - \alpha^*\check{\mathbf{a}}$  es *antihermítico*<sup>2</sup>. Por consiguiente, el operador  $\check{\mathbf{A}} = e^{\check{\mathbf{Q}}}$  es unitario.

5-3) Demuestre las siguientes relaciones:

- (a)  $\langle \check{\xi}^2 \rangle_t = \frac{1}{2} (\alpha^2 e^{2i\omega t} + \alpha^{*2} e^{-2i\omega t} + 2|\alpha|^2 + 1)$
- (b)  $\langle \check{\pi}^2 \rangle_t = -\frac{1}{2} (\alpha^2 e^{2i\omega t} + \alpha^{*2} e^{-2i\omega t} - 2|\alpha|^2 - 1)$
- (c) Con los resultados anteriores evalúe las varianzas de la posición y el momento y demuestre que

$$(\Delta\xi)^2 = (\Delta\pi)^2 = \frac{1}{2}.$$

De esta manera queda demostrado que en todo instante

$$\Delta\xi \Delta\pi = 1/2.$$

5-4) Demuestre que la degeneración del nivel  $E_N$  del oscilador tridimensional viene dada por  $(N+1)(N+2)/2$ .

5-5) Considere un oscilador bidimensional (isotrópico). Encuentre el espectro y la degeneración de cada estado estacionario.

---

<sup>2</sup>Un operador  $\check{\mathbf{Q}}$  se dice que es antihermítico si  $\check{\mathbf{Q}}^\dagger = -\check{\mathbf{Q}}$ .

# Capítulo 6

## Momento angular.

### 6.1 Operadores de rotación en el espacio de Hilbert.

Consideremos una rotación en  $\mathbb{R}^3$

$$\vec{r}_0 \longrightarrow R_{\vec{\phi}} \vec{r}_0 = \vec{r}_0' .$$

Acá  $\vec{\phi} = \phi \hat{\phi}$ , donde  $\phi = |\vec{\phi}|$  indica la magnitud de la rotación y  $\hat{\phi}$  es un vector unitario que apunta a lo largo del eje de rotación, ver figura 6.1; el sentido de la misma se obtiene con la “regla de la mano derecha” (de modo que  $\vec{\phi}$  es un pseudovector).

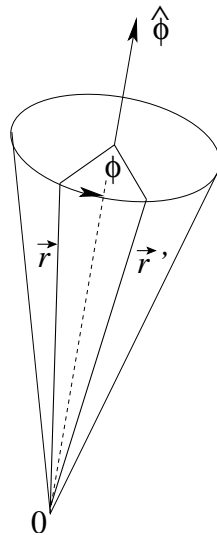


Figura 6.1: Rotación de  $\vec{r}_0$ .

Sea  $\{|\vec{r}_0\rangle\}_{\vec{r}_0 \in \mathbb{R}^3}$  la base de autoestados del operador  $\check{\mathbf{r}}$ , es decir,

$$\check{\mathbf{r}}|\vec{r}_0\rangle = \vec{r}_0|\vec{r}_0\rangle .$$

Introduzcamos el operador unitario  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$  que transforma los vectores de la base de autoestados de posición del espacio de Hilbert  $\mathcal{H}$  según:

$$|\vec{r}_0\rangle \longrightarrow \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}|\vec{r}_0\rangle \equiv |R_{\vec{\phi}}\vec{r}_0\rangle. \quad (6.1)$$

Por supuesto que se tiene que

$$\check{\mathbf{r}}|R_{\vec{\phi}}\vec{r}_0\rangle = \check{\mathbf{r}}\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}|\vec{r}_0\rangle = (R_{\vec{\phi}}\vec{r}_0)|R_{\vec{\phi}}\vec{r}_0\rangle.$$

De las relaciones anteriores concluimos que

$$\check{\mathbf{r}}\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}|\vec{r}_0\rangle = (R_{\vec{\phi}}\vec{r}_0)\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}|\vec{r}_0\rangle.$$

Es importante hacer notar que  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$  es un operador unitario de  $\mathcal{H}$ , mientras que  $R_{\vec{\phi}}$  es una rotación en el espacio ordinario  $\mathbb{R}^3$ , de modo que sus componentes son reales y conmutan con los operadores de  $\mathcal{H}$ <sup>1</sup>.

Multiplicando la última ecuación a la izquierda por  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1} = \check{\mathbf{U}}_{-\vec{\phi}}$ , se obtiene

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1}\check{\mathbf{r}}\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}|\vec{r}_0\rangle &= \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1}(R_{\vec{\phi}}\vec{r}_0)\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}|\vec{r}_0\rangle \\ &= (R_{\vec{\phi}}\vec{r}_0)\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1}\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}|\vec{r}_0\rangle \\ &= (R_{\vec{\phi}}\vec{r}_0)|\vec{r}_0\rangle \\ &= R_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{r}}|\vec{r}_0\rangle. \end{aligned}$$

Siendo esta ecuación válida para cualquier vector  $|\vec{r}_0\rangle$ , dada la linealidad de los operadores, resulta válido para cualquier  $|\psi\rangle$ . Se concluye que

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1}\check{\mathbf{r}}\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} = R_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{r}}. \quad (6.2)$$

Hemos demostrado que si  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$  es un operador de rotación en  $\mathcal{H}$ , entonces se cumple (6.2). Recíprocamente, mostremos ahora que si un operador  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$  cumple con (6.2), entonces es un operador de rotaciones en  $\mathcal{H}$ . Hay que mostrar que si (6.2) se cumple, entonces  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}|\vec{r}_0\rangle$  es autovector de  $\check{\mathbf{r}}$  con autovalor  $R_{\vec{\phi}}\vec{r}_0$ . Multiplicando (6.2) por  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$  y operando sobre un vector arbitrario  $|\vec{r}_0\rangle$ , se deduce que:

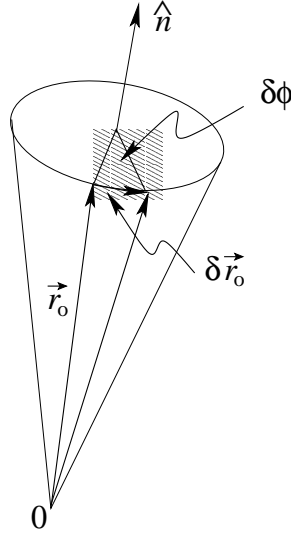
$$\begin{aligned} \check{\mathbf{r}}\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}|\vec{r}_0\rangle &= \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}R_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{r}}|\vec{r}_0\rangle \\ &= \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}(R_{\vec{\phi}}\vec{r}_0)|\vec{r}_0\rangle \\ &= (R_{\vec{\phi}}\vec{r}_0)\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}|\vec{r}_0\rangle. \end{aligned}$$

Hemos demostrado que (6.2) es una condición necesaria y suficiente para que  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$  sea un operador de rotaciones en  $\mathcal{H}$ .

La ecuación (6.2) representa tres relaciones entre operadores, una para cada componente vectorial:

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1}\check{\mathbf{r}}_i\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} = \sum_j R_{ij}(\vec{\phi})\check{\mathbf{r}}_j.$$

<sup>1</sup>  $R_{\vec{\phi}}$  puede ser representado por una matriz 3 x 3.

Figura 6.2: Rotación infinitesimal del  $\vec{r}_0$ .

Encontremos una expresión explícita para el operador  $\check{U}_{\vec{\phi}}$ . Para ello consideremos primeramente rotaciones infinitesimales  $\delta\vec{\phi}$  en  $\mathbb{R}^3$ , con  $\delta\vec{\phi} = \hat{n} \delta\phi$ . Es fácil convencerse que el efecto de tal rotación infinitesimal sobre un vector arbitrario  $\vec{r}_0$  es (ver figura 6.2)

$$R_{\delta\vec{\phi}} \vec{r}_0 = \vec{r}_0 + \delta\vec{r}_0 = \vec{r}_0 + \delta\phi \hat{n} \times \vec{r}_0 . \quad (6.3)$$

Consideremos ahora el operador  $\check{U}_{\delta\vec{\phi}}$ , asociado a  $R_{\delta\vec{\phi}}$ , que actúa en  $\mathcal{H}$ . Usando la definición (6.1) y la relación (6.3), obtenemos

$$\check{U}_{\delta\vec{\phi}} |\vec{r}_0\rangle = |\vec{r}_0 + \delta\phi \hat{n} \times \vec{r}_0\rangle .$$

Usando las propiedades de las traslaciones (ver ecuaciones (3.64) y (3.65)), se encuentra

$$\begin{aligned} \check{U}_{\delta\vec{\phi}} |\vec{r}_0\rangle &= \left[ \check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \delta\phi \hat{n} \times \vec{r}_0 \cdot \check{\mathbf{p}} \right] |\vec{r}_0\rangle \\ &= \left[ \check{\mathbf{1}} + \frac{i}{\hbar} \delta\phi \hat{n} \times \check{\mathbf{p}} \cdot \vec{r}_0 \right] |\vec{r}_0\rangle \\ &= \left[ \check{\mathbf{1}} + \frac{i}{\hbar} \delta\phi \hat{n} \times \check{\mathbf{p}} \cdot \check{\mathbf{r}} \right] |\vec{r}_0\rangle \\ &= \left[ \check{\mathbf{1}} + \frac{i}{\hbar} \check{\mathbf{p}} \times \check{\mathbf{r}} \cdot \delta\phi \hat{n} \right] |\vec{r}_0\rangle . \end{aligned}$$

Dado que el vector base  $|\vec{r}_0\rangle$  es arbitrario, se deduce que

$$\check{U}_{\delta\vec{\phi}} = \left[ \check{\mathbf{1}} + \frac{i}{\hbar} \sum_{j,k,l=1}^3 \epsilon_{jkl} \check{\mathbf{p}}_j \check{\mathbf{r}}_k \delta\phi_l \right] = \left[ \check{\mathbf{1}} + \frac{i}{\hbar} \sum_{j,k,l=1}^3 \epsilon_{jkl} \check{\mathbf{r}}_k \check{\mathbf{p}}_j \delta\phi_l \right] . \quad (6.4)$$

Acá se usó que  $[\check{\mathbf{r}}_j, \check{\mathbf{p}}_k] = 0$  si  $j \neq k$ . Podemos reescribir la ecuación (6.4) de la forma

$$\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}} = \check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}, \quad (6.5)$$

donde  $\check{\mathbf{L}}$  es el llamado *operador de momento angular orbital*, definido por

$$\check{\mathbf{L}} = \check{\mathbf{r}} \times \check{\mathbf{p}}. \quad (6.6)$$

El operador  $\check{\mathbf{L}}$  es autohermítico. En efecto

$$\check{\mathbf{L}}_j^\dagger = \sum_{k,\ell} \epsilon_{jkl} (\check{\mathbf{r}}_k \check{\mathbf{p}}_\ell)^\dagger = \sum_{k,\ell} \epsilon_{jkl} \check{\mathbf{p}}_\ell^\dagger \check{\mathbf{r}}_k^\dagger = \sum_{k,\ell} \epsilon_{jkl} \check{\mathbf{p}}_\ell \check{\mathbf{r}}_k = \sum_{k,\ell} \epsilon_{jkl} \check{\mathbf{r}}_k \check{\mathbf{p}}_\ell = \check{\mathbf{L}}_j,$$

es decir,  $\check{\mathbf{L}}^\dagger = \check{\mathbf{L}}$ . De acá sigue trivialmente que  $\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}}$  es un operador unitario.

Busquemos ahora una expresión explícita para el operador  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$  correspondiente a una rotación finita en  $\mathcal{H}$ . Empezamos por notar la existencia de un homomorfismo entre el producto de rotaciones euclidianas en  $\mathbb{R}^3$  y el producto de rotaciones en  $\mathcal{H}$ . En efecto, sean  $R_{\vec{\phi}_1}$  y  $R_{\vec{\phi}_2}$  dos rotaciones en  $\mathbb{R}^3$ , y sea  $R_{\vec{\phi}}$  la rotación “producto”, es decir,

$$R_{\vec{\phi}_1} R_{\vec{\phi}_2} = R_{\vec{\phi}},$$

donde  $\vec{\phi} = \vec{\phi}(\vec{\phi}_1, \vec{\phi}_2)$  es el ángulo de rotación resultante de componer las dos rotaciones sucesivas  $\vec{\phi}_1$  y  $\vec{\phi}_2$ . La función  $\vec{\phi}(\vec{\phi}_1, \vec{\phi}_2)$  es complicada, y no es de interés estudiarla aquí. Consideramos ahora los operadores de rotaciones en el espacio de Hilbert asociados a estas rotaciones en  $\mathbb{R}^3$ . Tenemos

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}_1} \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}_2} |\vec{r}_0\rangle = \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}_1} |R_{\vec{\phi}_2} \vec{r}_0\rangle = |R_{\vec{\phi}_1} R_{\vec{\phi}_2} \vec{r}_0\rangle = |R_{\vec{\phi}} \vec{r}_0\rangle = \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} |\vec{r}_0\rangle,$$

donde  $|\vec{r}_0\rangle$  es un vector arbitrario de la base de posición. De acá se deduce que

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}_1} \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}_2} = \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}(\vec{\phi}_1, \vec{\phi}_2)},$$

por lo tanto, los operadores  $\{\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}\}$  sobre  $\mathcal{H}$  preservan la ley de producto de las operaciones euclidianas propias sobre  $\mathbb{R}^3$ , son grupos homomorfos de operadores.

Dado que para dos rotaciones sobre el mismo eje se cumple  $R_{\phi\hat{n}} R_{\theta\hat{n}} = R_{(\phi+\theta)\hat{n}}$ , se tiene que

$$R_{\vec{\phi}} = \left( R_{\vec{\phi}/N} \right)^N,$$

y, por lo tanto,

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} = \left( \check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}} \right)^N, \quad \text{con} \quad \delta\vec{\phi} = \frac{\vec{\phi}}{N}.$$

En el límite  $N \rightarrow \infty$ ,  $\delta\vec{\phi}$  es infinitesimal, de modo que

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \frac{\vec{\phi}}{N} \cdot \check{\mathbf{L}} \right)^N = e^{-i\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}/\hbar}.$$

Note que  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^\dagger = \check{\mathbf{U}}_{-\vec{\phi}} = \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1}$ , luego,  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$  es un operador unitario.

## 6.2 Momento Angular Orbital.

Antes de continuar, analicemos algunas de las propiedades del operador momento angular orbital  $\check{\mathbf{L}}$ . En particular, encontremos los conmutadores de este operador consigo mismo y con los operadores de posición y momento.

Las componentes cartesianas de  $\check{\mathbf{L}}$  son:

$$\check{\mathbf{L}}_j = \sum_{k,\ell} \epsilon_{jkl} \check{\mathbf{r}}_k \check{\mathbf{p}}_\ell, \quad j = 1, 2, 3. \quad (6.7)$$

Consideremos la ecuación (6.2) para el caso de una rotación infinitesimal dada por la ecuación (6.5). Se tiene

$$\left[ \check{\mathbf{1}} + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}} \right] \check{\mathbf{r}} \left[ \check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}} \right] = R_{\delta\vec{\phi}} \check{\mathbf{r}} = \check{\mathbf{r}} + \delta\vec{\phi} \times \check{\mathbf{r}}.$$

En primer orden en  $\delta\vec{\phi}$  queda

$$\frac{i}{\hbar} \left[ \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}, \check{\mathbf{r}} \right] = \delta\vec{\phi} \times \check{\mathbf{r}}.$$

La componente  $j$  en esta igualdad da la relación

$$\sum_k \delta\phi_k [\check{\mathbf{r}}_j, \check{\mathbf{L}}_k] = i\hbar \sum_{k,\ell} \epsilon_{jkl} \delta\phi_k \check{\mathbf{r}}_\ell.$$

Como  $\delta\vec{\phi}$  es un vector arbitrario, se obtiene la siguiente relación de conmutación

$$[\check{\mathbf{r}}_j, \check{\mathbf{L}}_k] = i\hbar \sum_\ell \epsilon_{jkl} \check{\mathbf{r}}_\ell.$$

Evaluemos a continuación el conmutador entre el momento lineal y el momento angular. Usando el conmutador  $[\check{\mathbf{r}}_k, \check{\mathbf{p}}_s] = i\hbar \delta_{ks}$  y la ecuación (6.7), tenemos

$$[\check{\mathbf{p}}_s, \check{\mathbf{L}}_j] = \sum_{k,\ell} \epsilon_{jkl} [\check{\mathbf{p}}_s, \check{\mathbf{r}}_k] \check{\mathbf{p}}_\ell = -i\hbar \sum_\ell \epsilon_{jls} \check{\mathbf{p}}_\ell,$$

es decir,

$$[\check{\mathbf{p}}_i, \check{\mathbf{L}}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \check{\mathbf{p}}_k. \quad (6.8)$$

Conociendo los conmutadores de  $\check{\mathbf{L}}$  con los operadores de momento y posición, podemos evaluar el conmutador del operador de momento angular consigo mismo. Se obtiene:

$$[\check{\mathbf{L}}_i, \check{\mathbf{L}}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \check{\mathbf{L}}_k,$$

es decir, las distintas componentes del momento angular no conmutan entre sí.

### 6.3 Invariancia Rotacional.

Multipliquemos la relación (6.8) por  $\delta\phi_j$  y sumemos sobre  $j$ :

$$-\frac{i}{\hbar} \left[ \check{\mathbf{p}}_i, \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}} \right] = \left( \delta\vec{\phi} \times \check{\mathbf{p}} \right)_i .$$

Con esta ecuación y (6.5), se encuentra

$$\left[ \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}} \right] = \delta\vec{\phi} \times \check{\mathbf{p}} .$$

Aplicamos esta relación sobre un autoestado  $|\vec{p}_0\rangle$  del operador de momento lineal:

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{p}} \left( \check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}} |\vec{p}_0\rangle \right) &= \vec{p}_0 \check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}} |\vec{p}_0\rangle + \delta\vec{\phi} \times \vec{p}_0 |\vec{p}_0\rangle \\ &= \left( \vec{p}_0 + \delta\vec{\phi} \times \vec{p}_0 \right) \check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}} |\vec{p}_0\rangle + \mathcal{O}((\delta\phi)^2) . \end{aligned}$$

De este modo

$$\check{\mathbf{p}} \left( \check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}} |\vec{p}_0\rangle \right) = R_{\delta\vec{\phi}} \vec{p}_0 \left( \check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}} |\vec{p}_0\rangle \right) ,$$

lo que permite la identificación

$$\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}} |\vec{p}_0\rangle = |R_{\delta\vec{\phi}} \vec{p}_0\rangle .$$

Sea  $\delta\vec{\phi} = \vec{\phi}/N$ . Usando el homomorfismo entre los  $\{\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}\}$  y los  $\{R_{\vec{\phi}}\}$ , tenemos, al aplicar  $N$  veces  $\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}}$ ,

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} |\vec{p}_0\rangle = |R_{\vec{\phi}} \vec{p}_0\rangle .$$

De este modo los operadores  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$  no sólo rotan los autoestados de posición, sino que también los autoestados de momento lineal. Repitiendo el proceso que nos llevó de la ecuación (6.1) a la ecuación (6.2), deducimos la siguiente relación entre operadores:

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1} \check{\mathbf{p}} \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} = R_{\vec{\phi}} \check{\mathbf{p}} .$$

En general, para un operador  $\check{\mathbf{F}} = \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}})$  se obtiene

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1} \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} = \check{\mathbf{F}}(R_{\vec{\phi}} \check{\mathbf{r}}, R_{\vec{\phi}} \check{\mathbf{p}}) ,$$

como es fácil de ver al expandir  $\check{\mathbf{F}}$  en series de Taylor.

Para rotaciones en  $\mathbb{R}^3$  se tiene que:

$$\vec{r} \cdot \vec{r} = (R_{\vec{\phi}} \vec{r}) \cdot (R_{\vec{\phi}} \vec{r}) , \quad \vec{p} \cdot \vec{p} = (R_{\vec{\phi}} \vec{p}) \cdot (R_{\vec{\phi}} \vec{p}) \quad \text{y} \quad \vec{r} \cdot \vec{p} = (R_{\vec{\phi}} \vec{r}) \cdot (R_{\vec{\phi}} \vec{p}) ,$$

luego, si  $\check{\mathbf{F}} = \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}^2, \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{p}}^2)$ , entonces  $\check{\mathbf{F}}$  es invariante ante  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$ , es decir

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1} \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}^2, \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{p}}^2) \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} = \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}^2, \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{p}}^2) .$$

Si  $\check{\mathbf{F}}$  es invariante ante  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$ ,  $\forall \vec{\phi}$ , entonces  $[\check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}] = 0$ .

