



Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile.
Las Palmeras 3425, Ñuñoa. Casilla 653, Correo 1, Santiago
FONO: 562 978 7276 FAX: 562 271 2973
E-MAIL: secretaria@fisica.ciencias.uchile.cl

Apuntes de un curso de
MECÁNICA CUÁNTICA I

Rodrigo Ferrer P.
Herbert Massmann L.
Víctor Muñoz G.
Jaime Rössler B.
José Rogan C.

Índice

0. La crisis de la física clásica.	1
0.1. La radiación del cuerpo negro.	1
0.1.1. Teoría clásica de Rayleigh-Jeans.	1
0.1.2. Teoría de Planck.	5
0.2. El efecto fotoeléctrico.	6
0.3. Calor específico de un gas de moléculas diatómicas.	8
0.4. Los rayos X y el efecto Compton.	9
0.5. La hipótesis de Louis de Broglie.	11
0.6. Principio de Complementariedad (dualidad onda-partícula).	12
0.7. Principio de correspondencia.	15
0.8. El átomo de hidrógeno.	16
0.9. La regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld.	20
0.10. El principio de incerteza.	25
0.11. Problemas.	29
1. Introducción matemática.	31
1.1. Espacio vectorial sobre el cuerpo complejo \mathbb{C}	31
1.2. Operadores lineales.	32
1.3. Vectores duales y producto interno.	32
1.4. Base de un espacio vectorial.	33
1.5. Espacios vectoriales de dimensión continua.	34
1.6. La δ de Dirac.	34
1.7. Norma.	37
1.8. Ortonormalización de una base de dimensión discreta.	37
1.9. Operadores de proyección $\check{\mathbf{P}}$	37
1.10. El operador identidad.	38
1.11. Operadores unitarios.	39
1.12. Cambio de base.	42
1.13. Notación de Dirac y la notación convencional de matrices.	44
1.14. Autovalores de un operador.	46
1.15. El caso de operadores autohermíticos.	49
1.16. Conmutadores.	51
1.16.1. Propiedades de los conmutadores.	52
1.17. Valor esperado y varianza.	55
1.18. Desigualdad de Schwartz.	56

1.19. Teorema: Principio de incerteza.	57
1.20. Problemas	59
2. Las ecuaciones básicas de la Mecánica Cuántica.	61
2.1. Introducción semiclásica para partículas libres.	61
2.2. Los postulados.	66
2.3. Conjunto completo de observables compatibles.	70
2.4. Los operadores $\check{\mathbf{p}}$ y $\check{\mathbf{r}}$	73
2.4.1. El conmutador $[\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}]$	76
2.4.2. El conmutador $[\check{\mathbf{x}}_i, \check{\mathbf{x}}_j]$ y $[\check{\mathbf{p}}_i, \check{\mathbf{p}}_j]$	77
2.4.3. Otras relaciones que involucran a $\check{\mathbf{r}}$ y $\check{\mathbf{p}}$	78
2.5. Uso del principio de correspondencia.	79
2.6. Ilustraciones.	85
2.6.1. Teorema del virial.	86
2.6.2. Regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn.	86
2.7. Paquetes de ondas y transformada de Fourier.	88
2.7.1. Superposición de ondas planas.	88
2.7.2. Transformada de Fourier.	90
2.7.3. Teorema de Parseval.	92
2.7.4. Propagación de un paquete de ondas.	93
2.7.5. Dispersión de un paquete de ondas gaussiano.	95
2.8. Normalización de una función de estado.	100
2.9. La función de Green para la partícula libre.	101
2.10. La ecuación de onda en presencia de fuerzas externas.	103
2.11. Densidad y corriente de probabilidad.	105
2.12. Propagador.	108
2.13. Un teorema importante.	109
2.14. El cuadro de Heisenberg.	113
2.15. Partícula libre en el cuadro de Heisenberg.	116
2.16. Leyes de conservación y simetrías	117
2.17. Estados estacionarios.	121
2.17.1. Operador de Green.	123
2.17.2. Funciones de onda reales.	124
2.18. Degeneración del espectro y simetrías.	125
2.19. El Wronskiano.	127
2.20. Condiciones de borde.	129
2.20.1. Continuidad de la función de onda.	134
2.21. Problemas	135
3. Solución de algunos problemas unidimensionales.	139
3.1. El pozo infinito.	139
3.1.1. Autofunciones y energías.	139
3.1.2. Regla de cuantificación de Bohr-Sommerfeld.	142
3.1.3. Ensanchamiento repentino.	143
3.1.4. Ensanchamiento adiabático.	145