**Proposición 6.1**

$$\left[ \check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} \right] = 0 \quad \forall \vec{\phi} \iff \left[ \check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{L}} \right] = 0 .$$

**Demostración**

- (i) Supongamos que  $\left[ \check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{L}} \right] = 0$ , entonces, como  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$  es sólo función del operador  $\check{\mathbf{L}}$ , se tiene que  $\left[ \check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} \right] = 0$ .
- (ii) Supongamos que  $\left[ \check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} \right] = 0 \quad \forall \vec{\phi}$ . Entonces, en particular, esta relación se cumple para rotaciones infinitesimales  $\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}}$ , luego,

$$\begin{aligned} 0 &= \check{\mathbf{F}}\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}} - \check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}}\check{\mathbf{F}} \\ &= \check{\mathbf{F}} \left( \check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}} \right) - \left( \check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}} \right) \check{\mathbf{F}} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \check{\mathbf{F}} \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}} + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}} \check{\mathbf{F}} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \left[ \check{\mathbf{F}} \check{\mathbf{L}} - \check{\mathbf{L}} \check{\mathbf{F}} \right] = -\frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \left[ \check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{L}} \right] , \end{aligned}$$

luego,  $\left[ \check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{L}} \right] = 0$ .

**Resumen:**

Si el Hamiltoniano  $\check{\mathbf{H}} = \check{\mathbf{H}}(\check{\mathbf{r}}^2, \check{\mathbf{p}}^2, \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}})$ , con  $\check{\mathbf{r}}^2 = \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{r}}$  y  $\check{\mathbf{p}}^2 = \check{\mathbf{p}} \cdot \check{\mathbf{p}}$ , entonces  $\check{\mathbf{H}}$  es invariante bajo rotaciones. La afirmación anterior implica

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1} \check{\mathbf{H}} \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} = \check{\mathbf{H}} \iff \left[ \check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} \right] = 0 \iff \left[ \check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{L}} \right] = 0 \implies \frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{L}} \rangle = 0 .$$

Es decir, un sistema con un Hamiltoniano esféricamente simétrico bajo rotaciones de posición y momento lineal, posee como constante de movimiento al momento angular orbital.

**Definición 6.1** *Operadores vectoriales son un trío de operadores en  $\mathcal{H}$ , que bajo rotaciones transforman como*

$$\check{\mathbf{F}} \left( R_{\vec{\phi}} \check{\mathbf{r}}, R_{\vec{\phi}} \check{\mathbf{p}} \right) = R_{\vec{\phi}} \check{\mathbf{F}} \left( \check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}} \right) .$$

Los operadores  $\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{L}} = \check{\mathbf{r}} \times \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{p}} \times \check{\mathbf{L}}$ , son operadores vectoriales, recuerde que el producto cruz de dos vectores transforma como un vector ante rotaciones propias.

Si  $\check{\mathbf{F}}$  es un operador vectorial, se deduce que

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1} \check{\mathbf{F}} \left( \check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}} \right) \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} = R_{\vec{\phi}} \check{\mathbf{F}} \left( \check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}} \right) , \quad (6.9)$$



o bien,

$$e^{i\vec{\phi}\cdot\check{\mathbf{L}}/\hbar} \check{\mathbf{F}} e^{-i\vec{\phi}\cdot\check{\mathbf{L}}/\hbar} = R_{\vec{\phi}} \check{\mathbf{F}} .$$

Para rotaciones infinitesimales se obtiene que

$$\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}}^{-1} \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) \check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}} = \check{\mathbf{F}} + \frac{i}{\hbar} \left[ \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}, \check{\mathbf{F}} \right] .$$

Por otra parte

$$R_{\delta\vec{\phi}} \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) = \check{\mathbf{F}} + \delta\vec{\phi} \times \check{\mathbf{F}} ,$$

luego, reemplazando estas dos últimas ecuaciones en la definición de operador vectorial, se obtiene la relación

$$\frac{i}{\hbar} \left[ \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}, \check{\mathbf{F}} \right] = \delta\vec{\phi} \times \check{\mathbf{F}} .$$

Dado que el ángulo infinitesimal  $\delta\vec{\phi}$  es arbitrario podemos elegir  $\delta\vec{\phi} = \delta\phi \hat{e}_j$ , concluyendo

$$\frac{i}{\hbar} \left[ \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}, \check{\mathbf{F}}_i \right] = \sum_j \frac{i}{\hbar} \delta\phi_j \left[ \check{\mathbf{L}}_j, \check{\mathbf{F}}_i \right] = \sum_{jk} \epsilon_{ijk} \delta\phi \check{\mathbf{F}}_k ,$$

luego,

$$\left[ \check{\mathbf{F}}_i, \check{\mathbf{L}}_j \right] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \check{\mathbf{F}}_k . \quad (6.10)$$

Es inmediato revertir el desarrollo para una rotación infinitesimal  $\delta\vec{\phi}$ , pasando de la relación (6.10) a la ecuación (6.9) y aplicando reiteradamente el resultado para rotaciones infinitesimales, obtener la relación (6.9) para una rotación finita. De este modo:

**Proposición 6.2** Todo operador  $\check{\mathbf{F}}$  que cumple con la ecuación (6.10) es un operador vectorial, y a la inversa, todo operador vectorial cumple con relación, (6.10).

El conjunto de operadores  $\{\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}\}_{|\vec{\phi}| \leq \pi}$  forman un grupo, el así llamado grupo de simetría de las rotaciones propias en  $\mathcal{H}$ . Tal grupo es isomorfo al grupo de rotaciones en  $\mathbb{R}^3$ :  $\{R_{\vec{\phi}}\}_{|\vec{\phi}| \leq \pi}$ , y se denomina *grupo*  $SO_3$ .

Por último, hacemos notar que si  $\check{\mathbf{A}}$  y  $\check{\mathbf{B}}$  son operadores vectoriales, entonces se cumple que

(i)  $\check{\mathbf{A}} \cdot \check{\mathbf{B}}$  es un invariante ante rotaciones, es decir,

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1} \check{\mathbf{A}} \cdot \check{\mathbf{B}} \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} = \left( R_{\vec{\phi}} \check{\mathbf{A}} \right) \cdot \left( R_{\vec{\phi}} \check{\mathbf{B}} \right) = \check{\mathbf{A}} \cdot \check{\mathbf{B}} .$$

(ii)  $\check{\mathbf{A}} \times \check{\mathbf{B}}$  es un nuevo operador vectorial

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} \left( \check{\mathbf{A}} \times \check{\mathbf{B}} \right) \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} = R_{\vec{\phi}} \check{\mathbf{A}} \times R_{\vec{\phi}} \check{\mathbf{B}} = R_{\vec{\phi}} \left( \check{\mathbf{A}} \times \check{\mathbf{B}} \right) .$$

## 6.4 Autovalores y autovectores.

Comenzamos esta sección recordando algunos de los resultados encontrados en secciones anteriores. El operador momento angular orbital viene definido por

$$\check{\mathbf{L}} = \check{\mathbf{r}} \times \check{\mathbf{p}} ,$$

y satisface las siguientes relaciones de conmutación:

$$\begin{aligned} [\check{\mathbf{L}}_i, \check{\mathbf{L}}_j] &= i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \check{\mathbf{L}}_k \\ [\check{\mathbf{r}}_i, \check{\mathbf{L}}_j] &= i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \check{\mathbf{r}}_k \end{aligned}$$

y

$$[\check{\mathbf{p}}_i, \check{\mathbf{L}}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \check{\mathbf{p}}_k .$$

Estas tres relaciones derivan de la relación (6.10) y del hecho que  $\check{\mathbf{r}}$ ,  $\check{\mathbf{p}}$  y  $\check{\mathbf{L}}$  son operadores vectoriales.

Como los tres operadores  $\{\check{\mathbf{L}}_x, \check{\mathbf{L}}_y, \check{\mathbf{L}}_z\}$  no conmutan entre sí, no pueden ser todos ellos incluidos en un conjunto completo de operadores compatibles del sistema. De acuerdo a la relación de incerteza de Heisenberg tenemos que:

$$[\check{\mathbf{L}}_i, \check{\mathbf{L}}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \check{\mathbf{L}}_k \implies (\Delta L_i)(\Delta L_j) \geq \frac{\hbar}{2} |\epsilon_{ijk} \langle \check{\mathbf{L}}_k \rangle| .$$

En vista de esta última relación, es imposible medir simultáneamente dos componentes del momento angular orbital  $\check{\mathbf{L}}$ , a menos que  $\langle \check{\mathbf{L}}_j \rangle = 0$  para las tres componentes  $j = x, y, z$ .

Definamos el operador

$$\boxed{\check{\mathbf{L}}^2 = \check{\mathbf{L}} \cdot \check{\mathbf{L}} = \check{\mathbf{L}}_x^2 + \check{\mathbf{L}}_y^2 + \check{\mathbf{L}}_z^2 .}$$

Dado que  $\check{\mathbf{L}}$  es un operador vectorial,  $\check{\mathbf{L}}^2$  es invariante ante rotaciones, y por tanto

$$[\check{\mathbf{L}}^2, \check{\mathbf{L}}_j] = 0 , \quad j = x, y, z .$$

Esta última relación implica que para cualquier componente  $i = x, y, z$ , las magnitudes físicas asociadas a los dos operadores  $\{\check{\mathbf{L}}^2, \check{\mathbf{L}}_j\}$  pueden ser simultáneamente observadas, o sea, pueden pertenecer a un conjunto completo de observables compatibles. En ese caso existen estados  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  que son simultáneamente autoestados de ambos operadores. No es posible incluir otra componente de  $\check{\mathbf{L}}$  en el conjunto de observables compatibles, a menos que  $\check{\mathbf{L}}^2$  tenga autovalor nulo al actuar sobre  $|\psi\rangle$ .

En el desarrollo de la Mecánica Cuántica se encontrarán en diversas ocasiones tríos de operadores autohermíticos  $\check{\mathbf{J}} = (\check{\mathbf{J}}_x, \check{\mathbf{J}}_y, \check{\mathbf{J}}_z)$  que satisfacen entre sí las mismas reglas de conmutación del momento angular orbital, esto es, cumplen formalmente con

$$[\check{\mathbf{J}}_i, \check{\mathbf{J}}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \check{\mathbf{J}}_k . \quad (6.11)$$

Como ejemplo, el momento angular intrínseco (o spin) de una partícula elemental cumple tales reglas de conmutación. También existen operadores que no tienen relación alguna con la idea intuitiva de “momento angular”, y que también cumplen con (6.11), como por ejemplo ciertos generadores de simetrías de algunos Hamiltonianos, como el caso del átomo de hidrógeno y el oscilador armónico bidimensional. Así pues, para efectos de mayor generalidad, conviene basar los desarrollos siguientes exclusivamente en la relación (6.11), y no usar para nada las propiedades específicas del momento angular orbital.

La relación (6.11) implica que  $\check{\mathbf{J}}$  es un “operador vectorial” al usar el propio  $\check{\mathbf{J}}$  como “generador de rotaciones”:

$$e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\check{\mathbf{J}}} \check{\mathbf{J}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\check{\mathbf{J}}} = R(\vec{\phi}) \check{\mathbf{J}} . \quad (6.12)$$

El operador  $R(\vec{\phi})$  no es necesariamente es un operador de rotación en el espacio real en que nos desenvolvemos, sino que puede ser una rotación en un espacio abstracto. Cuando  $\check{\mathbf{J}}$  es el momento angular orbital  $\vec{\mathbf{L}}$ , entonces  $R(\vec{\phi})$  sí corresponde a rotaciones en nuestro espacio usual  $\mathbb{R}^3$ .

A partir de (6.12) se deduce que

$$\begin{aligned} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\check{\mathbf{J}}} \check{\mathbf{J}}^2 e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\check{\mathbf{J}}} &= e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\check{\mathbf{J}}} \check{\mathbf{J}} \cdot \check{\mathbf{J}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\check{\mathbf{J}}} \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\check{\mathbf{J}}} \check{\mathbf{J}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\check{\mathbf{J}}} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\check{\mathbf{J}}} \check{\mathbf{J}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\check{\mathbf{J}}} \\ &= \left( R(\vec{\phi}) \check{\mathbf{J}} \right) \cdot \left( R(\vec{\phi}) \check{\mathbf{J}} \right) = \check{\mathbf{J}}^2 . \end{aligned} \quad (6.13)$$

Tomando el límite  $\vec{\phi} \rightarrow 0$  en (6.13), o usando las reglas de conmutación (6.11), es fácil demostrar que

$$[\check{\mathbf{J}}^2, \check{\mathbf{J}}_i] = 0 , \quad i = x, y, z .$$

En el conjunto de operadores compatibles podemos incorporar a  $\check{\mathbf{J}}^2 = \check{\mathbf{J}}^2$  y a una componente de  $\check{\mathbf{J}}$ . Por fijar ideas, trabajemos con  $\{\check{\mathbf{J}}^2, \check{\mathbf{J}}_z\}$  como observables compatibles y sea  $|\lambda m\rangle$  un autoestado de ambos observables, es decir,

$$\check{\mathbf{J}}^2 |\lambda m\rangle = \hbar^2 \lambda |\lambda m\rangle \quad \text{y} \quad \check{\mathbf{J}}_z |\lambda m\rangle = \hbar m |\lambda m\rangle .$$

Usando la ecuación (6.13) podemos escribir

$$e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\check{\mathbf{J}}} \check{\mathbf{J}}^2 e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\check{\mathbf{J}}} |\lambda m\rangle = \hbar^2 \lambda |\lambda m\rangle ,$$

o sea,

$$\check{\mathbf{J}}^2 \left( e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \cdot \check{\mathbf{J}}} | \lambda m \rangle \right) = \hbar^2 \lambda \left( e^{-\frac{i}{\hbar} \phi \cdot \check{\mathbf{J}}} | \lambda m \rangle \right) .$$

De este modo, se encuentra que mediante rotaciones del estado  $| \lambda m \rangle$  es posible obtener otros autoestados de  $\check{\mathbf{J}}^2$  con el mismo autovalor  $\hbar^2 \lambda$ .

Estudiemos con mayor detalle las características del espacio de degeneración de  $\check{\mathbf{J}}^2$ . Para ello, introduzcamos los operadores

$$\check{\mathbf{J}}_+ = \check{\mathbf{J}}_x + i \check{\mathbf{J}}_y \quad \text{y} \quad \check{\mathbf{J}}_- = \check{\mathbf{J}}_x - i \check{\mathbf{J}}_y .$$

Dado el carácter autohermítico de  $\check{\mathbf{J}}_x$  y  $\check{\mathbf{J}}_y$ , se cumple

$$(\check{\mathbf{J}}_+)^{\dagger} = \check{\mathbf{J}}_- \quad \text{y} \quad (\check{\mathbf{J}}_-)^{\dagger} = \check{\mathbf{J}}_+ .$$

Es inmediato mostrar que  $\check{\mathbf{J}}_+$  y  $\check{\mathbf{J}}_-$  cumplen con las siguientes reglas de conmutación

$$[\check{\mathbf{J}}_z, \check{\mathbf{J}}_+] = +\hbar \check{\mathbf{J}}_+ , \tag{6.14}$$

$$[\check{\mathbf{J}}_z, \check{\mathbf{J}}_-] = -\hbar \check{\mathbf{J}}_- , \tag{6.15}$$

y

$$[\check{\mathbf{J}}^2, \check{\mathbf{J}}_{\pm}] = 0 . \tag{6.16}$$

A partir del último conmutador se deduce que

$$\check{\mathbf{J}}^2 (\check{\mathbf{J}}_{\pm} | \lambda m \rangle) = \hbar^2 \lambda (\check{\mathbf{J}}_{\pm} | \lambda m \rangle) ,$$

de modo que los  $\check{\mathbf{J}}_{\pm} | \lambda m \rangle$  también son autovectores de  $\check{\mathbf{J}}^2$  con el mismo autovalor original,  $\hbar^2 \lambda$ .

Analicemos cómo se comportan estos vectores ante la acción de  $\check{\mathbf{J}}_z$ . Para ello reescribimos las relaciones (6.14) y (6.15) en la forma

$$\check{\mathbf{J}}_z \check{\mathbf{J}}_{\pm} = \check{\mathbf{J}}_{\pm} (\check{\mathbf{J}}_z \pm \hbar \mathbf{1}) .$$

Operando con esta igualdad sobre un vector  $| \lambda m \rangle$  concluimos que

$$\check{\mathbf{J}}_z (\check{\mathbf{J}}_+ | \lambda m \rangle) = \hbar(m+1) (\check{\mathbf{J}}_+ | \lambda m \rangle)$$

y

$$\check{\mathbf{J}}_z (\check{\mathbf{J}}_- | \lambda m \rangle) = \hbar(m-1) (\check{\mathbf{J}}_- | \lambda m \rangle) .$$

Es decir, al actuar sobre un vector  $| \lambda m \rangle$  con los operadores  $\check{\mathbf{J}}_{\pm}$ , el autovalor de  $\check{\mathbf{J}}^2$ , que es  $\hbar^2 \lambda$ , no se altera, mientras que el autovalor ante el operador  $\check{\mathbf{J}}_z$  sí se modifica, pasa de  $\hbar m$

a  $\hbar(m \pm 1)$ . Por esta razón, los operadores  $\check{\mathbf{J}}_{\pm}$  se denominan “operadores de subida” y de “bajada”, respectivamente. De la discusión anterior se tiene que

$$\check{\mathbf{J}}_+ |\lambda m\rangle = \alpha_+(m) |\lambda, m+1\rangle \quad (6.17)$$

y

$$\check{\mathbf{J}}_- |\lambda m\rangle = \alpha_-(m) |\lambda, m-1\rangle . \quad (6.18)$$

Para evaluar las constantes  $\alpha_{\pm}$  resultan útiles las siguientes expresiones

$$\check{\mathbf{J}}_+ \check{\mathbf{J}}_- = \check{\mathbf{J}}_x^2 + \check{\mathbf{J}}_y^2 - i [\check{\mathbf{J}}_x, \check{\mathbf{J}}_y] = \check{\mathbf{J}}^2 - \check{\mathbf{J}}_z^2 + \hbar \check{\mathbf{J}}_z ,$$

y

$$\check{\mathbf{J}}_- \check{\mathbf{J}}_+ = \check{\mathbf{J}}^2 - \check{\mathbf{J}}_z^2 - \hbar \check{\mathbf{J}}_z .$$

Tenemos

$$\begin{aligned} 0 \leq |\alpha_+|^2 &= (\check{\mathbf{J}}_+ |\lambda m\rangle)^\dagger (\check{\mathbf{J}}_+ |\lambda m\rangle) \\ &= \langle \lambda m | \check{\mathbf{J}}_- \check{\mathbf{J}}_+ | \lambda m \rangle = \hbar^2 (\lambda - m(m+1)) . \end{aligned} \quad (6.19)$$

En forma análoga:

$$\begin{aligned} 0 \leq |\alpha_-|^2 &= (\check{\mathbf{J}}_- |\lambda m\rangle)^\dagger (\check{\mathbf{J}}_- |\lambda m\rangle) \\ &= \langle \lambda m | \check{\mathbf{J}}_+ \check{\mathbf{J}}_- | \lambda m \rangle = \hbar^2 (\lambda - m(m-1)) . \end{aligned} \quad (6.20)$$

Sumando estas dos desigualdades obtenemos que  $\lambda - m^2 \geq 0$ , o sea,

$$-\sqrt{\lambda} \leq m \leq +\sqrt{\lambda} . \quad (6.21)$$

Esta desigualdad parece estar en contradicción con las relaciones (6.17) y (6.18), pues dichas relaciones nos llevan a escribir

$$(\check{\mathbf{J}}_{\pm})^h |\lambda m\rangle = (\text{constante}) |\lambda, m \pm h\rangle , \quad (6.22)$$

de modo que, al elegir  $h$  suficientemente grande, aparentemente podemos encontrar valores de  $m' = m \pm h$  que no cumplan con la desigualdad (6.21). Esta aparente contradicción se obvia sólo si suponemos que la constante envuelta en la ecuación (6.22) es nula a partir de cierto valor de  $h$ .

Sea  $m_1$  el valor máximo de  $m$  que se puede obtener al aplicar sucesivamente  $\check{\mathbf{J}}_+$  a  $|\lambda m\rangle$ . O sea,

$$\check{\mathbf{J}}_+ |\lambda m_1\rangle = 0 .$$

Al aplicar  $\check{\mathbf{J}}_-$  sucesivamente a  $|\lambda m_1\rangle$  el número cuántico  $m$  volverá a disminuir. Después de aplicarlo  $h$  veces, se llegará a un valor mínimo  $m_2 = m_1 - h$ , de manera que

$$\check{\mathbf{J}}_- |\lambda m_2\rangle = 0 ,$$

con

$$m_1 - m_2 = h \in \mathbb{N}^0 . \quad (6.23)$$

De las relaciones anteriores y las ecuaciones (6.17) y (6.18) que definen las constantes  $\alpha_{\pm}(m)$  se tiene que

$$\alpha_+(m_1) = \alpha_-(m_2) = 0 .$$

Usando este resultado en (6.19) y (6.20) se obtiene que

$$\begin{aligned} 0 &= \hbar^2 (\lambda - m_1(m_1 + 1)) \\ 0 &= \hbar^2 (\lambda - m_2(m_2 - 1)) , \end{aligned}$$

es decir,

$$\lambda = m_1(m_1 + 1) = m_2(m_2 - 1) .$$

Esta ecuación, junto con (6.23), implica que

$$m_1 = \frac{h}{2} \quad \text{y} \quad m_2 = -\frac{h}{2} = -m_1 .$$

El valor máximo que puede tomar  $m$  lo denotamos por  $j$ , esto es  $j = m_1 = h/2 = -m_2$ . Como  $h$  es entero,  $j$  puede ser entero o semientero. También se tiene que

$$\lambda = j(j + 1) .$$

**Notación:** De aquí en adelante, siguiendo la tradición, los autovectores de  $\check{\mathbf{J}}^2$  y  $\check{\mathbf{J}}_z$  los denotaremos por  $|jm\rangle$ .

Con esta notación se tiene que:

$$\check{\mathbf{J}}^2 |jm\rangle = \hbar^2 j(j + 1) |jm\rangle$$

y

$$\check{\mathbf{J}}_z |jm\rangle = \hbar m |jm\rangle .$$

De acuerdo a lo dicho anteriormente, los valores posibles para  $j$  son

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots ,$$

y para un  $j$  fijo los valores que puede tomar  $m$  son

$$m \in \{-j, -j + 1, \dots, j - 1, j\} ,$$

en total  $2j + 1$  valores.

Debido a la importancia de estos resultados los recopilamos:

Para un trío de operadores ( $\check{\mathbf{J}}_x, \check{\mathbf{J}}_y, \check{\mathbf{J}}_z$ ), que cumple las leyes de conmutación de momento angular  $[\check{\mathbf{J}}_i, \check{\mathbf{J}}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \check{\mathbf{J}}_k$ , se tiene que  $\{\check{\mathbf{J}}^2, \check{\mathbf{J}}_z\}$  forman un conjunto de observables compatibles. Al diagonalizar dicho conjunto, el espacio de Hilbert se “desglosa” en subespacios  $\mathcal{H}_j$ , caracterizados por un autovalor bien definido de  $\check{\mathbf{J}}^2$ ,  $\hbar^2 j(j+1)$ , con  $j$  entero o semientero. Dichos espacios poseen dimensión  $(2j+1)$  y una base es

$$\{|jm\rangle, \quad m = -j, -j+1, \dots, j-1, j\} .$$

Dicha base está caracterizada por las ecuaciones

$$\check{\mathbf{J}}^2 |jm\rangle = \hbar^2 j(j+1) |jm\rangle \quad (6.24)$$

$$\check{\mathbf{J}}_z |jm\rangle = \hbar m |jm\rangle \quad (6.25)$$

$$\check{\mathbf{J}}_{\pm} |jm\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle , \quad (6.26)$$

con  $\check{\mathbf{J}}_{\pm} = \check{\mathbf{J}}_x \pm i\check{\mathbf{J}}_y$ .

Hacemos notar que cada subespacio  $\mathcal{H}_j$  es invariante ante la acción de cualquiera de las componentes del operador vectorial  $\check{\mathbf{J}}$ , esto es,

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}_j \implies \check{\mathbf{J}}_i |\psi\rangle \in \mathcal{H}_j ,$$

lo cual se ve inmediatamente al poner

$$\check{\mathbf{J}}_x = \frac{1}{2} (\check{\mathbf{J}}_+ + \check{\mathbf{J}}_-)$$

y

$$\check{\mathbf{J}}_y = \frac{1}{2i} (\check{\mathbf{J}}_+ - \check{\mathbf{J}}_-) ,$$

y usar las ecuaciones (6.25) y (6.26). Del mismo modo, se encuentra que  $\mathcal{H}_j$  es invariante ante  $(\check{\mathbf{J}} \cdot \vec{\phi})$ , donde  $\vec{\phi}$  es un ángulo arbitrario, o bien ante  $(\check{\mathbf{J}} \cdot \vec{\phi})^n$ , con  $n \in \mathbb{N}$ . De lo anterior se concluye, al recurrir a una expansión en series de Taylor, que el espacio  $\mathcal{H}_j$  es invariante ante rotaciones generadas por  $\check{\mathbf{J}}$ :

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}_j \implies e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{J}}} |\psi\rangle \in \mathcal{H}_j \quad \forall |\vec{\phi}| .$$

Demostremos una relación interesante que involucra a operadores vectoriales. Sea  $\check{\mathbf{F}}$  un trío de operadores que cumple las leyes de conmutación

$$[\check{\mathbf{F}}_j, \check{\mathbf{J}}_k] = i\hbar \sum_{\ell} \epsilon_{jkl} \check{\mathbf{F}}_{\ell} , \quad (6.27)$$

donde  $\check{\mathbf{J}}$  es un operador “tipo momento angular”, *i.e.* que cumple con relaciones de conmutación (6.11). Si un operador cumple con las reglas de conmutación (6.27) decimos que tal operador es un *operador vectorial respecto a  $\check{\mathbf{J}}$* . Definamos

$$\check{\mathbf{F}}_{\pm} = \check{\mathbf{F}}_x \pm i\check{\mathbf{F}}_y . \quad (6.28)$$

A partir del conmutador (6.27) se deduce que también se satisfacen los siguientes conmutadores:

$$[\check{\mathbf{J}}_+, \check{\mathbf{F}}_+] = [\check{\mathbf{J}}_-, \check{\mathbf{F}}_-] = 0 ,$$

y

$$[\check{\mathbf{J}}_z, \check{\mathbf{F}}_{\pm}] = \pm \hbar \check{\mathbf{F}}_{\pm} .$$

**Proposición 6.3** Sea  $|jm = j\rangle$  uno de los autovectores de  $\{\check{\mathbf{J}}^2, \check{\mathbf{J}}_z\}$ , entonces

$$\check{\mathbf{F}}_+ |jj\rangle = \alpha |j+1j+1\rangle . \quad (6.29)$$

**Demostración** Sabemos que

$$[\check{\mathbf{J}}_z, \check{\mathbf{F}}_+] = \hbar \check{\mathbf{F}}_+ ,$$

luego

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{J}}_z (\check{\mathbf{F}}_+ |jj\rangle) &= \check{\mathbf{F}}_+ (\check{\mathbf{J}}_z + \hbar \mathbf{1}) |jj\rangle \\ &= \hbar(j+1) (\check{\mathbf{F}}_+ |jj\rangle) . \end{aligned}$$

Esto demuestra que el “ket” o vector ( $\check{\mathbf{F}}_+ ketjj$ ) es autoestado de  $\check{\mathbf{J}}_z$  con autovalor  $\hbar(j+1)$ . Analicemos ahora el efecto de  $\check{\mathbf{J}}^2$  sobre tal ket. Usando la relación

$$\check{\mathbf{J}}^2 = \check{\mathbf{J}}_z (\hbar \mathbf{1} + \check{\mathbf{J}}_z) + \check{\mathbf{J}}_- \check{\mathbf{J}}_+ ,$$

concluimos que

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{J}}^2 (\check{\mathbf{F}}_+ |jj\rangle) &= \hbar^2(j+1)(j+2) \check{\mathbf{F}}_+ |jj\rangle + \check{\mathbf{J}}_- \check{\mathbf{J}}_+ \check{\mathbf{F}}_+ |jj\rangle \\ &= \hbar^2(j+1)(j+2) \check{\mathbf{F}}_+ |jj\rangle + \check{\mathbf{J}}_- \check{\mathbf{F}}_+ \check{\mathbf{J}}_+ |jj\rangle \\ &= \hbar^2(j+1)(j+2) (\check{\mathbf{F}}_+ |jj\rangle) . \end{aligned}$$

Concluimos que  $\check{\mathbf{F}}_+ |jj\rangle$  también es autoestado de  $\check{\mathbf{J}}^2$ , con autovalor  $\hbar^2 j'(j'+1)$ , donde  $j' \equiv j+1$ ; esto completa la demostración.

Queremos indicar, sin embargo que la constante  $\alpha$  en la relación (6.29), puede que sea nula, no existiendo criterios generales para saber cuándo ello ocurre.



## 6.5 Autofunciones del momento angular orbital.

Volvamos al caso particular en que  $\check{\mathbf{J}} = \check{\mathbf{L}} = \check{\mathbf{r}} \times \check{\mathbf{p}}$  es el momento angular orbital.

Consideremos un estado  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  arbitrario y lo expandimos en la base de posición:

$$|\psi\rangle = \int d^3r \psi(\vec{r}) |\vec{r}\rangle .$$

Al operar sobre él mediante  $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$  tenemos

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} |\psi\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}} |\psi\rangle = \int d^3r \psi(\vec{r}) |R_{\vec{\phi}}^{-1} \vec{r}\rangle ,$$

y cambiando la variable de integración,  $\vec{r} \rightarrow R_{\vec{\phi}}^{-1} \vec{r}$ , se tiene

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}} |\psi\rangle = \int d^3r \psi(R_{\vec{\phi}}^{-1} \vec{r}) |\vec{r}\rangle ,$$

de modo que

$$\langle \vec{r} | e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}} |\psi\rangle =: e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}} \psi(\vec{r}) = \psi(R_{\vec{\phi}}^{-1} \vec{r}) . \quad (6.30)$$

Si  $\psi(\vec{r}) = \psi(r)$ , con  $r = |\vec{r}|$ , al usar la invariancia rotacional de  $\psi(r)$  y la ecuación anterior, se obtiene que

$$\check{\mathbf{L}}_i \psi(r) = 0 , \quad i = x, y, z ,$$

es decir, una función con simetría esférica posee momento orbital nulo.

**Proposición 6.4** El operador  $(\check{\mathbf{L}})^2 = (\check{\mathbf{r}} \times \check{\mathbf{p}})^2$  sólo posee autovalores  $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$ , con  $\ell$  entero.

**Demostración** Sea  $|\ell m\rangle$  un autoestado de  $\{\check{\mathbf{L}}^2, \check{\mathbf{L}}_z\}$ . Entonces tenemos

$$\exp\left(-\frac{i}{\hbar} \alpha \check{\mathbf{L}}_z\right) |\ell m\rangle = e^{-i\alpha m} |\ell m\rangle .$$

Realizando el producto interno con  $\langle \vec{r} |$ , usando la definición  $\psi_{\ell m}(\vec{r}) \equiv \langle \vec{r} | \ell m\rangle$  y haciendo uso de la relación (6.30), sigue que

$$\psi_{\ell m}(R_{\alpha \hat{z}}^{-1} \vec{r}) = e^{-i\alpha m} \psi_{\ell m}(\vec{r}) .$$

Expresando el vector  $\vec{r}$  en coordenadas esféricas, respecto al eje  $\hat{z}$ , se obtiene

$$\psi_{\ell m}(r, \theta, \phi - \alpha) = e^{-i\alpha m} \psi_{\ell m}(r, \theta, \phi) , \quad \forall \alpha \in \mathbb{R} . \quad (6.31)$$

Si elegimos  $\alpha = 2\pi$  en la última ecuación, la condición de que  $\psi(\vec{r})$  sea una función monovaluada en  $\mathbb{R}^3$ , exige que

$$\psi_{\ell m}(r, \theta, \phi - 2\pi) = \psi_{\ell m}(r, \theta, \phi) ,$$

de modo que

$$e^{-2\pi im} = 1 .$$

Esta relación exige que  $m$  debe ser entero, y, por consiguiente, también  $\ell$ , que es el valor máximo que puede tomar  $m$ , es decir, para el caso del momento angular orbital

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots .$$

Usemos la ecuación (6.31) con  $\alpha = \phi$ . Definamos  $\psi_{\ell m}(r, \theta, 0) = \psi_{\ell m}(r, \theta)$ . Entonces se encuentra que

$$\psi_{\ell m}(r, \theta, \phi) = e^{im\phi} \psi_{\ell m}(r, \theta) . \quad (6.32)$$

A continuación deduciremos una expresión general para los autoestados de los operadores  $\{\check{\mathbf{L}}^2, \check{\mathbf{L}}_z\}$ , asociados al momento angular orbital.

Comenzamos escribiendo la ecuación (6.26) en la forma

$$\check{\mathbf{L}}_+ |\ell m\rangle = \hbar \sqrt{(\ell - m)(\ell + m + 1)} |\ell, m + 1\rangle$$

y

$$\check{\mathbf{L}}_- |\ell m\rangle = \hbar \sqrt{(\ell + m)(\ell - m + 1)} |\ell, m - 1\rangle .$$

Partiendo de  $|\ell, \ell\rangle$ , aplicando reiteradamente  $\check{\mathbf{L}}_-$ , obtenemos los distintos  $|\ell m\rangle$ :

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{L}}_- |\ell \ell\rangle &= \hbar \sqrt{2\ell} |\ell \ell - 1\rangle \\ \check{\mathbf{L}}_-^2 |\ell \ell\rangle &= \hbar^2 \sqrt{2\ell(2\ell - 1)} 1 \cdot 2 |\ell \ell - 2\rangle \\ \check{\mathbf{L}}_-^3 |\ell \ell\rangle &= \hbar^3 \sqrt{2\ell(2\ell - 1)(2\ell - 2)} 1 \cdot 2 \cdot 3 |\ell \ell - 3\rangle \\ &\vdots \\ \check{\mathbf{L}}_-^k |\ell, \ell\rangle &= \hbar^k \sqrt{\frac{(2\ell)! k!}{(2\ell - k)!}} |\ell \ell - k\rangle . \end{aligned}$$

Existen expresiones análogas a éstas que se obtienen al operar sobre  $|\ell, -\ell\rangle$  en forma reiterada con el operador  $\check{\mathbf{L}}_+$ . Poniendo  $\ell - k = m$  se obtiene

$$\begin{aligned} |\ell m\rangle &= \frac{1}{\hbar^{\ell-m}} \sqrt{\frac{(\ell + m)!}{(2\ell)!(\ell - m)!}} \check{\mathbf{L}}_-^{\ell-m} |\ell \ell\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar^{\ell+m}} \sqrt{\frac{(\ell - m)!}{(2\ell)!(\ell + m)!}} \check{\mathbf{L}}_+^{\ell+m} |\ell - \ell\rangle . \end{aligned} \quad (6.33)$$

### 6.5.1 Los operadores de momento angular en la representación de coordenadas.

Sea  $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$  un vector arbitrario. Entonces

$$\begin{aligned}\langle \vec{r} | \vec{\mathbf{L}} | \Psi \rangle &= \langle \vec{r} | \vec{\mathbf{r}} \times \vec{\mathbf{p}} | \Psi \rangle \\ &= \vec{r} \times \langle \vec{r} | \vec{\mathbf{p}} | \Psi \rangle \\ &= -i\hbar \vec{r} \times \vec{\nabla} \langle \vec{r} | \Psi \rangle ,\end{aligned}$$

es decir,

$$\langle \vec{r} | \vec{\mathbf{L}} | \Psi \rangle = -i\hbar \vec{r} \times \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}) = \vec{L}^{(op)} \Psi(\vec{r}) .$$

Acá  $\vec{L}^{(op)}$  es un operador diferencial que opera sobre funciones complejas. Para cada una de las componentes cartesianas por separado se tiene:

$$\begin{aligned}\langle \vec{r} | \check{\mathbf{L}}_x | \Psi \rangle &= -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \Psi(\vec{r}) , \\ \langle \vec{r} | \check{\mathbf{L}}_y | \Psi \rangle &= -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \Psi(\vec{r})\end{aligned}$$

y

$$\langle \vec{r} | \check{\mathbf{L}}_z | \Psi \rangle = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi(\vec{r}) .$$

Expresemos ahora estas ecuaciones en coordenadas polares esféricas:

$$\begin{aligned}r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} , \\ x &= r \operatorname{sen} \theta \cos \phi , \\ y &= r \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \phi\end{aligned}$$

y

$$z = r \cos \theta .$$

Pongamos

$$-i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = A \frac{\partial}{\partial \theta} + B \frac{\partial}{\partial \phi} + C \frac{\partial}{\partial r} , \quad (6.34)$$

y encontremos el valor de las constantes  $A, B, C$ .

Operando con la relación (6.34) sobre  $\sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = r$ :

$$-i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = \left( A \frac{\partial}{\partial \theta} + B \frac{\partial}{\partial \phi} + C \frac{\partial}{\partial r} \right) r .$$

De aquí se obtiene que

$$-i\hbar \left( \frac{y}{r} z - \frac{z}{r} y \right) = Cr ,$$

lo que implica que

$$C = 0.$$

Operando con la relación (6.34) sobre la función  $x = r \operatorname{sen} \theta \cdot \cos \phi$  se obtiene

$$-i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) x = \left( A \frac{\partial}{\partial \theta} + B \frac{\partial}{\partial \phi} \right) (r \operatorname{sen} \theta \cos \phi) ,$$

es decir,

$$0 = r (A \cos \theta \cos \phi - B \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \phi) .$$

Finalmente, operando con la relación (6.34) sobre  $z = r \cos \theta$ , se obtiene

$$-i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) z = \left( A \frac{\partial}{\partial \theta} + B \frac{\partial}{\partial \phi} \right) r \cos \theta ,$$

es decir

$$-i\hbar y = -Ar \operatorname{sen} \theta .$$

De las relaciones anteriores se deduce que

$$A = \frac{i\hbar r \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \phi}{r \operatorname{sen} \theta} = i\hbar \operatorname{sen} \phi$$

y

$$B = i\hbar \frac{\cos \theta \cos \phi}{\operatorname{sen} \theta} = i\hbar \cotg \theta \cos \phi .$$

Podemos ahora escribir el operador diferencial  $L_x^{(op)}$  en coordenadas polares esféricas:

$$L_x^{(op)} = -i\hbar \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = i\hbar \left( \cotg \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} + \operatorname{sen} \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) .$$

Análogamente, se obtiene

$$L_y^{(op)} = -i\hbar \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) = i\hbar \left( \cotg \theta \operatorname{sen} \phi \frac{\partial}{\partial \phi} - \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right)$$

y

$$L_z^{(op)} = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} .$$

Notar que esta última relación concuerda con (6.32):

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} e^{im\phi} = \hbar m e^{im\phi} .$$

Para  $L_+^{(op)} \equiv L_x^{(op)} + iL_y^{(op)}$  se obtiene

$$\begin{aligned} L_+^{(op)} &= i\hbar \left( \cotg \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} + \sen \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + (-\hbar) \left( \cotg \theta \sen \phi \frac{\partial}{\partial \phi} - \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \\ &= \hbar \left[ \cotg \theta (i \cos \phi - \sen \phi) \frac{\partial}{\partial \phi} + (i \sen \phi + \cos \phi) \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \\ &= \hbar e^{i\phi} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + i \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) . \end{aligned}$$

Análogamente, para  $L_-^{(op)} = L_x^{(op)} - iL_y^{(op)}$  se encuentra

$$L_-^{(op)} = \hbar e^{-i\phi} \left( -\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) .$$

Para el operador  $L^{(op)2} = \vec{L}^{(op)} \cdot \vec{L}^{(op)}$  se obtiene

$$L^{(op)2} = -\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sen \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sen \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sen^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] .$$

## 6.6 Los autovectores en la representación de coordenadas.

Puesto que en coordenadas esféricas los operadores diferenciales asociados a  $\{\check{\mathbf{L}}^2, \check{\mathbf{L}}_z\}$  sólo dependen de  $\theta$  y  $\phi$ , se obtiene que tales operadores sólo imponen restricciones sobre la forma de la parte angular de la función de onda.