3.1.5.	Presión y trabajo.	147
3.2.	Estados ligados en potenciales unidimensionales.	148
3.2.1.	Análisis dimensional.	149
3.2.2.	Potenciales singulares.	150
3.2.3.	Potenciales simétricos.	152
3.2.4.	Ejemplo ilustrativo.	153
3.2.5.	Consideraciones semiclásicas.	156
3.2.6.	Análisis numérico de la ecuación de Schrödinger.	159
3.2.7.	Resultados numéricos para algunos pozos.	163
3.3.	Partícula ligada a un potencial delta.	166
3.3.1.	Estado ligado en la representación de coordenadas.	166
3.3.2.	Estado ligado en la representación de momentos.	168
3.3.3.	Cambio brusco de la intensidad V_0	170
3.3.4.	Relación de completitud.	171
3.3.5.	Transformación de Galileo.	173
3.3.6.	Ionización tras una aceleración repentina.	175
3.4.	Resonancias y decaimiento exponencial.	177
3.4.1.	Estados estacionarios y resonancias.	179
3.4.2.	La fórmula de Breit-Wigner.	180
3.4.3.	Decaimiento exponencial.	183
3.4.4.	Energías complejas	186
3.4.5.	Consideraciones semiclásicas.	188
3.5.	Scattering sobre barreras.	189
3.5.1.	La matriz de transferencia.	189
3.5.2.	El caso de dos barreras.	192
3.5.3.	Transmisión resonante.	196
3.6.	Potenciales periodicos unidimensionales	197
3.6.1.	Teorema de Bloch.	197
3.6.2.	Modelo de Kroning-Penney.	199
3.7.	Efecto Aharonov-Bohm.	201
3.7.1.	Partícula en movimiento circular.	202
3.7.2.	Potencial vectorial magnético.	203
3.7.3.	Partícula cargada moviéndose en un campo potencial magnético.	204
3.8.	Problemas	207
4.	El oscilador armónico.	209
4.1.	Resultados aproximados.	209
4.1.1.	Energía de punto cero.	209
4.1.2.	Regla de Cuantización de Bohr-Sommerfeld.	210
4.2.	Los operadores \hat{a} , \hat{a}^\dagger y \hat{n}	211
4.3.	Función de onda del estado fundamental.	218
4.4.	Estados excitados.	219
4.5.	Polinomios de Hermite.	223
4.6.	Función de Green.	225
4.7.	Representación matricial de los operadores.	226

4.8. Evolución clásica	228
4.9. Cuadro de Heisenberg	229
4.9.1. Ecuaciones de movimiento.	229
4.9.2. Interpretación del cuadro de Heisenberg.	231
4.9.3. Descomposición de $\Psi_H(\xi)$ en autoestados del oscilador armónico.	234
4.10. Estados coherentes.	235
4.10.1. Definición.	236
4.10.2. Valores promedios de algunos operadores.	237
4.10.3. Forma explícita para $ \alpha\rangle$	238
4.10.4. Evolución temporal.	240
4.10.5. Comentarios.	241
4.10.6. Ilustración 1: fuerza externa constante.	242
4.10.7. Ilustración 2: láser.	244
4.11. El oscilador armonico en tres dimensiones	245
4.12. Problemas	249
5. Momento angular.	251
5.1. Operadores de rotación en el espacio de Hilbert.	251
5.2. Momento angular orbital.	255
5.3. Invariancia rotacional.	256
5.4. Autovalores y autovectores.	260
5.5. Autofunciones del momento angular orbital.	266
5.5.1. Los operadores de momento angular en la representación de coordenadas.	268
5.6. Los autovectores en la representación de coordenadas.	271
5.6.1. Evaluación de Y_{00}	271
5.6.2. Evaluación de $Y_{\ell\ell}$	272
5.6.3. Evaluación de $Y_{\ell m}$	273
5.6.4. Armonicos esfericos	274
6. Problemas con simetria esferica	277
6.1. El problema de dos cuerpos.	277
6.2. Ecuacion radial de Schrödinger	279
6.2.1. Propiedades Asintóticas de la Ecuación Radial de Schrödinger.	283
6.3. La particula libre	284
6.3.1. Funciones de Bessel esféricas.	284
6.3.2. Función de onda para la partícula libre.	286
6.4. Particula en una caja esferica	287
6.4.1. Inclusión de un carozo.	289
6.5. La funcion hipergeometrica confluyente	290
6.6. Oscilador armónico	292
6.6.1. Operadores de subida y bajada.	296
6.7. El atomo de hidrogeno	300
6.7.1. Degeneración accidental del átomo de hidrógeno.	304