Encontremos la forma explícita de las funciones  $\psi_{\ell m}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \ell m \rangle$ , es decir, los autovectores del conjunto de operadores  $\{\check{\mathbf{L}}^2, \check{\mathbf{L}}_z\}$  en la representación de coordenadas. Esta función la escribimos de la forma

$$\psi_{\ell m}(r, \theta, \phi) = f(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi) ,$$

donde  $f(r)$  es una función de  $r$  arbitraria, aunque se exige que  $f(r)$  sea continua y que  $rf(r)$  sea acotada en  $\mathbb{R}^+$ . El momento angular no impone ninguna restricción sobre  $f(r)$ , pero sí determina la forma que toma la función  $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ .

La ecuación (6.32) implica que  $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  se puede escribir como el producto de dos funciones, una de las cuales sólo depende de  $\theta$  y otra que sólo depende de  $\phi$ :

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = g_{\ell m}(\theta) e^{im\phi} .$$

Como ejercicio, evaluemos  $\check{\mathbf{L}}_z | \ell m \rangle$  en la representación de coordenadas y mostremos que efectivamente se obtiene el resultado  $\hbar m$ . Se tiene:

$$\begin{aligned} \langle \theta \phi | \check{\mathbf{L}}_z | \ell m \rangle &= L_z^{(op)} Y_{\ell m}(\theta, \phi) \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} g_{\ell m}(\theta) e^{im\phi} = \hbar m g_{\ell m}(\theta) e^{im\phi} \\ &= \hbar m Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \hbar m \langle \theta \phi | \ell m \rangle . \end{aligned}$$

### 6.6.1 Evaluación de $Y_{00}$ .

Consideremos el caso particular en que  $\ell = 0$ . Entonces también  $m = 0$  (recuerde que para un valor de  $\ell$  dado,  $m$  sólo puede tomar los valores  $-\ell, -\ell + 1, \dots, \ell$ ).

Al usar (6.26) con  $j = \ell = m = 0$ , se encuentra que

$$\langle \theta \phi | \check{\mathbf{L}}_{\pm} | 00 \rangle = L_{\pm}^{(op)} Y_{00}(\theta, \phi) = L_{\pm}^{(op)} g_{00}(\theta) = 0 .$$

Al usar las expresiones explícitas para los operadores diferenciales  $L_{\pm}^{(op)}$  en coordenadas polares esféricas concluimos que  $g_{00}(\theta)$  debe ser una constante. Elijamos dicha constante igual a  $1/\sqrt{4\pi}$ , a fin de normalizar ante una integración sobre  $(\theta, \phi)$ , es decir,

$$Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} ,$$

teniéndose así

$$\langle 00 | 00 \rangle = \int \int d\Omega |Y_{00}(\theta, \phi)|^2 = 1 .$$

De este modo se demuestra que toda función de onda, con momento angular orbital  $\ell = m = 0$ , sólo depende de la coordenada radial  $r$ :

$$\Psi_{\ell=m=0}(\vec{r}) = f(r) .$$

### 6.6.2 Evaluación de $Y_{\ell\ell}$ .

Consideremos ahora el caso  $m = \ell$ . Para encontrar la función  $Y_{\ell\ell}(\theta\phi) = \langle \theta\phi | \ell\ell \rangle$ , usemos el resultado dado por la ecuación (6.29) con el operador vectorial  $\vec{\mathbf{F}} = \check{\mathbf{r}}$ . De acuerdo a (6.28), definimos

$$\check{\mathbf{r}}_+ = \check{\mathbf{x}} + i\check{\mathbf{y}} .$$

Se tiene:

$$\begin{aligned} |11\rangle &= (\text{cte}) \check{\mathbf{r}}_+ |00\rangle \\ |22\rangle &= (\text{cte}) (\check{\mathbf{r}}_+)^2 |00\rangle \\ &\vdots \\ |\ell\ell\rangle &= (\text{cte}) (\check{\mathbf{r}}_+)^{\ell} |00\rangle . \end{aligned} \tag{6.35}$$

En la representación de posición el operador  $(\check{\mathbf{r}}_{\pm})^{\ell}$  queda expresado por

$$(x^{(op)} \pm iy^{(op)})^{\ell} = [r \operatorname{sen} \theta (\cos \phi \pm i \operatorname{sen} \phi)]^{\ell} = r^{\ell} \operatorname{sen}^{\ell} \theta e^{\pm i\ell\phi} .$$

Usando esta expresión podemos escribir (6.35) en la representación de posición:

$$Y_{\ell\ell}(\theta, \phi) = (\text{cte}) r^{\ell} \operatorname{sen}^{\ell} \theta e^{i\ell\phi} Y_{00}(\theta, \phi) ,$$

o bien,

$$Y_{\ell\ell}(\theta, \phi) = C_{\ell} e^{i\ell\phi} \operatorname{sen}^{\ell} \theta . \quad (6.36)$$

La constante de normalización  $C_{\ell}$  se evalúa exigiendo

$$\int d\Omega |Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2 = 1 .$$

De esta manera se encuentra que

$$\begin{aligned} 1 &= |C_{\ell}|^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} (d \cos \theta) (\operatorname{sen}^2 \theta)^{\ell} \\ &= 4\pi |C_{\ell}|^2 \frac{2^{2\ell} (\ell!)^2}{(2\ell + 1)!} . \end{aligned}$$

Despejando  $C_{\ell}$  y eligiendo la fase en forma tradicional, obtenemos

$$Y_{\ell\ell}(\theta, \phi) = \frac{(-1)^{\ell}}{2^{\ell} \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell + 1)!}{4\pi}} e^{i\ell\phi} \operatorname{sen}^{\ell} \theta .$$

Note que también se tiene que

$$|\ell\ell\rangle = \frac{(-1)^{\ell}}{2^{\ell} \ell!} \sqrt{(2\ell + 1)!} \frac{(\check{\mathbf{x}} + i\check{\mathbf{y}})^{\ell}}{r^{\ell}} |00\rangle . \quad (6.37)$$

En lo que sigue usaremos esta relación para evaluar las demás autofunciones del momento angular orbital.

### 6.6.3 Evaluación de $Y_{\ell m}$ .

Las restantes autofunciones se obtienen aplicando sucesivamente a  $|\ell\ell\rangle$  dado por (6.37), el operador de bajada  $\check{\mathbf{L}}_{-}$ . De esta manera se obtiene al usar (6.33)

$$|\ell m\rangle = \frac{(-1)^{\ell}}{2^{\ell} \ell!} \sqrt{(2\ell + 1) \frac{(\ell + m)!}{(\ell - m)!}} \left( \frac{\check{\mathbf{L}}_{-}}{\hbar} \right)^{\ell - m} \frac{(\check{\mathbf{x}} + i\check{\mathbf{y}})^{\ell}}{r^{\ell}} |00\rangle .$$

Como

$$[\check{\mathbf{r}}_{-}, \check{\mathbf{L}}_{-}] = [(\check{\mathbf{x}} - i\check{\mathbf{y}}), \check{\mathbf{L}}_{-}] = 0 ,$$

podemos escribir

$$\begin{aligned}\check{\mathbf{L}}_-^{\ell-m} &= \frac{1}{(\check{\mathbf{x}} - i\check{\mathbf{y}})^\ell} (\check{\mathbf{L}}_-)^{\ell-m} (\check{\mathbf{x}} - i\check{\mathbf{y}})^\ell \\ &= \frac{1}{(\check{\mathbf{x}} - i\check{\mathbf{y}})^m} \left( \frac{1}{\check{\mathbf{x}} - i\check{\mathbf{y}}} \check{\mathbf{L}}_- \right)^{\ell-m} (\check{\mathbf{x}} - i\check{\mathbf{y}})^\ell.\end{aligned}$$

Luego

$$\begin{aligned}Y_{\ell m}(\theta, \phi) &= \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell! \hbar^{\ell-m}} \sqrt{(2\ell+1) \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}} \frac{1}{(x-iy)^m} \times \\ &\quad \left( \frac{1}{x-iy} L_-^{(op)} \right)^{\ell-m} (x-iy)^\ell \frac{(x+iy)^\ell}{r^\ell} Y_{00}(\theta, \phi).\end{aligned}$$

Ahora

$$\frac{1}{x-iy} = \frac{e^{i\phi}}{r \operatorname{sen} \theta}$$

y

$$(x-iy)(x+iy) = r^2 \operatorname{sen}^2 \theta.$$

Usando estas relaciones y la expresión del operador  $L_-^{(op)}$  en coordenadas polares esféricas, se obtiene

$$\begin{aligned}Y_{\ell m}(\theta, \phi) &= \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell! r^\ell} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}} \left( \frac{e^{i\phi}}{r \operatorname{sen} \theta} \right)^m \times \\ &\quad \left( \frac{e^{i\phi}}{r \operatorname{sen} \theta} \frac{L_-^{(op)}}{\hbar} \right)^{\ell-m} r^{2\ell} \operatorname{sen}^{2\ell} \theta \\ &= \frac{1}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell+m)!}{(\ell-m)!}} \frac{e^{im\phi}}{\operatorname{sen}^m \theta} \left( \frac{\partial}{\partial \cos \theta} \right)^{\ell-m} (\cos^2 \theta - 1)^\ell.\end{aligned}$$

A estos autoestados de  $\check{\mathbf{L}}^2$  y  $\check{\mathbf{L}}_z$  se los conoce como *armónicos esféricos*. Estos se expresan normalmente en términos de las *funciones asociadas de Legendre*  $P_{\ell m}(\cos \theta)$ :

$$\boxed{Y_{\ell m}(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi} \frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}} P_{\ell m}(\cos \theta) e^{im\phi},} \quad (6.38)$$

donde,

$$P_{\ell m}(x) = \frac{(-1)^m (\ell+m)!}{2^\ell \ell! (\ell-m)!} \left( \frac{1}{1-x^2} \right)^{\frac{m}{2}} \left( \frac{d}{dx} \right)^{\ell-m} (x^2-1)^\ell. \quad (6.39)$$

Esta última ecuación constituye una generalización de la llamada fórmula de Rodrigues para los polinomios de Legendre.



### 6.6.4 Armónicos esféricos.

De acuerdo al análisis anterior los armónicos esféricos cumplen con

$$\begin{aligned} L^{(op)2} Y_{\ell m}(\theta, \phi) &= \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_{\ell m}(\theta, \phi) \\ L_z^{(op)} Y_{\ell m}(\theta, \phi) &= \hbar m Y_{\ell m}(\theta, \phi) \end{aligned}$$

y

$$L_{\pm}^{(op)} Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \hbar \sqrt{(\ell \mp m)(\ell \pm m + 1)} Y_{\ell, m \pm 1}(\theta, \phi) .$$

Usando la expresión explícita en coordenadas polares de  $L^{(op)2}$ , la primera de estas relaciones es equivalente a la ecuación diferencial

$$\left\{ \ell(\ell + 1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} + \frac{d}{d \cos \theta} \left( \sin^2 \theta \frac{d}{d \cos \theta} \right) \right\} P_{\ell m}(\cos \theta) = 0 ,$$

ecuación que a veces se usa para definir los polinomios asociados de Legendre.

A partir de las relaciones (6.38) y (6.39) se puede demostrar que

$$Y_{\ell m}^*(\theta, \phi) = (-1)^m Y_{\ell, -m}(\theta, \phi) = Y_{\ell m}(\theta, -\phi) .$$

También es fácil verificar que  $P_{\ell m}(-x) = (-1)^{\ell-m} P_{\ell m}(x)$ . De las dos relaciones anteriores se encuentra que

$$Y_{\ell m}(\pi - \theta, \phi + \pi) = (-1)^{\ell} Y_{\ell m}(\theta, \phi) .$$

Pero  $(\pi - \theta, \phi + \pi)$  y  $(\theta, \phi)$  son direcciones diametralmente opuestas en el espacio, de modo que

$$\Psi_{\ell m}(-\vec{r}) = (-1)^{\ell} \Psi_{\ell m}(\vec{r}) , \quad (6.40)$$

esto es, una función de onda con momento angular par,  $\ell = 0, 2, 4, \dots$ , es invariante ante la inversión espacial, mientras que si  $\ell = 1, 3, 5, \dots$  entonces  $\Psi_{\ell m}(\vec{r})$  es una función impar ante la inversión espacial.

Las relaciones de ortogonalidad y completitud de los armónicos esféricos son:

$$\langle \ell m | \ell' m' \rangle = \int d\Omega Y_{\ell m}^*(\theta\phi) Y_{\ell' m'}(\theta\phi) = \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}$$

y

$$\begin{aligned} \langle \Omega | \Omega' \rangle &= \langle \Omega | \left( \sum_{\ell m} | \ell m \rangle \langle \ell m | \right) | \Omega' \rangle = \langle \theta\phi | \left( \sum_{\ell m} | \ell m \rangle \langle \ell m | \right) | \theta'\phi' \rangle \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} Y_{\ell m}^*(\Omega) Y_{\ell m}(\Omega') = \delta(\Omega - \Omega') . \end{aligned}$$

En forma explícita, algunos de los armónicos esféricos de orden más bajo son:

$$\begin{aligned}
 Y_{00}(\Omega) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\
 Y_{1,\pm 1}(\Omega) &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\phi} \operatorname{sen} \theta = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \left( \frac{x \pm iy}{r} \right) \\
 Y_{1,0}(\Omega) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \\
 Y_{2,\pm 2}(\Omega) &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{\pm 2i\phi} \operatorname{sen}^2 \theta = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \left( \frac{x \pm iy}{r} \right)^2 \\
 Y_{2,\pm 1}(\Omega) &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{\pm i\phi} \cos \theta \operatorname{sen} \theta = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \frac{(x \pm iy)z}{r^2} \\
 Y_{2,0}(\Omega) &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \left( \frac{2z^2 - x^2 - y^2}{r^2} \right).
 \end{aligned}$$

## 6.7 Problemas

6-1) (a) Verifique que

$$L_+^{(op)} Y_{\ell\ell}(\theta, \phi) = 0 .$$

(b) Muestre que la expresión (6.36) es la única solución del tipo  $e^{i\phi\ell} g_\ell(\theta)$  que posee la ecuación diferencial de la parte anterior.

# Capítulo 7

## Problemas con simetría esférica.

En este capítulo nos dedicaremos a buscar autoestados de energía en sistemas tridimensionales centrándonos en forma casi exclusiva en problemas con potenciales esféricamente simétricos.

### 7.1 El problema de dos cuerpos.

Consideremos dos partículas, 1 y 2, interactuando a través de un potencial  $V(\check{\mathbf{r}}_1 - \check{\mathbf{r}}_2)$ . Acá  $\check{\mathbf{r}}_1$  y  $\check{\mathbf{r}}_2$  son los operadores de posición de las partículas en cuestión.

El espacio de Hilbert de este sistema compuesto es del tipo

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 ,$$

donde  $\mathcal{H}_1$  y  $\mathcal{H}_2$  corresponden a los espacios de las partículas aisladas. Una base de  $\mathcal{H}$  es  $\{|\check{r}_1, \check{r}_2\rangle = |\check{r}_1\rangle \otimes |\check{r}_2\rangle\}$ , o bien  $\{|\check{r}_1, \check{p}_2\rangle = |\check{r}_1\rangle \otimes |\check{p}_2\rangle\}$ , etc. ) teniéndose que  $\{\check{\mathbf{r}}_1, \check{\mathbf{r}}_2\}$ , o bien  $\{\check{\mathbf{r}}_1, \check{\mathbf{p}}_2\}$ , etc. son conjuntos completos de observables compatibles, sociados con una y otra elección de bases. Acá  $\check{\mathbf{p}}_1$  y  $\check{\mathbf{p}}_2$  son los operadores de momento, conjugados canónicos de  $\check{\mathbf{r}}_1$  y  $\check{\mathbf{r}}_2$ . En el problema en cuestión supondremos que no existe ningún potencial externo, lo cual simplificará considerablemente el análisis, como se verá a continuación. De este modo, el Hamiltoniano del sistema compuesto es

$$\check{\mathbf{H}} = \frac{\check{\mathbf{P}}_1^2}{2m_1} + \frac{\check{\mathbf{P}}_2^2}{2m_2} + V(\check{\mathbf{r}}_1 - \check{\mathbf{r}}_2) . \quad (7.1)$$

Es claro que este Hamiltoniano es invariante ante una traslación rígida de ambas partículas, digamos en una cantidad  $\check{a}$ . Poniendo

$$\check{\mathbf{U}}_{\check{a}}^{(j)} = e^{-i\check{a}\cdot\check{\mathbf{p}}_j/\hbar} ,$$

y recordando que

$$[\check{\mathbf{p}}_{1i}, \check{\mathbf{p}}_{2j}] = [\check{\mathbf{p}}_{1i}, \check{\mathbf{r}}_{2j}] = 0 , \quad \text{con } i, j = x, y, z ,$$

tenemos

$$\check{\mathbf{U}}_{\check{a}}^{(1)} \check{\mathbf{U}}_{\check{a}}^{(2)} = e^{-i\check{a}\cdot(\check{\mathbf{p}}_1 + \check{\mathbf{p}}_2)/\hbar} \equiv e^{-i\check{a}\cdot\check{\mathbf{P}}_T/\hbar} ,$$

con

$$\check{\mathbf{P}}_T = \check{\mathbf{p}}_1 + \check{\mathbf{p}}_2 = \text{momento total.}$$

$$\begin{aligned} \check{U}_{\check{a}}^{(1)} \check{U}_{\check{a}}^{(2)} \check{\mathbf{H}}(\check{\mathbf{r}}_1, \check{\mathbf{r}}_2, \check{\mathbf{p}}_1, \check{\mathbf{p}}_2) \check{U}_{-\check{a}}^{(1)} \check{U}_{-\check{a}}^{(2)} &= \check{\mathbf{H}}(\check{U}_{\check{a}}^{(1)} \check{\mathbf{r}}_1 \check{U}_{-\check{a}}^{(1)}, \check{U}_{\check{a}}^{(2)} \check{\mathbf{r}}_2 \check{U}_{-\check{a}}^{(2)}, \check{\mathbf{p}}_1, \check{\mathbf{p}}_2) \\ &= \check{\mathbf{H}}(\check{\mathbf{r}}_1 - \check{a}, \check{\mathbf{r}}_2 - \check{a}, \check{\mathbf{p}}_1, \check{\mathbf{p}}_2) \end{aligned}$$

Al particularizar esta relación a nuestro Hamiltoniano (7.1), sigue

$$e^{-i\check{a}\cdot\check{\mathbf{P}}_T/\hbar} \check{\mathbf{H}} e^{i\check{a}\cdot\check{\mathbf{P}}_T/\hbar} = \check{\mathbf{H}} \iff [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{p}}_T] = 0. \quad (7.2)$$

Así pues, el momento total es constante de movimiento como consecuencia de la simetría de traslación rígida de las partículas.

Busquemos un conjunto de observables canónicos conjugados  $\{\check{\mathbf{P}}_T, \check{\mathbf{R}}, \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{r}}\}$  que cumplan

$$[\check{\mathbf{R}}_\alpha, \check{\mathbf{P}}_{T\beta}] = [\check{\mathbf{r}}_\alpha, \check{\mathbf{p}}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha,\beta},$$

y

$$[\check{\mathbf{R}}_\alpha, \check{\mathbf{p}}_\beta] = [\check{\mathbf{r}}_\alpha, \check{\mathbf{P}}_{T\beta}] = 0.$$

Una posible elección de dicho conjunto es

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{R}} &= \frac{1}{M} (m_1 \check{\mathbf{r}}_1 + m_2 \check{\mathbf{r}}_2), \\ \check{\mathbf{P}}_T &= \check{\mathbf{p}}_1 + \check{\mathbf{p}}_2, \\ \check{\mathbf{r}} &= \check{\mathbf{r}}_1 - \check{\mathbf{r}}_2, \end{aligned}$$

y

$$\check{\mathbf{p}} = \frac{1}{M} (m_2 \check{\mathbf{p}}_1 - m_1 \check{\mathbf{p}}_2),$$

con  $M = m_1 + m_2$ .

De acuerdo a (7.2), conviene expresar el Hamiltoniano en términos de este nuevo conjunto de variables canónicamente conjugadas. Usando que

$$\check{\mathbf{p}}_1 = \check{\mathbf{p}} + \frac{m_1}{M} \check{\mathbf{P}}_T$$

y

$$\check{\mathbf{p}}_2 = -\check{\mathbf{p}} + \frac{m_2}{M} \check{\mathbf{P}}_T,$$

sigue,

$$\check{\mathbf{H}} = \frac{\check{\mathbf{p}}_1^2}{2m_1} + \frac{\check{\mathbf{p}}_2^2}{2m_2} + V(\check{\mathbf{r}}_1 - \check{\mathbf{r}}_2) = \frac{\check{\mathbf{P}}_T^2}{2M} + \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(\check{\mathbf{r}}).$$

Acá  $\mu$  es la *masa reducida*

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{M} .$$

Así,

$$\check{\mathbf{H}} = \frac{\check{\mathbf{P}}_T^2}{2M} + \check{\mathbf{H}}_0 ,$$

con

$$\check{\mathbf{H}}_0 = \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(\check{\mathbf{r}}) .$$

Notar que  $\{\check{\mathbf{P}}_T, \check{\mathbf{H}}_0(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}})\}$  forman un conjunto de observables compatibles.

Pasemos a la representación de coordenadas. Se tiene:

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{P}}_T \Psi_{\vec{P}_0, E_0}(\vec{r}, \vec{R}) &= \vec{P}_0 \Psi_{\vec{P}_0, E_0}(\vec{r}, \vec{R}) , \\ \check{\mathbf{H}}_0 \Psi_{\vec{P}_0, E_0}(\vec{r}, \vec{R}) &= E_0 \Psi_{\vec{P}_0, E_0}(\vec{r}, \vec{R}) \end{aligned}$$

y

$$\check{\mathbf{H}} \Psi_{\vec{P}_0, E_0}(\vec{r}, \vec{R}) = \left[ \frac{P_0^2}{2M} + E_0 \right] \Psi_{\vec{P}_0, E_0}(\vec{r}, \vec{R}) = E \Psi_{\vec{P}_0, E_0}(\vec{r}, \vec{R}) .$$

Como  $\check{\mathbf{H}}_0$  no depende de  $\check{\mathbf{P}}_T$  ni de  $\check{\mathbf{R}}$ , el sistema de ecuaciones de autovalores representado por las tres últimas ecuaciones admite soluciones en la forma de productos

$$\Psi_{\vec{P}_0, E_0}(\vec{r}, \vec{R}) = \Psi_{\vec{P}_0}(\vec{R}) \Psi_{E_0}(\vec{r}) ,$$

esto es

$$\Psi_{\vec{P}_0, E_0}(\vec{r}, \vec{R}) = e^{i\vec{P}_0 \cdot \vec{R} / \hbar} \Psi_{E_0}(\vec{r})$$

y

$$\left[ \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(\check{\mathbf{r}}) \right] \Psi_{E_0}(\vec{r}) = E_0 \Psi_{E_0}(\vec{r}) .$$

Es precisamente este tipo de ecuación, particularizada al importante caso  $V(\check{\mathbf{r}}) = V(\check{\mathbf{r}})$ , la que se estudiará en la siguiente sección.

## 7.2 La ecuación radial de Schrödinger.

Consideremos el caso de un potencial esféricamente simétrico, o sea,  $V(\check{\mathbf{r}}) = V(\check{r})$  sólo depende de la magnitud  $r = \sqrt{\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{r}}}$ . Una partícula de masa reducida  $\mu$ , moviéndose bajo la influencia de tal potencial estará descrito por el Hamiltoniano

$$\check{\mathbf{H}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) = \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(\check{r}) .$$

En este caso, los operadores  $\check{\mathbf{L}}^2$ ,  $\check{\mathbf{L}}_z$  y  $\check{\mathbf{H}}$  conmutan entre sí y forman un conjunto completo de observables compatibles. Denotemos por  $|E\ell m\rangle$  los autovectores comunes de estos tres operadores, es decir:

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{H}}|E\ell m\rangle &= E|E\ell m\rangle , \\ \check{\mathbf{L}}^2|E\ell m\rangle &= \hbar^2\ell(\ell+1)|E\ell m\rangle \end{aligned}$$

y

$$\check{\mathbf{L}}_z|E\ell m\rangle = \hbar m|E\ell m\rangle .$$

Antes de proseguir escribamos el operador  $\check{\mathbf{L}}^2$  de otra forma:

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{L}}^2 &= \sum_i (\check{\mathbf{r}} \times \check{\mathbf{p}})_i (\check{\mathbf{r}} \times \check{\mathbf{p}})_i \\ &= \sum_i \sum_{jklm} \epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} \check{r}_j \check{p}_k \check{r}_l \check{p}_m \\ &= \sum_i \sum_{jklm} (\delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl}) \check{r}_j \check{p}_k \check{r}_l \check{p}_m \\ &= \check{\mathbf{r}}^2 \check{\mathbf{p}}^2 + 2i\hbar \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}} - (\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}})(\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}}) - i\hbar \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}} , \end{aligned}$$

es decir,

$$\check{\mathbf{L}}^2 = \check{\mathbf{r}}^2 \check{\mathbf{p}}^2 + i\hbar \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}} - (\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}})(\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}}) .$$

Despejemos  $\check{\mathbf{p}}^2$  y usemos la relación

$$(\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}})^{(op)} = -i\hbar \check{\mathbf{r}} \cdot \vec{\nabla} = -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r} .$$

De esta manera se encuentra que

$$\begin{aligned} p^{(op)2} \Psi(\vec{r}) &= \frac{1}{r^2} \left[ L^{(op)2} - \hbar^2 \left( r \frac{\partial}{\partial r} + \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 \right) \right] \Psi(\vec{r}) \\ &= -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \Psi(\vec{r})) + \frac{1}{r^2} L^{(op)2} \Psi(\vec{r}) . \end{aligned}$$

La función de onda  $\Psi_{E\ell m}$  satisface la ecuación de Schrödinger, en coordenadas polares,

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^{(op)^2}}{2\mu r^2} + V(r) - E \right\} \Psi_{E\ell m}(\vec{r}) = 0 .$$

$L^{(op)^2}$  es un operador diferencial que sólo opera sobre las variables angulares  $\theta$  y  $\phi$ . Sabemos que las soluciones son del tipo

$$\Psi_{E\ell m}(\vec{r}) = R_{E\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi) .$$

Reemplazando esta expresión en la ecuación diferencial se obtiene

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + V(r) - E \right\} R_{E\ell}(r) = 0 ,$$

donde,  $R_{E\ell}(r)$  satisface la ecuación

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + V(r) - E \right\} R_{E\ell}(r) = 0 .$$

Con la sustitución  $u_{E\ell}(r) = r R_{E\ell}(r)$  se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) R &= \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) \frac{u}{r} \\ &= \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{1}{r} \frac{du}{dr} - r^2 \frac{1}{r^2} u \right) \\ &= \frac{d}{dr} \left( r \frac{du}{dr} - u \right) = r \frac{d^2 u}{dr^2} , \end{aligned}$$

es decir,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} r \frac{d^2 u}{dr^2} + \left( \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + V(r) - E \right) \frac{u}{r} = 0 .$$

Multiplicando por  $-\frac{2\mu}{\hbar^2} r$  se encuentra, finalmente:

$$\boxed{\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U(r) + k^2 \right] u_{k\ell}(r) = 0 .} \quad (7.3)$$

Esta ecuación se conoce con el nombre de *Ecuación Radial de Schrödinger*. En (7.3),  $U(r)$  y  $k^2$  están definidos por

$$U(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r)$$

y

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} = E .$$



También es posible definir el *potencial efectivo*

$$V_\ell(r) = \left[ U(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] \frac{\hbar^2}{2\mu},$$

adquiriendo la ecuación (7.3) el aspecto de un problema unidimensional, con la restricción

$$u_{k\ell}(r)|_{r=0} = 0,$$

lo que equivale a una pared impenetrable en la región  $r < 0$ .

Una vez encontradas las soluciones de la ecuación (7.3), la función de onda  $\langle \vec{r} | E\ell m \rangle$  viene dada por

$$\langle \vec{r} | E\ell m \rangle = \Psi_{E\ell m}(r, \theta, \phi) = \frac{u_{k\ell}(r)}{r} Y_{\ell m}(\theta, \phi).$$

Para una energía  $E$  fija, la solución general viene dada por

$$\boxed{\Psi_E(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} A_{\ell m} \frac{u_{k\ell}(r)}{r} Y_{\ell m}(\theta, \phi)}, \quad (7.4)$$

donde las constantes (en general complejas) son determinadas por las condiciones de borde.

Cuando el espectro es discreto, que es la situación que normalmente ocurre cuando los potenciales son atractivos y la energía es suficientemente baja, los autovalores de la ecuación radial de Schrödinger, es decir el valor de  $k^2$ , dependerán del valor de  $\ell$  que se esté considerando. Las energías discretas en ese caso vienen especificadas por dos números cuánticos,  $E = E_{n\ell}$ , donde  $n$  es el índice que enumera los autovalores de energía para un  $\ell$  fijo. Cuando se tienen energías discretas, generalmente las autoenergías para valores de  $\ell$  distintos no coinciden, luego, a menos que exista una degeneración accidental, en la relación (7.4) se debe suprimir la suma sobre  $\ell$ . Esto significa que sólo existen  $(2\ell + 1)$  funciones linealmente independientes con energía  $E_{n\ell}$ :  $\{\Psi_{n\ell m}(\vec{r}) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi)\}$ , siendo  $m$  el índice de degeneración.

El origen físico de esta degeneración se debe al hecho que al rotar un autoestado de energía de un hamiltoniano esféricamente simétrico, el nuevo vector de estado persiste como autoestado de energía y con el mismo autovalor inicial. En efecto, sea  $|\Psi_E\rangle$  autoestado de energía:

$$\check{\mathbf{H}} |\Psi_E\rangle = \left( \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(\check{\mathbf{r}}) \right) |\Psi_E\rangle = E |\Psi_E\rangle.$$

Se tiene que

$$\check{\mathbf{U}}_{\check{\phi}} \left[ \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(|\check{\mathbf{r}}|) \right] \check{\mathbf{U}}_{\check{\phi}^{-1}} = \frac{(R_{\check{\phi}}^{-1} \check{\mathbf{p}})^2}{2\mu} + V(|R_{\check{\phi}^{-1}} \check{\mathbf{r}}|) = \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(|\check{\mathbf{r}}|),$$

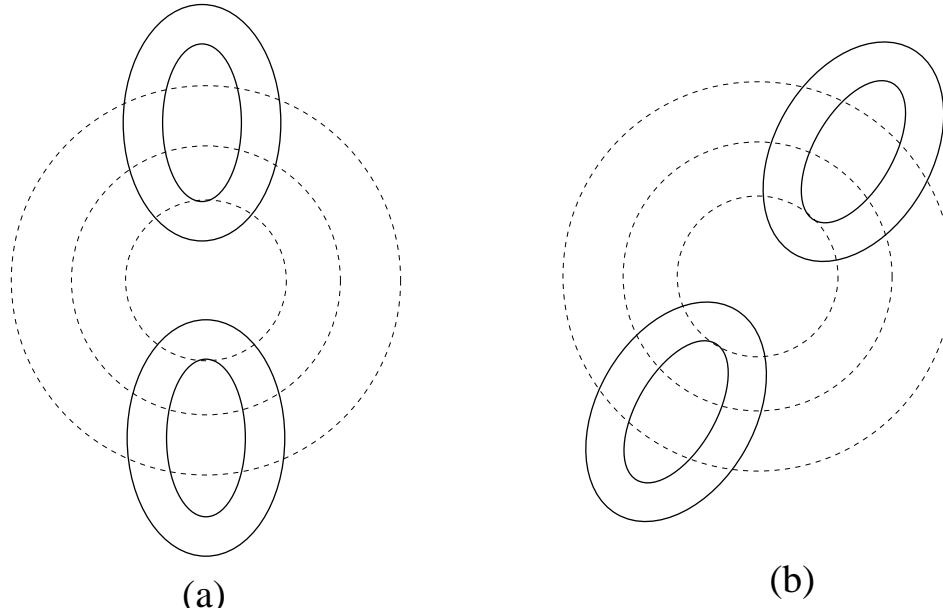


Figura 7.1: (a) Función de onda  $\Psi_E$  y (b) función de onda rotada  $\check{\mathbf{U}}_{\phi} \Psi_E$ , en presencia de un potencial esféricamente simétrico.

esto es,  $\check{\mathbf{U}}_{\phi} \check{\mathbf{H}} = \check{\mathbf{H}} \check{\mathbf{U}}_{\phi}$ . Este resultado nos permite concluir que

$$\check{\mathbf{H}} \left( \check{\mathbf{U}}_{\phi} | \Psi_E \rangle \right) = E \left( \check{\mathbf{U}}_{\phi} | \Psi_E \rangle \right) .$$

De este modo, todos los estados  $\check{\mathbf{U}}_{\phi} | \Psi_E \rangle$  poseen igual energía. Si  $| \Psi_E \rangle$  posee momento angular  $\ell$ , el espacio engendrado al rotar  $| \Psi_E \rangle$ , o sea, el espacio de degeneración de la energía  $E$ , posee dimensión  $(2\ell + 1)$ .

La figura 7.1 muestra intuitivamente el origen de esta degeneración. En (a) se muestra esquemáticamente una función de estado  $\Psi_E(\vec{r})$  (simbolizada por las líneas continuas) sometida al potencial  $V(|\vec{r}|)$ , cuyas equipotenciales son superficies esféricas, indicadas con línea punteada; en (b) se muestra al estado rotado  $\check{\mathbf{U}}_{\phi} \Psi_E(\vec{r})$ . Es obvio que ambos estados son degenerados en energía, ya que la relación entre la función de onda y el potencial es la misma en ambos casos.

### 7.2.1 Propiedades asintóticas de la ecuación radial de Schrödinger.

Analicemos brevemente el comportamiento asintótico de las soluciones de la ecuación radial de Schrödinger

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} - U(r) + k^2 \right] u_{k\ell}(r) = 0 .$$

#### Límite $r \rightarrow 0$

Multipliquemos la ecuación radial por  $r^2$  y supongamos que  $r^2 U(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0$ , en una sección anterior se vio que carecían de sentido físicos potenciales que divergen más fuerte que  $-1/r^2$

en  $r = 0$ . Con esta hipótesis, y descartando los términos despreciables en  $r = 0$ , llegamos a la ecuación asintótica

$$\left[ -r^2 \frac{d^2}{dr^2} + \ell(\ell + 1) \right] u_{k\ell}(r) \approx 0, \quad \text{en } r = 0.$$

Ésta es la ecuación de Euler, siendo las soluciones  $r^{\ell+1}$  y  $r^{-\ell}$ . Recordando que  $R_{n\ell}(r) = u_{n\ell}(r)/r$ , concluimos que las dos soluciones linealmente independientes de la ecuación radial de 2º orden cumplen:

$$R_{n\ell}^{(1)} \sim r^\ell, \quad (\text{solución regular})$$

y

$$R_{n\ell}^{(2)} \sim r^{-(\ell+1)}, \quad (\text{solución irregular}).$$

### Límite $r \rightarrow \infty$

Este límite fue ya discutido en el caso unidimensional. Sólo recordemos dos situaciones de interés:

- (i) Si  $V(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$ , entonces el espectro se separa en una parte ligada (discreta) y otra parte libre (continua)<sup>1</sup>. Si  $E_{n\ell} < 0$  es un estado ligado, entonces la función de onda radial cumple

$$u_{n\ell}(r) \approx e^{-\kappa r},$$

con  $E_{n\ell} = -\hbar^2 \kappa^2 / (2\mu)$ . Si se trata de un nivel del continuo, entonces

$$u_{n\ell}(r) \approx e^{\pm ikr},$$

con  $E_{n\ell} = \hbar^2 k^2 / (2\mu)$ .

- (ii) Si  $V(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} V_0 r^\alpha$ ,  $V_0, \alpha > 0$ , entonces sólo son posibles los estados ligados, no existe región libre en el espacio. En tal caso

$$u_{n\ell}(r) \approx \exp[-Cr^{1+\alpha/2}],$$

con

$$C = \sqrt{\frac{8\mu V_0}{\hbar^2(\alpha + 2)^2}}.$$

<sup>1</sup>Puede darse, sin embargo, que un potencial atractivo no tenga estados ligados en dimensión-3, esto dada la restricción  $u_{n\ell}(r=0) = 0$  antes señalada.

## 7.3 La partícula libre en coordenadas polares esféricas.

La ecuación radial de Schrödinger para la partícula libre viene dada por

$$\left[ -\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - k^2 \right] R_{k\ell}(r) = 0 .$$

Ésta es la ecuación diferencial que satisfacen las funciones de Bessel esféricas. Dos soluciones linealmente independientes son  $j_\ell(kr)$  y  $n_\ell(kr)$ .

### 7.3.1 Funciones de Bessel esféricas.

En esta subsección resumiremos algunas relaciones importantes que satisfacen las funciones de Bessel esféricas.

La función  $j_\ell(kr)$  es regular en el origen mientras que la función  $n_\ell(kr)$  es singular en el origen. Estas funciones están relacionadas con la función de Bessel de orden semientero de acuerdo a:

$$j_\ell(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{\ell+\frac{1}{2}}(kr)$$

y

$$n_\ell(kr) = (-1)^\ell \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{-(\ell+\frac{1}{2})}(kr) .$$

Dependiendo del problema, en lugar de usar la base de soluciones  $j_\ell(kr)$  y  $n_\ell(kr)$ , puede resultar ser más conveniente usar otro par de funciones linealmente independientes, las así llamadas *funciones de Hankel esféricas*. Estas vienen dadas por

$$h_\ell^\pm(kr) \equiv n_\ell(kr) \pm i j_\ell(kr) .$$

El comportamiento asintótico de estas funciones viene dado por

$$\begin{aligned} j_\ell(z) &\xrightarrow{z \rightarrow +\infty} \frac{1}{z} \operatorname{sen} \left( z - \frac{\ell\pi}{2} \right) , \\ n_\ell(z) &\xrightarrow{z \rightarrow +\infty} \frac{1}{z} \operatorname{cos} \left( z - \frac{\ell\pi}{2} \right) , \\ h_\ell^\pm(z) &\xrightarrow{z \rightarrow +\infty} \frac{1}{z} e^{\pm i(z - \frac{\ell\pi}{2})} \cdot \left( 1 \pm i \frac{\ell(\ell+1)}{2z} - \dots \right) , \end{aligned}$$

y el comportamiento en la vecindad del origen

$$j_\ell(z) \xrightarrow{z \rightarrow 0} \frac{z^\ell}{(2\ell+1)!!} \left( 1 - \frac{z^2}{2(2\ell+3)} + \dots \right)$$

y

$$n_\ell(z) \xrightarrow{z \rightarrow 0} (2\ell-1)!! \frac{1}{z^{\ell+1}} \left( 1 + \frac{z^2}{2(2\ell-1)} + \dots \right) .$$

Sea  $f_\ell(z)$  cualquiera de las funciones  $j_\ell(z)$ ,  $n_\ell(z)$ , o  $h_\ell^\pm(z)$ , entonces  $f_\ell(z)$  satisface las siguientes relaciones de recurrencia

$$(2\ell + 1)f_\ell(z) = z(f_{\ell+1}(z) + f_{\ell-1}(z)) ,$$

$$f_\ell(z) = \left( -\frac{d}{dz} + \frac{\ell - 1}{z} \right) f_{\ell-1}(z)$$

y

$$f_{\ell-1}(z) = \left( \frac{d}{dz} + \frac{\ell + 1}{z} \right) f_\ell(z) . \quad (7.5)$$

El Wronskiano  $W(n_\ell, j_\ell)(z)$  es:

$$W(n_\ell, j_\ell)(z) = n_\ell(z) \frac{dj_\ell(z)}{dz} - j_\ell(z) \frac{dn_\ell(z)}{dz} = \frac{1}{z^2} .$$

Si  $\ell \neq 0$ , usando (7.5), esta última ecuación se puede escribir de la forma:

$$n_\ell(z)j_{\ell-1}(z) - j_\ell(z)n_{\ell-1}(z) = \frac{1}{z^2} .$$

Algunas de las funciones en forma explícita son:

$$\begin{aligned} j_0(z) &= \frac{\text{sen } z}{z} \\ j_1(z) &= \frac{\text{sen } z}{z^2} - \frac{\text{cos } z}{z} \\ n_0(z) &= -\frac{\text{cos } z}{z} \\ n_1(z) &= -\frac{\text{cos } z}{z^2} - \frac{\text{sen } z}{z} . \end{aligned}$$

Dos relaciones muy importantes son:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) i^\ell j_\ell(kr) P_\ell(\cos \theta)$$

y

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} (4\pi i^\ell Y_{\ell m}^*(\theta_{\vec{k}}, \phi_{\vec{k}})) j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta, \phi) . \quad (7.6)$$

Acá la última relación deriva de la anterior al hacer uso del *teorema de adición* de los armónicos esféricos.