Capítulo 0

La crisis de la física clásica.

versión 8 mayo 2007

En este primer capítulo mencionaremos 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 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 forzados, conocidos hoy en día con el nombre de *Mecánica Cuántica antigua*. En el presente capítulo analizaremos algunos de estos problemas.

0.1. 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*¹.

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

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

0.1.1. Teoría clásica de Rayleigh-Jeans.

Consideremos una caja de paredes metálicas y de tamaño L_x, L_y, L_z (ver figura 1).

¿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

¹Se denota cuerpo negro a 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.

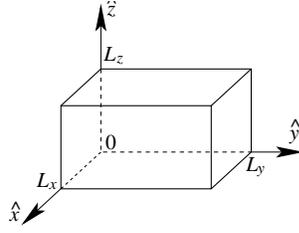


Figura 1: Caja metálica usada para analizar la radiación del cuerpo negro.

de la cavidad el campo eléctrico satisface la ecuación de ondas libres

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

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

$$\sin(k_z L_z) = 0 .$$

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

$$k_i = \frac{n_i \pi}{L_i} \quad , \quad n_i \in \mathbb{N}^* . \quad (1)$$

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 ω 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) 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”

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

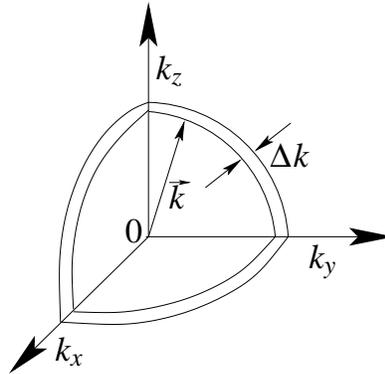


Figura 2: Cascarón esférico en el espacio k .

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 2 y dividirlo por el volumen que ocupa cada modo. En la figura 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

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

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 (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 ω

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

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

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

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 ω . 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

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

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 (3) no puede ser correcta. Esto se observa con mayor claridad en la figura 3, donde se grafica la densidad de energía en función de la frecuencia ω . Para pequeños valores de ω el resultado de la teoría de Rayleigh-Jeans concuerda bastante bien con los datos experimentales. Para valores grandes de ω la teoría está en completo desacuerdo con los datos experimentales: Rayleigh-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*”.

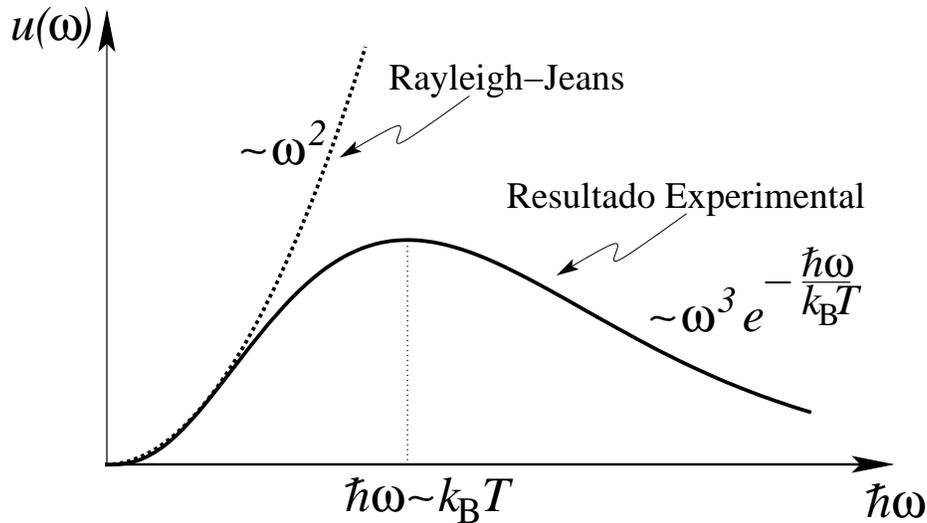


Figura 3: Densidad de energía en función de la frecuencia. La línea sólida corresponde al resultado experimental mientras que la línea cortada corresponde al resultado de la teoría de Rayleigh-Jeans.