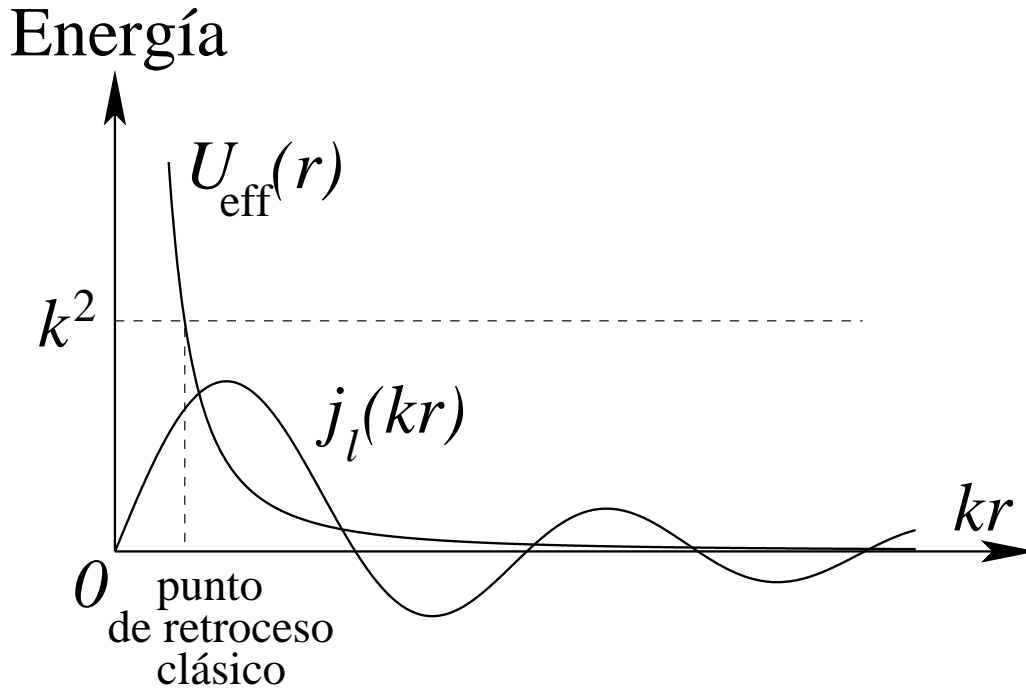


Figura 7.2: Gráfico esquemático de  $j_\ell(kr)$ . El punto de inflexión, que coincide con el punto de retroceso clásico, corresponde al valor en que la energía  $E$  es igual a la del potencial efectivo  $U_{\text{eff}}(r) = \hbar^2 \ell(\ell + 1)/(2\mu r^2)$ .

### 7.3.2 Función de onda para la partícula libre.

Para la partícula libre,  $\{\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{L}}^2, \check{\mathbf{L}}_z\}$  son un conjunto completo de observables compatibles. Las funciones que son autofunciones de estos tres operadores en forma simultánea son:

$$\Psi_{k\ell m}(r, \theta, \phi) = j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta, \phi) , \quad (7.7)$$

y respecto a los tres operadores tienen los autovalores  $E = \hbar^2 k^2/(2\mu)$ ,  $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$  y  $\hbar m$ , respectivamente. La solución (7.7) es una solución particular de la ecuación de Schrödinger para la partícula libre. La solución general para una energía fija viene dada por

$$\Psi_k(\vec{r}) = \sum_{\ell m} A_{\ell m} j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta, \phi) ,$$

donde los coeficientes  $A_{\ell m}$  son determinados por las condiciones de borde.

En particular, para una onda plana  $\Psi(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ , la expansión viene dada por la ecuación (7.6).

La figura 7.2 muestra esquemáticamente el comportamiento de la función regular  $j_\ell(kr)$ .

## 7.4 Partícula en una caja esférica.

Consideremos ahora una partícula restringida a moverse al interior de una cavidad esférica de radio  $a$ , es decir, supongamos que el potencial viene dado por

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r > a \\ 0 & r \leq a \end{cases} .$$

La solución para una energía  $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$ , momento angular  $\ell$  y proyección  $m$  fija, es

$$\Psi_{k\ell m}(\vec{r}) = j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta, \phi) , \quad \text{para } r \leq a .$$

Debido a que  $\vec{r} = 0$  es accesible para el sistema, la solución  $n_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta, \phi)$  resulta no ser físicamente aceptable, ya que es singular para  $r = 0$ .

Para  $r > a$  el potencial es infinito, luego la función de onda debe anularse para esos valores. Como  $\Psi(\vec{r})$  debe ser continua, se debe tener que

$$\Psi_{k\ell m}(r = a, \theta, \phi) = 0 , \quad \forall \theta, \phi ,$$

lo que se cumple sólo si

$$j_\ell(ka) = 0 . \tag{7.8}$$

Esta ecuación nos da los niveles discretos de energía para un  $\ell$  dado. En efecto, sean  $\chi_{n,\ell}$ ,  $n = 1, 2, \dots$ , las raíces de  $j_\ell(x)$ , entonces (7.8) implica que  $k$  no puede tomar cualquier valor, sino que sólo los valores

$$k = k_{n\ell} = \frac{\chi_{n\ell}}{a} .$$

Consecuentemente, la energía sólo puede tomar los valores

$$E = E_{n\ell} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{\chi_{n\ell}^2}{a^2} .$$

Los ceros de las funciones de Bessel con distintos valores de  $\ell$  no coinciden, luego la degeneración de cada nivel sólo se debe al número cuántico  $m$ . Así, pues, la degeneración de un nivel  $E_{n\ell}$  es  $2\ell + 1$ .

Es usual designar el momento angular que tiene un nivel de energía con una letra de acuerdo a la convención siguiente:

$\ell = 0$	s
$\ell = 1$	p
$\ell = 2$	d
$\ell = 3$	f
$\ell = 4$	g
$\ell = 5$	h

n	$\ell$	$\chi_{n\ell}$	nomenclatura	degeneración
1	0	3.142	1s	1
1	1	4.493	1p	3
1	2	5.763	1d	5
2	0	6.283	2s	1
1	3	6.988	1f	7
2	1	7.725	2p	3

Tabla 7.1: Ceros de las funciones de Bessel esféricas  $j_\ell(x)$ .

La tabla 7.1 da los ceros de las funciones de Bessel en orden creciente. El número cuántico  $n$  se denomina *número cuántico principal*.

La energía del estado fundamental “1s” es

$$E_{10} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2\mu a^2} ,$$

siendo la función de onda correspondiente

$$\Psi_{100}(\vec{r}) = A j_0(kr) Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{\bar{A}}{r} \operatorname{sen} \left( \frac{\pi r}{a} \right) .$$

#### 7.4.1 Inclusión de un carozo.

Consideremos ahora el mismo problema, pero agregándole un carozo (núcleo) repulsivo al centro, es decir, consideremos una partícula de masa  $\mu$  moviéndose en el potencial dado por

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r < b \\ 0 & b \leq r \leq a \\ \infty & r > a \end{cases} .$$

Encontremos la solución para un momento angular  $\ell$  y proyección  $m$  fijos. Para  $b \leq r \leq a$ , la partícula es libre y la solución general de la ecuación de Schrödinger es

$$\Psi_{k\ell m}(\vec{r}) = (j_\ell(kr) + \alpha n_\ell(kr)) Y_{\ell m}(\theta, \phi) . \quad (7.9)$$

En este caso no hay razón para excluir de la solución la función  $n_\ell(kr)$ , ya que el origen no está en la región donde la expresión (7.9) es válida.

Para  $r = b$  y  $r = a$  la solución (7.9) debe anularse,

$$\Psi_{k\ell m}(r = a, \theta, \phi) = \Psi_{k\ell m}(r = b, \theta, \phi) = 0 , \quad \forall \theta, \phi .$$

Usando (7.9) se deduce que debe cumplirse

$$j_\ell(ka) + \alpha n_\ell(ka) = 0$$



y

$$j_\ell(kb) + \alpha n_\ell(kb) = 0 .$$

Eliminando  $\alpha$  de estas ecuaciones se obtiene la relación que define los valores de  $k$  posibles:

$$\frac{j_\ell(ka)}{n_\ell(ka)} = \frac{j_\ell(kb)}{n_\ell(kb)} .$$

Para  $\ell = 0$  se obtiene explícitamente que

$$\text{sen}(ka) \cos(kb) - \text{sen}(kb) \cos(ka) = 0 ,$$

despejando,

$$\text{sen}(k(a - b)) = 0 .$$

Los valores de  $k$  posibles para de  $k$ , para  $\ell = 0$ , son

$$k_{n0} = \frac{n\pi}{a - b} , \quad n = 1, 2, \dots .$$

Para la energía del estado fundamental se obtiene

$$E_{10} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\pi^2}{(a - b)^2} .$$

Con  $b = 0$  este resultado coincide con el obtenido anteriormente. Evaluando  $\alpha$  podemos también escribir la función de onda del estado fundamental, ésta resulta ser:

$$\Psi_{100}(\vec{r}) = \bar{A} \left( \frac{a - b}{\pi r} \right) \left[ \text{sen} \left( \frac{\pi r}{a - b} \right) - \tan \left( \frac{\pi a}{a - b} \right) \cos \left( \frac{\pi r}{a - b} \right) \right] ,$$

donde  $\bar{A}$  es una constante de normalización.

## 7.5 La función hipergeométrica confluyente.

En las dos secciones siguientes se usará la función hipergeométrica confluyente. Recordaremos en esta sección su definición y algunas de sus propiedades.

**Definición 7.1** *La función*

$${}_1F_1(a, c; z) \equiv 1 + \frac{az}{c1!} + \frac{a(a+1)z^2}{c(c+1)2!} + \frac{a(a+1)(a+2)z^3}{c(c+1)(c+2)3!} + \dots$$

se llama la *función hipergeométrica confluyente*.

Usemos la notación

$$[a, c, n] \equiv \frac{a(a+1)\dots(a+n)}{c(c+1)\dots(c+n)},$$

con

$$[a, c, -1] \equiv 1.$$

Con esta notación obtenemos:

$$\frac{d}{dz} {}_1F_1(a, c; z) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z^{n-1}}{(n-1)!} [a, c, n-1]$$

y

$$\frac{d^2}{dz^2} {}_1F_1(a, c; z) = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{z^{n-2}}{(n-2)!} [a, c, n-1].$$

Evaluemos

$$\begin{aligned} & z \frac{d^2}{dz^2} {}_1F_1(a, c; z) + c \frac{d}{dz} {}_1F_1(a, c; z) - z \frac{d}{dz} {}_1F_1(a, c; z) - a {}_1F_1(a, c; z) = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \left( \frac{z^{n-1}}{(n-2)!} [a, c, n-1] - \frac{cz^{n-1}}{(n-1)!} [a, c, n-1] \right) + \\ &+ (-1) \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{z^n n}{n!} [a, c, n-1] + a \frac{z^n}{n!} [a, c, n-1] \right) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{z^n}{(n-1)!} [a, c, n] + \frac{cz^n}{n!} [a, c, n] - \frac{z^n n}{n!} [a, c, n-1] + \right. \\ &\left. + (-1) \frac{az^n}{n!} [a, c, n-1] \right) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} [a, c, n-1] \left\{ n \frac{a+n}{c+n} + c \frac{a+n}{c+n} - n - a \right\} = 0, \end{aligned}$$

es decir, la función

$$\phi_1(z) = {}_1F_1(a, c; z),$$

es una solución particular de la ecuación

$$z \frac{d^2 \phi}{dz^2} + (c-z) \frac{d\phi}{dz} - a\phi = 0. \quad (7.10)$$

Otra solución linealmente independiente es

$$\phi_2(z) = z^{1-c} {}_1F_1(a-c+1, 2-c; z).$$

La solución  $\phi_1(z)$  es regular en el origen, en efecto:

$$\phi_1(z=0) = {}_1F_1(a, c; 0) = 1 .$$

La solución  $\phi_2(z)$ , en tanto, diverge en el origen si  $c > 1$ ; en efecto, ahí se comporta como  $z^{1-c}$ .

Algunas propiedades de la función hipergeométrica confluyente  ${}_1F_1(a, c; z)$  y algunas relaciones que cumple, son:

$$\begin{aligned} {}_1F_1(a, a; z) &= e^z , \\ {}_1F_1(a, c; z) &= e^z {}_1F_1(c-a, c; -z) , \\ (c-a) {}_1F_1(a-1, c; z) + (2a-c+z) {}_1F_1(a, c; -z) &= a {}_1F_1(a+1, c; z) , \\ (a-c+1) {}_1F_1(a, c; z) + (c-1) {}_1F_1(a, c-1; z) &= a {}_1F_1(a+1, c; z) \end{aligned}$$

y

$$\frac{d}{dz} {}_1F_1(a, c; z) = \frac{a}{c} {}_1F_1(a+1, c+1; z) .$$

Note que si el primer argumento de la función hipergeométrica es un entero negativo, entonces es un polinomio de grado  $n$ :

$${}_1F_1(-n, c; z) = \text{polinomio de grado } n \text{ si } n \in \mathbb{N} .$$

## 7.6 El oscilador armónico en tres dimensiones.

En una sección anterior resolvimos el problema del oscilador armónico tridimensional en coordenadas cartesianas. Ahora encontraremos la solución usando coordenadas polares esféricas.

El potencial para el oscilador armónico isotrópico es

$$V(r) = \frac{1}{2} \mu \omega^2 r^2 .$$

Introduciendo la coordenada adimensional

$$\xi = \frac{r}{\sqrt{\hbar/(\mu\omega)}} ,$$

y poniendo

$$u(r) = \bar{u}(\xi) ,$$

se obtiene para  $\bar{u}(\xi)$  la ecuación diferencial

$$\left[ \frac{d^2}{d\xi^2} - \xi^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{\xi^2} + 2\epsilon \right] \bar{u}(\xi) = 0 ,$$

donde

$$\epsilon \equiv \frac{E}{\hbar\omega} .$$

Realicemos otro cambio de variable,  $z = \xi^2$  y usemos la notación  $\tilde{u}(z) = \bar{u}(\xi)$ . Para  $\tilde{u}(z)$  se obtiene la ecuación diferencial

$$\left[ 2 \frac{d}{dz} + 4z \frac{d^2}{dz^2} - z - \frac{\ell(\ell+1)}{z} + 2\epsilon \right] \tilde{u}(z) = 0 . \quad (7.11)$$

De acuerdo a los resultados obtenidos en la sección 7.2, el comportamiento asintótico de la solución físicamente aceptable es: Para  $z \rightarrow \infty$ , esta ecuación toma la forma

$$\tilde{u}(z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} e^{-\frac{z}{2}} .$$

y

$$\tilde{u}(z) \xrightarrow{z \rightarrow 0} z^s ,$$

con

$$s = \frac{\ell+1}{2} .$$

Las observaciones anteriores sugieren plantear para  $\tilde{u}(z)$  la expresión

$$\tilde{u}(z) = e^{-\frac{z}{2}} z^s w(z) .$$

Veamos qué ecuación diferencial resulta para  $w(z)$ . Para ello, evaluemos la primera y segunda derivadas de  $\tilde{u}(z)$ . Se tiene:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} \tilde{u}(z) &= \frac{d}{dz} (e^{-\frac{z}{2}} z^s w(z)) \\ &= -\frac{1}{2} e^{-\frac{z}{2}} z^s w(z) + s e^{-\frac{z}{2}} z^{s-1} w(z) + e^{-\frac{z}{2}} z^s \frac{dw(z)}{dz} \\ &= e^{-\frac{z}{2}} z^s \left( -\frac{1}{2} w(z) + \frac{s}{z} w(z) + \frac{dw(z)}{dz} \right) \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dz^2} u(z) &= \left[ \left( -\frac{1}{2} + \frac{s}{2} \right) e^{-\frac{z}{2}} z^s \left( \left( -\frac{1}{2} + \frac{s}{2} \right) w(z) + w'(z) \right) \right. \\ &\quad \left. + e^{-\frac{z}{2}} z^s \left( -\frac{1}{2} w' - \frac{s}{z^2} w + \frac{s}{z} w' + w'' \right) \right] \\ &= e^{-\frac{z}{2}} z^s \left[ \left( -\frac{1}{2} + \frac{s}{z} \right) \left( \left( -\frac{1}{2} + \frac{s}{z} \right) w + w' \right) - \frac{1}{2} w' - \frac{s}{z^2} w + \frac{s}{z} w' + w'' \right] . \end{aligned}$$

Con estas expresiones se obtiene, después de alguna álgebra, la ecuación diferencial que cumple  $w(z)$ :

$$\left[ z \frac{d^2}{dz^2} + \left( 2s + \frac{1}{2} - z \right) \frac{d}{dz} + n \right] w(z) = 0, \quad (7.12)$$

con

$$n \equiv \frac{\epsilon}{2} - s - \frac{1}{4}.$$

La ecuación (7.12) es la ecuación hipergeométrica confluyente. La solución regular en el origen es

$$w(z) = {}_1F_1 \left( -n, 2s + \frac{1}{2}; z \right).$$

Del problema (7-2) se desprende que  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Esta condición sobre  $n$  nos da las autoenergías discretas del sistema:

$$E_{n\ell} = \hbar\omega\epsilon = \left( 2n + 2s + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega = \hbar\omega \left( 2n + \ell + \frac{3}{2} \right),$$

con  $n = 0, 1, 2, \dots$  y  $\ell = 0, 1, 2, \dots$ . La función de onda correspondiente es

$$\Psi_{n\ell m}(\vec{r}) = \frac{N_{n\ell}}{\xi} \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \xi^{\ell+1} {}_1F_1 \left( -n, \ell + \frac{3}{2}, \xi^2 \right) Y_{\ell m}(\theta, \phi).$$

La energía del oscilador armónico tridimensional sólo depende de  $\Lambda = 2n + \ell$ , donde  $\Lambda = 0, 1, 2, \dots$ .  $\Lambda$  se denomina *número cuántico principal*:

$$E_{n\ell} = E_{\Lambda} = \hbar\omega \left( \Lambda + \frac{3}{2} \right).$$

La tabla 7.2 muestra los números cuánticos, la energía y la degeneración de los distintos niveles de energía del oscilador armónico tridimensional. Compare esta tabla con los resultados que se obtuvieron para el mismo problema usando coordenadas cartesianas.

Es claro que la relación entre  $\Lambda$  y los números cuánticos de la solución en coordenadas cartesianas  $n_x, n_y, n_z$  es:

$$\Lambda = n_x + n_y + n_z.$$

Analizando el problema en coordenadas cartesianas encontramos que la degeneración de  $E_{\Lambda}$  es  $\frac{1}{2}(\Lambda + 1)(\Lambda + 2)$ , ésta se puede obtener contando los distintos tríos de enteros mayores o iguales a cero ( $n_x, n_y, n_z$ ) cuya suma es  $\Lambda$ .

Puesto que la simetría esférica del oscilador armónico tridimensional sólo explica la degeneración  $(2\ell + 1)$  asociada a cada valor del momento angular total, el hecho de que existan estados degenerados en energía con distintos valores de  $\ell$  corresponde a una situación excepcional, que se da sólo con muy pocos potenciales centrales  $V(r)$ , otro caso especial es el potencial coulombiano  $V(r) = \alpha/r$ .

$n$	$\ell$	$\Lambda$	$(n+1)\ell$ notación	$E/\hbar\omega$	degeneración parcial	degeneración total	paridad
0	0	0	1s	3/2	1	1	+
0	1	1	1p	5/2	3	3	-
0	2	2	1d		5		
1	0	2	2s	7/2	1	6	+
0	3	3	1f		7		
1	1	3	2p	9/2	3	10	-
0	4	4	1g		9		
1	2	4	2d	11/2	5	15	+
2	0	4	3s		1		

Tabla 7.2: Oscilador armónico tridimensional.

Esta degeneración en energía entre estados con distintos valores de  $\ell$  se puede explicar en términos de simetrías del Hamiltoniano  $\check{\mathbf{H}}$  en el espacio de configuración  $(\vec{p}, \vec{r})$  de dimensión 6; allí el Hamiltoniano básicamente corresponde a la norma euclídeana de un sexti-vector del espacio  $(\vec{p}, \vec{r})$ :

$$\check{\mathbf{H}} = \frac{1}{2\mu} \check{\mathbf{V}}^2,$$

con

$$\check{\mathbf{V}} = (\check{p}_x, \check{p}_y, \check{p}_z; \mu\omega\check{x}, \mu\omega\check{y}, \mu\omega\check{z}).$$

Cualquier operador unitario  $\check{\mathbf{U}}$  que preserve la norma euclídeana en este espacio de dimensión 6, dejará a  $\check{\mathbf{H}}$  invariante. En efecto, si

$$\check{\mathbf{U}}\check{\mathbf{V}}\check{\mathbf{U}}^{-1} = \check{\mathbf{V}}',$$

con  $\check{\mathbf{V}}'^2 = \check{\mathbf{V}}^2$ , entonces

$$\check{\mathbf{U}}\check{\mathbf{H}}\check{\mathbf{U}}^{-1} = \check{\mathbf{H}},$$

y, por tanto, si  $\check{\mathbf{H}}|\Psi_E\rangle = E|\Psi_E\rangle$  entonces  $\check{\mathbf{U}}|\Psi_E\rangle$  es degenerado con  $|\Psi_E\rangle$ .

De hecho existen operaciones unitarias que sin corresponder a rotaciones euclídeanas en el espacio ordinario  $\mathbb{R}^6$ , dejan a  $\check{\mathbf{V}}^2$  invariante. Son justamente estas operaciones de simetría de  $\check{\mathbf{H}}$  las que explican la degeneración adicional del oscilador armónico tridimensional (ver subsección siguiente).

Escribamos en forma explícita las funciones de onda para los 3 primeros estados. Para el estado 1s, es decir,  $n = 0$  y  $\ell = m = 0$  se tiene que

$${}_1F_1\left(0, \frac{3}{2}; \xi^2\right) = 1.$$

Para el estado  $2s$ , es decir,  $n = 1$  y  $\ell = m = 0$  se tiene que

$${}_1F_1\left(-1, \frac{3}{2}; \xi^2\right) = 1 - \frac{2}{3}\xi^2.$$

Para el estado  $1p$  se tiene que

$${}_1F_1\left(0, \frac{5}{2}; \xi^2\right) = 1,$$

y para el estado  $1d$

$${}_1F_1\left(0, \frac{7}{2}; \xi^2\right) = 1.$$

De esta manera las funciones de onda son:

$$\begin{aligned} \text{Estado } 1s \quad \langle \vec{r} | 100 \rangle &= \frac{2}{\sqrt[4]{\pi}} \exp(-\xi^2/2) \\ \text{Estado } 1p \quad \langle \vec{r} | 11m \rangle &= \sqrt{\frac{8}{3\sqrt{\pi}}} \xi \exp(-\xi^2/2) Y_{1m}(\theta, \phi) \\ \text{Estado } 1d \quad \langle \vec{r} | 12m \rangle &= \frac{4}{\sqrt{15\sqrt{\pi}}} \xi^2 \exp(-\xi^2/2) Y_{2m}(\theta, \phi) \\ \text{Estado } 2s \quad \langle \vec{r} | 200 \rangle &= \sqrt{\frac{8}{3\sqrt{\pi}}} \left(\xi^2 - \frac{3}{2}\right) \exp(-\xi^2/2) \end{aligned}$$

### 7.6.1 Operadores de subida y bajada.

Recordando los desarrollos del oscilador armónico unidimensional introduzcamos operadores de *subida* y *bajada* definidos por:

$$\check{\mathbf{a}}_j \equiv \frac{1}{\sqrt{2\mu\hbar\omega}} (\mu\omega\check{\mathbf{r}}_j + i\check{\mathbf{p}}_j)$$

y

$$\check{\mathbf{a}}_j^\dagger = \check{\mathbf{b}}_j \equiv \frac{1}{\sqrt{2\mu\hbar\omega}} (\mu\omega\check{\mathbf{r}}_j - i\check{\mathbf{p}}_j),$$

con  $j = x, y, z$ . Los conmutadores de estos operadores con el Hamiltoniano son

$$[\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{a}}_j] = -\hbar\omega\check{\mathbf{a}}_j \quad \text{y} \quad [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{b}}_j] = \hbar\omega\check{\mathbf{b}}_j. \quad (7.13)$$

Ejercicio: (Problema 7-3) Demuestre que si  $|\Psi_E\rangle$  es autovector del Hamiltoniano  $\check{\mathbf{H}}$ , es decir,  $\check{\mathbf{H}}|\Psi_E\rangle = E|\Psi_E\rangle$ , entonces el estado  $\check{\mathbf{a}}_j|\Psi_E\rangle$  también es autoestado de  $\check{\mathbf{H}}$ , pero con autoenergía  $E - \hbar\omega$ . Análogamente, muestre que el estado  $\check{\mathbf{b}}_j|\Psi_E\rangle$  es autovector de  $\check{\mathbf{H}}$  con autoenergía  $E + \hbar\omega$ . De esta manera, tenemos tres operadores de subida y tres operadores de bajada.

Definamos ahora el operador  $\check{\mathbf{a}} = (\check{a}_1, \check{a}_2, \check{a}_3)$  y  $\check{\mathbf{b}} = \check{\mathbf{a}}^\dagger$ . Estos operadores son operadores vectoriales respecto a  $\check{\mathbf{L}}$ , demuéstrello como ejercicio, (Problema 7-4), es decir, cumplen las siguientes reglas de conmutación:

$$[\check{\mathbf{a}}_j, \check{\mathbf{L}}_k] = i\hbar \sum_i \epsilon_{jki} \check{a}_i$$

y

$$[\check{\mathbf{b}}_j, \check{\mathbf{L}}_k] = i\hbar \sum_i \epsilon_{jki} \check{b}_i .$$

Note que son operadores vectoriales aún cuando no son autohermíticos.

Sean  $\{|\Lambda \ell m\rangle\}$  los autovectores del oscilador armónico tridimensional, es decir,

$$\check{\mathbf{H}}|\Lambda \ell m\rangle = \hbar\omega \left(\Lambda + \frac{3}{2}\right) |\Lambda \ell m\rangle ,$$

$$\check{\mathbf{L}}^2|\Lambda \ell m\rangle = \hbar^2 \ell(\ell + 1) |\Lambda \ell m\rangle$$

y

$$\check{\mathbf{L}}_z|\Lambda \ell m\rangle = \hbar m |\Lambda \ell m\rangle .$$

Entonces:

### Proposición 7.1

$$\check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}} |\Lambda \ell m\rangle \propto |\Lambda + 2\ell m\rangle .$$

**Demostración** Siendo  $\check{\mathbf{b}}$  un operador vectorial se tiene que  $\check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}}$  es invariante ante rotaciones, y, por tanto,  $[\check{\mathbf{L}}_j, \check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}}] = 0$  para  $j = x, y, z$ . Demuestre la expresión anterior evaluando explícitamente el conmutador. En particular, se tiene que

$$\check{\mathbf{L}}^2 \check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}} = \check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}} \check{\mathbf{L}}^2$$

y

$$\check{\mathbf{L}}_z \check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}} = \check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}} \check{\mathbf{L}}_z .$$

Usando estas expresiones se encuentra que

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{L}}^2 \check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}} |\Lambda \ell m\rangle &= \check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}} \check{\mathbf{L}}^2 |\Lambda \ell m\rangle \\ &= \check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}} \hbar^2 \ell(\ell + 1) |\Lambda \ell m\rangle \\ &= \hbar^2 \ell(\ell + 1) \left( \check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}} |\Lambda \ell m\rangle \right) , \end{aligned}$$



es decir,  $\check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}} | \Lambda \ell m \rangle$  es autovector de  $\check{\mathbf{L}}^2$  con autovalor  $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$ . De la misma manera se demuestra que  $\check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}} | \Lambda \ell m \rangle$  también es autovector de  $\check{\mathbf{L}}_z$  con autovalor  $\hbar m$ . Concluimos que el operador  $\check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}}$  no afecta la parte angular de los autoestados.

Evaluemos ahora  $\check{\mathbf{H}} (\check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}} | \Lambda \ell m \rangle)$ . Para el conmutador  $[\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}}]$  se tiene que

$$\begin{aligned} [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}}] &= \sum_j (\check{\mathbf{b}}_j [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{b}}_j] + [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{b}}_j] \check{\mathbf{b}}_j) \\ &= 2\hbar\omega \sum_j \check{\mathbf{b}}_j \check{\mathbf{b}}_j = 2\hbar\omega \check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}}. \end{aligned}$$

Usando este conmutador se encuentra que

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{H}} (\check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}} | \Lambda \ell m \rangle) &= (\check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}} \check{\mathbf{H}} + 2\hbar\omega \check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}}) | \Lambda \ell m \rangle \\ &= \hbar\omega \left( \Lambda + 2 + \frac{3}{2} \right) (\check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}} | \Lambda \ell m \rangle), \end{aligned}$$

luego,  $(\check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}} | \Lambda \ell m \rangle)$  es autovector de  $\check{\mathbf{H}}$  con autovalor  $\hbar\omega(\Lambda + 2 + 3/2)$ . Con esto queda demostrada la proposición.

Definamos ahora los operadores

$$\check{\mathbf{a}}_+ = \check{\mathbf{a}}_x + i\check{\mathbf{a}}_y \quad \text{y} \quad \check{\mathbf{b}}_+ = \check{\mathbf{b}}_x + i\check{\mathbf{b}}_y.$$

### Proposición 7.2

$$\check{\mathbf{b}}_+ | \Lambda \ell \ell \rangle \propto | \Lambda + 1 \ell + 1 \ell + 1 \rangle \quad \text{y} \quad \check{\mathbf{a}}_+ | \Lambda \ell \ell \rangle \propto | \Lambda - 1 \ell + 1 \ell + 1 \rangle.$$

**Demostración** Debido a que  $\check{\mathbf{b}}$  es un operador vectorial es claro que  $\check{\mathbf{b}}_+ | \Lambda \ell \ell \rangle$  es autovector de  $\check{\mathbf{L}}^2$  y  $\check{\mathbf{L}}_z$  con autovalores  $\hbar^2(\ell + 1)(\ell + 2)$  y  $\hbar(\ell + 1)$ , respectivamente. El conmutador de  $\check{\mathbf{b}}_+$  con  $\check{\mathbf{H}}$  es  $[\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{b}}_+] = \hbar\omega \check{\mathbf{b}}_+$ . Demuéstrelo como ejercicio (Problema 7-5). Luego

$$\check{\mathbf{H}} \check{\mathbf{b}}_+ | \Lambda \ell \ell \rangle = (\check{\mathbf{b}}_+ \check{\mathbf{H}} + \hbar\omega \check{\mathbf{b}}_+) | \Lambda \ell \ell \rangle = \hbar\omega \left( \Lambda + 1 + \frac{3}{2} \right) \check{\mathbf{b}}_+ | \Lambda \ell \ell \rangle,$$

es decir,  $(\check{\mathbf{b}}_+ | \Lambda \ell \ell \rangle)$  es autovector de  $\check{\mathbf{H}}$  con autovalor  $\hbar\omega(\Lambda + 1 + 3/2)$ . Con esto queda demostrada la proposición.

### Proposición 7.3

$$\check{\mathbf{a}}_+ \check{\mathbf{b}}_+ | \Lambda \ell \ell \rangle \propto | \Lambda \ell + 2 \ell + 2 \rangle.$$

**Demostración** Es fácil demostrar que  $\check{\mathbf{a}}_+\check{\mathbf{b}}_+$  conmuta con  $\check{\mathbf{H}}$ , demuéstrello como ejercicio (Problema 7-6). Luego  $\check{\mathbf{a}}_+\check{\mathbf{b}}_+|\Lambda\ell\rangle$  es autovector de  $\check{\mathbf{H}}$  con el autovalor  $\hbar\omega(\Lambda+3/2)$ . Usando la proposición 2 se encuentra que  $\check{\mathbf{a}}_+\check{\mathbf{b}}_+|\Lambda\ell\rangle$  es autovector de  $\check{\mathbf{L}}^2$  y  $\check{\mathbf{L}}_z$  con autovalores  $\hbar^2(\ell+2)(\ell+3)$  y  $\hbar(\ell+2)$ , respectivamente. Con esto queda demostrada la proposición.

Esta última proposición concuerda con la tabla de autoestados que se mostró anteriormente para el oscilador armónico tridimensional, pues en ella aparecen como degenerados estados con un  $\Delta\ell = 2$ ; por ejemplo, para  $E = \frac{9}{2}\hbar\omega$  son degenerados los estados con  $\ell = 1$  y  $\ell = 3$ ; para  $E = \frac{11}{2}\hbar\omega$  son degenerados los estados con  $\ell = 0, 2$  y  $4$ .

Recordemos un resultado que ya hemos demostrado.

#### Proposición 7.4

$$\check{\mathbf{L}}_-|\Lambda\ell m\rangle \propto |\Lambda\ell m-1\rangle.$$

Usando las proposiciones (7.1–7.4) se demuestra ahora fácilmente que:

$$(\check{\mathbf{L}}_-)^{\ell-m}\check{\mathbf{b}}_+^{\ell}(\check{\mathbf{b}}\cdot\check{\mathbf{b}})^{\frac{\Lambda-\ell}{2}}|000\rangle \propto |\Lambda\ell m\rangle. \quad (7.14)$$

Acá  $(\Lambda-\ell)/2$  debe ser entero no negativo. Si  $\Lambda$  es par entonces  $\ell = 0, 2, 4, \dots, \Lambda$ , y si  $\Lambda$  es impar entonces  $\ell = 1, 3, 5, \dots, \Lambda$ . De lo anterior se concluye que  $\text{Deg}(E_\Lambda) = \frac{1}{2}(\Lambda+1)(\Lambda+2)$ . Como este resultado coincide con el obtenido usando coordenadas cartesianas, se concluye que la relación (7.14) representa la forma más general posible de un autoestado de  $\check{\mathbf{H}}$ .

Definamos ahora los operadores

$$\check{\mathbf{J}}_{ij} = i(\check{\mathbf{a}}_i\check{\mathbf{b}}_j - \check{\mathbf{a}}_j\check{\mathbf{b}}_i) \quad \text{y} \quad \check{\mathbf{K}}_{ij} = (\check{\mathbf{a}}_i\check{\mathbf{b}}_j + \check{\mathbf{a}}_j\check{\mathbf{b}}_i).$$

Demuestre como ejercicio (Problema 7-8) que estos operadores son autohermíticos. También demuestre que son constantes de movimiento para el oscilador armónico tridimensional, es decir, demuestre que

$$[\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{J}}_{ij}] = [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{K}}_{ij}] = 0.$$

De acá se concluye que el operador unitario

$$\check{\mathbf{U}} = \exp \left\{ -i \left( \sum_{i \neq j} \lambda_{ij} \check{\mathbf{J}}_{ij} + \sum_{ij} \tau_{ij} \check{\mathbf{K}}_{ij} \right) \right\},$$

con  $(\lambda_{ij}, \tau_{ij} \in \mathbb{R})$  deja invariante al Hamiltoniano:

$$\check{\mathbf{U}}\check{\mathbf{H}}\check{\mathbf{U}}^{-1} = \check{\mathbf{H}}.$$

Son precisamente éstos los operadores asociados a transformaciones que preservan la norma del sexti-vector  $\check{\mathbf{V}}$  mencionado anteriormente.

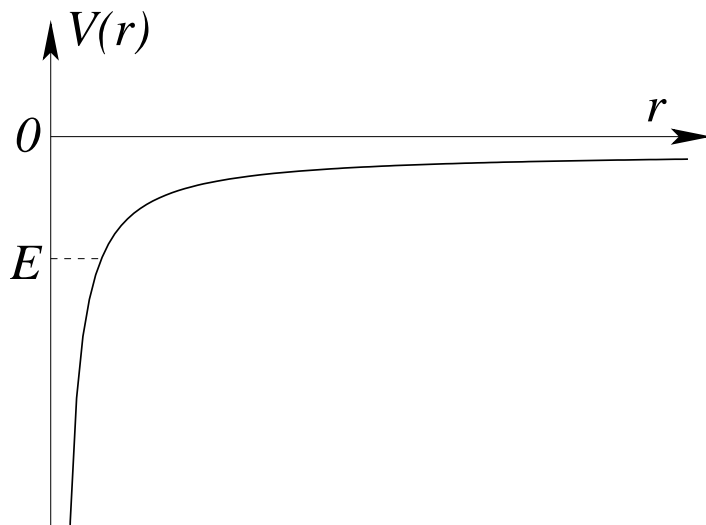


Figura 7.3: Potencial coulombiano atractivo.

Note que, en particular,  $\check{\mathbf{J}}_{jk} = \frac{1}{\hbar} \epsilon_{jkl} \check{\mathbf{L}}_\ell$ . Mientras las constantes de movimiento  $\langle \check{\mathbf{J}}_{ij} \rangle$  representan la conservación del momento angular, las constantes de movimiento  $\langle \check{\mathbf{K}}_{ij} \rangle$  están asociadas clásicamente al hecho que un potencial armónico lleva a órbitas elípticas, las cuales (por no precesar) mantienen fijos en el espacio los puntos de retroceso (esto es, el periastro y el apoastro). De este modo, existe una relación entre el hecho que el problema cuántico posea una degeneración “extra” (normalmente llamada “degeneración accidental”) y el carácter cerrado de las órbitas clásicas. Una situación análoga vuelve a presentarse en el átomo de hidrógeno (problema asociado a las órbitas keplerianas clásicas).

## 7.7 El átomo de hidrógeno.

En esta sección consideraremos el problema de una partícula de masa  $\mu$  ligada por un potencial de la forma (ver figura 7.3)

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}.$$

Deseamos encontrar los estados ligados, o sea, los estados estacionarios con energía  $E < 0$ .

Definamos  $\gamma > 0$  a través de

$$E = -\frac{\hbar^2 \gamma^2}{2\mu}. \quad (7.15)$$

Con esta nomenclatura la ecuación radial de Schrödinger para el presente problema es

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \gamma^2 + \frac{2\gamma n}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u_{\gamma\ell}(r) = 0,$$

con

$$n \equiv \frac{\mu Z e^2}{\gamma \hbar^2} . \quad (7.16)$$

Repitamos el análisis realizado para el problema del oscilador armónico tridimensional, esto es, analicemos el comportamiento de las soluciones de la ecuación diferencial para  $r \rightarrow 0$  y  $r \rightarrow \infty$ .