0.1.2. Teoría de Planck.

Para evitar la aparición de la divergencia ultravioleta es necesario lograr que la energía promedio \bar{E}_ω de un modo con frecuencia ω , 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 ω 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}_ω , en (17) hay que usar sumatorias, en lugar de las integrales. Luego:

$$\begin{aligned} \bar{E}_\omega &= \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n\hbar\omega e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n\hbar\omega}{k_B T}}} = -\hbar\omega \frac{d}{dx} \left[\log \sum_{n=0}^{\infty} e^{-nx} \right]_{x=\frac{\hbar\omega}{k_B T}} \\ &= \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{k_B T}} - 1} \begin{cases} k_B T & \text{si } \frac{\hbar\omega}{k_B T} \ll 1, \text{ Rayleigh-Jeans} \\ \hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{k_B T}} & \text{si } \frac{\hbar\omega}{k_B T} \gg 1, \text{ Ley empírica de Wien} \end{cases} \end{aligned} \quad (4)$$

Ésta es la distribución de Planck.

Usando (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:

$$\hbar = 1,0545887 \times 10^{-27} \text{ [erg}\cdot\text{s]}$$

0.2. 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 traspassa 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 ampolleta de $1 \text{ [W]} = 10^7 \text{ [erg/s]}$ situada a 1 [m] de distancia.

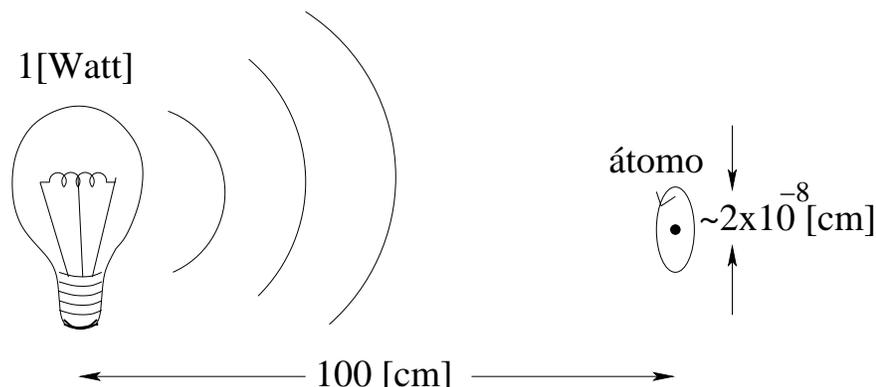


Figura 4: Átomo absorbiendo energía.

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 ω 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 ω 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 ϕ 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

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

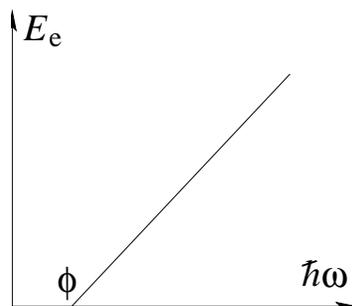


Figura 5: Energía de los electrones emitidos en función de la frecuencia.

Este comportamiento lineal de E_e con ω (ver figura 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 éstos 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).

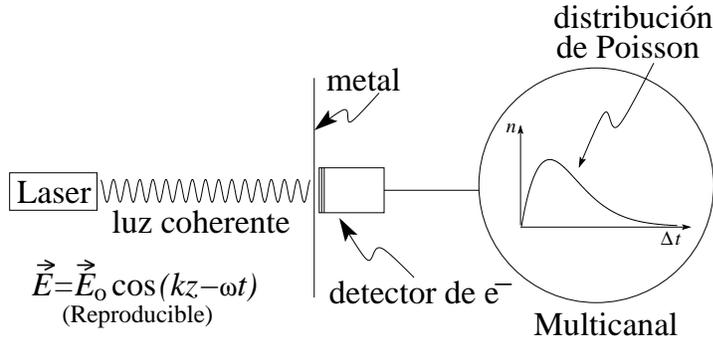


Figura 6: Distribución temporal de electrones.

0.3. 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 ω sólo puede tener una energía que es un múltiplo entero de $\hbar\omega$. De acuerdo con la

ecuación (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.