La ecuación radial de Schrödinger para  $r \rightarrow \infty$  es

$$\left( \frac{d^2}{dr^2} - \gamma^2 \right) u(r) = 0 .$$

Dos soluciones linealmente independientes son

$$u(r) = e^{\gamma r}$$

y

$$u(r) = e^{-\gamma r} .$$

La primera de estas es físicamente inaceptable pues  $u(r)$  debe tender a cero para grandes valores de  $r$ .

Cerca del origen de la ecuación radial de Schrödinger toma la forma

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] u(r) = 0 .$$

Busquemos soluciones del tipo  $u(r) = r^\alpha$ . Con este *Ansatz* se obtiene para  $\alpha$

$$\alpha(\alpha - 1) - \ell(\ell + 1) = 0 ,$$

es decir,

$$\alpha_1 = -\ell ,$$

y

$$\alpha_2 = \ell + 1 .$$

Como  $u(r)$  debe ser regular en el origen, el primer valor de  $\alpha$  resulta ser inaceptable. Luego la solución física se comporta cerca del origen de la forma

$$u(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} r^{\ell+1} .$$

La discusión anterior sugiere introducir la función  $f(r)$  definida por

$$u(r) = r^{\ell+1} e^{-\gamma r} f(r) ,$$

y buscar la ecuación diferencial que satisface. Para la primera y segunda derivada de  $u(r)$  se obtiene

$$\frac{d}{dr}u = (\ell + 1)r^\ell e^{-\gamma r} f - \gamma r^{\ell+1} e^{-\gamma r} f + r^{\ell+1} e^{-\gamma r} f'$$

y

$$\frac{d^2u}{dr^2} = r^{\ell+1} e^{-\gamma r} \left[ \left( \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2(\ell+1)}{r} \gamma + \gamma^2 \right) f + 2 \left( \frac{\ell+1}{r} - \gamma \right) f' + f'' \right] .$$

Con la ayuda de estas relaciones se encuentra que la ecuación diferencial para  $f(r)$  es

$$f'' + 2 \left( \frac{\ell+1}{r} - \gamma \right) f' + \frac{2}{r} \gamma (n - (\ell+1)) f = 0 .$$

Cambiamos de variable

$$\rho \equiv 2\gamma r ,$$

y llamemos  $\bar{f}(\rho) = f(r)$ . De esta manera la ecuación se simplifica un poco:

$$\left[ \rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (2\ell + 2 - \rho) \frac{d}{d\rho} - (\ell + 1 - n) \right] \bar{f}(\rho) = 0 .$$

Ésta es la ecuación de la función hipergeométrica confluyente. La solución regular en el origen es

$$\bar{f}(\rho) = {}_1F_1(\ell + 1 - n, 2\ell + 2; \rho) .$$

Igual que en el caso del oscilador armónico, la serie hipergeométrica debe ser un polinomio para que el comportamiento de  $u(r)$  para  $r \rightarrow +\infty$  sea aceptable. Esto implica que el término  $-(\ell + 1 - n)$  debe ser un entero no negativo, o sea

$$n_r = n - \ell - 1 , \quad \text{con } n_r = 0, 1, 2, \dots .$$

De esta relación se deduce que

$$n = n_r + \ell + 1 ,$$

es decir,  $n$  a su vez también debe ser un entero positivo. Esta condición nos da los niveles de energía discretos que posee el sistema. Para las energías de los autoestados se obtiene (usando las ecuaciones (7.15) y (7.16)) la expresión

$$E_n = -\frac{\hbar^2 \gamma^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left( \frac{\mu^2 Z^2 e^2}{\hbar^4 n^2} \right) = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{RZ^2}{n^2} .$$

La energía depende sólo de  $n$ , el *número cuántico principal*.  $R = 13.6$  [eV] es la constante de Rydberg.

$n$	$n_r$	$\ell$	$(n \ell)$ Nomenclatura	$E_n/RZ^2$	deg. parcial	deg. total	paridad
1	0	0	1s	1	1	1	+
2	1	0	2s	1/4	1	4	+
	0	1	2p	1/4	3		-
3	2	0	3s	1/9	1	9	+
	1	1	3p	1/9	3		-
	0	2	3d	1/9	5		+
4	3	0	4s	1/16	3	1	+
	2	1	4p	1/16		-	
	1	2	4d	1/16	5	16	+
	0	3	4f	1/16	7	-	

Tabla 7.3: Niveles de energía del átomo de hidrógeno.

Note que para un mismo valor de  $n$ , el número cuántico  $\ell$  puede tomar varios valores distintos, si simultáneamente se varía también el número cuántico  $n_r$ . Para  $n$  fijo, el máximo valor que puede tener el momento angular es  $\ell_{max} = n - 1$ . El hecho de que exista una degeneración en energía entre estados correspondientes a distintos momentos angulares orbitales  $\ell$ , es una consecuencia de las simetrías especiales que posee este particular sistema.

La tabla 7.3 muestra las energías, degeneración, paridad y los números cuánticos de los distintos autoestados del átomo de hidrógeno.

Para el estado con números cuánticos  $n, \ell, m$ , la función de onda viene dada por

$$\langle \vec{r} | n \ell m \rangle = \Psi_{n \ell m}(r, \theta, \phi) = C_{n \ell} r^\ell e^{-\gamma r} {}_1F_1(\ell + 1 - n, 2\ell + 2; 2\gamma r) Y_{\ell m}(\theta, \phi),$$

donde la constante de normalización  $C_{n \ell}$  es

$$C_{n \ell} = \frac{(2\gamma)^\ell}{(2\ell + 1)!} \sqrt{(2\gamma)^3 \frac{(n + \ell)!}{2n(n - \ell - 1)!}}.$$

El número cuántico  $n_r = -(\ell + 1 - n)$  da el número de nodos radiales que posee de la función de onda.

Para un  $n$  fijo, la degeneración del nivel es

$$\text{Deg}(E_n) = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = n^2.$$

Escribamos explícitamente algunas funciones de onda. Para el estado fundamental 1s, los números cuánticos son  $n = 1$  y  $\ell = m = 0$ , por lo tanto,

$$\begin{aligned} \Psi_{100}(r, \theta, \phi) &= C_{10} e^{-\gamma r} {}_1F_1(0, 2; 2\gamma r) Y_{00} = \frac{C_{10} e^{-\gamma r}}{\sqrt{4\pi}} \\ &= \sqrt{\frac{\gamma^3}{\pi}} e^{-\gamma r}, \end{aligned} \quad (7.17)$$

con

$$\gamma = \frac{\mu Z e^2}{\hbar^2} = \frac{Z}{a_0}.$$

Aquí  $a_0 = 0.52947 \text{ [\AA]}$  es el radio de Bohr. Sustituyendo  $\gamma$  en (7.17) se obtiene

$$\Psi_{100}(\vec{r}) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right).$$

Escribamos ahora la función de onda para el estado  $3p$ , los números cuánticos son  $n = 3$ ,  $\ell = 1$ :

$$\Psi_{31m}(\vec{r}) = C_{31} r e^{-\gamma r} {}_1F_1(-1, 4; 2\gamma r) Y_{1m}(\theta, \phi).$$

Pero

$${}_1F_1(-1, 4; 2\gamma r) = 1 - \frac{\gamma r}{2},$$

y para el estado  $3p$  la constante  $\gamma$  es

$$\gamma = \frac{1}{3} \frac{\mu Z e^2}{\hbar^2} = \frac{Z}{3a_0},$$

luego,

$$\Psi_{31m}(\vec{r}) = C_{31} r \left(1 - \frac{Zr}{6a_0}\right) \exp\left(-\frac{Zr}{3a_0}\right) Y_{1m}(\theta, \phi).$$

Finalmente, evaluemos  $\langle r \rangle$ ,  $\langle r^2 \rangle$ ,  $\langle 1/r \rangle$  y  $\langle 1/r^2 \rangle$  para el estado fundamental. Se tiene:

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \int d^3r |\Psi_{100}(\vec{r})|^2 \\ &= \left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \frac{1}{\pi} 4\pi \int_0^\infty dr r^3 \exp\left(-\frac{2Zr}{a_0}\right) \\ &= \frac{3a_0}{2Z}, \\ \langle r^2 \rangle &= a_0 \frac{n^2 [5n^2 + 1 - 3\ell(\ell + 1)]}{2Z^2}, \\ \left\langle \frac{1}{r} \right\rangle &= \frac{Z}{a_0 n^2}, \\ \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle &= \frac{Z^2}{a_0^2 n^3 (\ell + 1/2)}. \end{aligned}$$

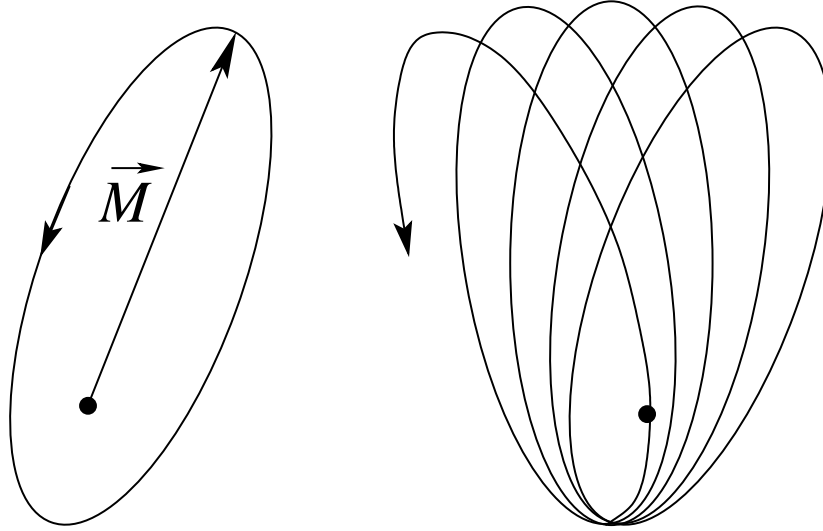


Figura 7.4: (a) Órbita kepleriana, el apoastro es fijo y  $\vec{M}$  es una constante de movimiento. (b) Órbita en un potencial no kepleriano, el apoastro precesa.

### 7.7.1 Degeneración accidental del átomo de hidrógeno.

Escribamos el Hamiltoniano del átomo de hidrógeno en la forma

$$\check{H} = \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(\check{\mathbf{r}}) ,$$

con

$$V(r) = \frac{\alpha}{r} .$$

En vista de la simetría esférica del Hamiltoniano tenemos inmediatamente tres constantes de movimiento:  $\check{L}_x$ ,  $\check{L}_y$  y  $\check{L}_z$ . Por otra parte, si pensamos clásicamente, tenemos otras tres constantes de movimiento. Estas tres constantes adicionales están asociadas al vector que apunta en la dirección del “apoastro” (o punto de máxima elongación) de la órbita, como se indica en figura 7.4. Este vector que apunta en la dirección del apoastro y que mantiene constante su módulo, se llama *vector de Runge-Lenz* y viene dado por

$$\vec{M} = \frac{1}{2\mu} \left( \vec{L} \times \vec{p} - \vec{p} \times \vec{L} \right) + \alpha \frac{\vec{r}}{r} .$$

Esta expresión se ha escrito de modo que, al sustituir las variables clásicas por operadores cuánticos, el operador  $\check{M}$  resultante sea un operador autohermítico. Es fácil demostrar que

$$[\check{H}, \check{M}_j] = 0 , \quad j = x, y, z ,$$

luego, el operador  $\check{M}$  también es una constante de movimiento cuántica.



Transformemos el operador  $\check{\mathbf{M}}$  usando el operador unitario de las rotaciones. Tenemos

$$\begin{aligned} e^{i\vec{\phi}\cdot\check{\mathbf{L}}/\hbar} \check{\mathbf{M}}(\check{\mathbf{L}}, \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{r}}) e^{-i\vec{\phi}\cdot\check{\mathbf{L}}/\hbar} &= \check{\mathbf{M}}(R_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{L}}, R_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{p}}, R_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{r}}) \\ &= \frac{1}{2\mu} \left[ R_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{L}} \times R_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{p}} - R_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{p}} \times R_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{L}} \right] + \frac{R_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{r}}}{|R_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{r}}|} \\ &= R_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{M}}. \end{aligned} \quad (7.18)$$

Acá  $R_{\vec{\phi}} = R(\vec{\phi})$  es el operador de rotación en  $\mathbb{R}^3$ . La ecuación (7.18) demuestra que  $\check{\mathbf{M}}$  es un operador vectorial.

Denotemos por  $\{|n\ell m\rangle\}$  a los autoestados del átomo de hidrógeno que simultáneamente son autoestados de  $\check{\mathbf{H}}$ ,  $\check{\mathbf{L}}^2$  y  $\check{\mathbf{L}}_z$  con autovalores  $E_n$ ,  $\hbar^2\ell(\ell+1)$  y  $\hbar m$ , respectivamente. Introduzcamos los operadores  $\check{\mathbf{M}}_{\pm} = \check{\mathbf{M}}_x \pm i\check{\mathbf{M}}_y$ . Por ser  $\check{\mathbf{M}}$  un operador vectorial, se tiene que

$$(\check{\mathbf{M}}_+)^{\ell} |n00\rangle = C_{\ell} |n\ell\ell\rangle.$$

$C_{\ell}$  es una constante de proporcionalidad. Se puede probar que  $C_{\ell} \neq 0$  si  $\ell \leq n-1$ , pero que  $C_{\ell=n} = 0$ .

Aplicando  $\ell - m$  veces el operador  $\check{\mathbf{L}}_-$  se concluye que

$$|n\ell m\rangle \propto (\check{\mathbf{L}}_-)^{\ell-m} (\check{\mathbf{M}}_+)^{\ell} |n00\rangle,$$

con  $\ell = 0, 1, 2, \dots, n-1$  y  $m = -\ell, \dots, +\ell$ .

Como  $[\check{\mathbf{L}}_j, \check{\mathbf{H}}] = [\check{\mathbf{M}}_j, \check{\mathbf{H}}] = 0$ , se concluye que

$$\check{\mathbf{U}}\check{\mathbf{H}}\check{\mathbf{U}}^{-1} = \check{\mathbf{H}},$$

con

$$\check{\mathbf{U}} = e^{-i(\vec{\phi}\cdot\check{\mathbf{L}} + \vec{\theta}\cdot\check{\mathbf{M}})/\hbar}.$$

De este modo el grupo de simetría del Hamiltoniano del átomo de Hidrógeno es un grupo bastante amplio; posee 6 parámetros para enumerar sus elementos. Se puede probar que dicho grupo es isomorfo al grupo de operaciones euclidianas en  $\mathbb{R}^4$ . Es justamente este hecho lo que explica la degeneración extra, a veces llamada *degeneración accidental*) que posee el átomo de Hidrógeno. Si  $|\Psi_E\rangle$  es autoestado de  $\check{\mathbf{H}}$  con energía  $E$ , entonces el conjunto completo de funciones  $\{\check{\mathbf{U}}(\vec{\phi}, \vec{\theta})|\Psi_E\rangle; (\vec{\phi}, \vec{\theta}) \in \mathbb{R}^6\}$ , será degenerado con  $|\Psi_E\rangle$ .

## 7.8 Problemas

7-1) Recurriendo a un álgebra de operadores, diagonalice el conjunto de observables compatibles  $\{\check{\mathbf{H}} = \check{\mathbf{p}}^2/(2\mu), \check{\mathbf{L}}^2, \check{\mathbf{L}}_z\}$ , siguiendo las siguientes instrucciones:

(i) Demuestre que para  $\ell = 0$ , las autofunciones con energía

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu},$$

vienen dadas por

$$\Psi_{k,\ell=m=0}(r) = A \frac{\text{sen}(kr)}{kr} - B \frac{\text{cos } kr}{kr}.$$

(ii) Demuestre que el operador momento lineal  $\check{\mathbf{p}}$  satisface

$$[\check{\mathbf{p}}_+, \check{\mathbf{H}}] = 0,$$

donde  $\check{\mathbf{p}}_+ = \check{\mathbf{p}}_x + i\check{\mathbf{p}}_y$ . Luego, usando el hecho que  $\check{\mathbf{p}}$  es operador vectorial, concluya que

$$\left(\frac{i}{\hbar}\check{\mathbf{p}}_+\right)^\ell \Psi_{k00}(\vec{r}) = \Psi_{k\ell\ell}(\vec{r}).$$

(iii) Luego demuestre que

$$\frac{i}{\hbar}p_+^{(op)} f(r) = (x + iy) \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} f(r),$$

y además que

$$[\check{\mathbf{p}}_+, (\check{\mathbf{x}} + i\check{\mathbf{y}})] = 0.$$

(iv) Combinando los resultados anteriores concluya finalmente que

$$\Psi_{k\ell\ell}(\vec{r}) = \left(\frac{x + iy}{r}\right)^\ell r^\ell \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\right)^\ell \Psi_{k00}(r) = R_{k\ell}(r) Y_{\ell\ell}(\theta, \phi).$$

Identificando, salvo una constante multiplicativa, a  $[(x + iy)/r]^\ell$  con los armónicos esféricos  $Y_{\ell\ell}(\theta, \phi)$ , concluimos que la función radial  $R_{k\ell}$  se puede escribir en la forma

$$R_{k\ell}(r) = A_\ell j_\ell(kr) + B_\ell n_\ell(kr),$$

con

$$j_\ell(kr) = \left(-\frac{r}{k}\right)^\ell \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\right)^\ell \left(\frac{\text{sen } kr}{kr}\right)$$

y

$$n_\ell(kr) = \left(-\frac{r}{k}\right)^\ell \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\right)^\ell \left(-\frac{\text{cos } kr}{kr}\right).$$

7-2) Demuestre que para que se tenga  $u(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$ , la función hipergeométrica  ${}_1F_1\left(-n, 2s + \frac{1}{2}; z\right)$  debe ser un polinomio, es decir, la serie debe terminar. Esto sólo ocurre si  $n$  es un entero no negativo.

7-3) Para el caso de un Hamiltoniano de oscilador armónico en 3 dimensiones, demuestre que si  $|\Psi_E\rangle$  es autovector de  $\check{\mathbf{H}}$ , es decir,  $\check{\mathbf{H}}|\Psi_E\rangle = E|\Psi_E\rangle$ , entonces el estado  $\check{\mathbf{a}}_j|\Psi_E\rangle$  también es autoestado de  $\check{\mathbf{H}}$ , pero con autoenergía  $E - \hbar\omega$ . Análogamente, muestre que el estado  $\check{\mathbf{b}}_j|\Psi_E\rangle$  es autovector de  $\check{\mathbf{H}}$  con autoenergía  $E + \hbar\omega$ . Use las definiciones de  $\check{\mathbf{a}}_j$  y  $\check{\mathbf{b}}_j$ , ecuación (7.13).

7-4) Demuestre que los operadores definidos (7.13) son operadores vectoriales respecto a  $\check{\mathbf{L}}$ .

7-5) Demuestre que

$$[\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{b}}_+] = \hbar\omega\check{\mathbf{b}}_+ .$$

7-6) Demuestre que  $\check{\mathbf{a}}_+\check{\mathbf{b}}_+$  conmuta con  $\check{\mathbf{H}}$ .

7-7) Demuestre que

$$(\check{\mathbf{L}}_-)^{\ell+2-m}\check{\mathbf{a}}_+\check{\mathbf{b}}_+|\Lambda\ell\rangle \propto |\Lambda\ell + 2m\rangle .$$

7-8) Definamos ahora los operadores

$$\check{\mathbf{J}}_{ij} = i(\check{\mathbf{a}}_i\check{\mathbf{b}}_j - \check{\mathbf{a}}_j\check{\mathbf{b}}_i)$$

y

$$\check{\mathbf{K}}_{ij} = (\check{\mathbf{a}}_i\check{\mathbf{b}}_j + \check{\mathbf{a}}_j\check{\mathbf{b}}_i) .$$

Demuestre que estos operadores son autohermíticos. También demuestre que son constantes de movimiento para el oscilador armónico tridimensional, es decir, demuestre que

$$[\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{J}}_{ij}] = [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{K}}_{ij}] = 0 .$$

7-9) Para las componentes del vector de Runge-Lenz, demuestre que

$$[\check{\mathbf{M}}_i, \check{\mathbf{L}}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \check{\mathbf{M}}_k .$$