0.4. Los rayos X y el efecto Compton.

En 1865 Röntgen 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, quienes 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 ω 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:

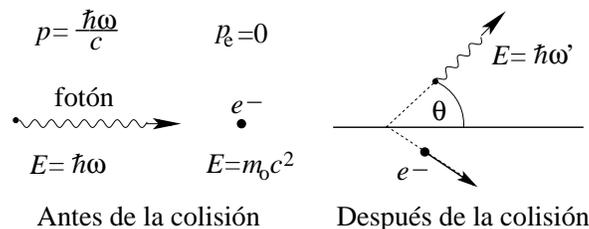


Figura 7: Colisión fotón-electrón.

Sea v la velocidad del centro de masas. Realizando una transformación de Lorentz desde el sistema del laboratorio al sistema del centro de masas se obtiene para la energía del fotón

antes y después de la colisión el resultado

$$\hbar\bar{\omega} = \frac{\hbar\omega \left(1 - \frac{v}{c}\right)}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}, \quad \hbar\bar{\omega}' = \frac{\hbar\omega' \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta\right)}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}. \quad (5)$$

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

$$\hbar\bar{\omega} = \hbar\bar{\omega}', \quad (6)$$

luego, reemplazando (5) en (6) se obtiene

$$\omega \left(-\frac{v}{c}\right) = \omega' \left(1 - \frac{v}{c} \cos \theta\right). \quad (7)$$

De (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 1-1). Demuestre que la velocidad del centro de masas v viene dada por

$$\frac{c}{v} = 1 + \frac{m_0 c^2}{\hbar\omega}. \quad (8)$$

Usando la ecuación (8), $\Delta\lambda$ se puede reescribir de la forma

$$\Delta\lambda = \lambda_c (1 - \cos \theta), \quad (9)$$

donde λ_c es una constante, denominada longitud de onda de Compton para el electrón,

$$\lambda_c = \frac{2\pi\hbar}{m_0 c^2} = 0,02426 [\text{\AA}].$$

La ecuación (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 1-2) Demuestre la ecuación (9) usando directamente la conservación de la energía y el momento lineal.

0.5. 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

$$p = \frac{\hbar\omega}{c} = \hbar k = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} , \quad (10)$$

donde

$$\begin{aligned} k &= \text{vector de onda} = k = \omega/c \\ \nu &= \text{frecuencia} = \omega/(2\pi) \\ \lambda &= \text{longitud de onda} = c/\nu \\ h &= 2\pi\hbar . \end{aligned}$$

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

$$\lambda = \frac{h}{p} , \quad (11)$$

en concordancia con la ecuación (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 observan efectos de difracción.

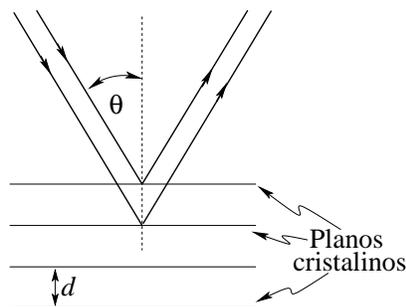


Figura 8: Experimento de Thomson, Davisson y Germer.

En la Fig. 8, 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 (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)).

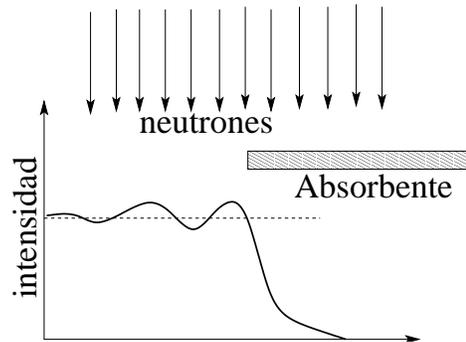


Figura 9: Difracción de Fresnel de neutrones.

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.

0.6. 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

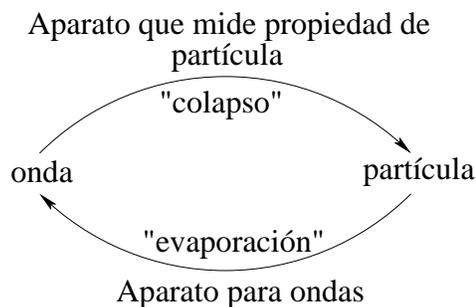


Figura 10: Diagrama de complementariedad.

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.

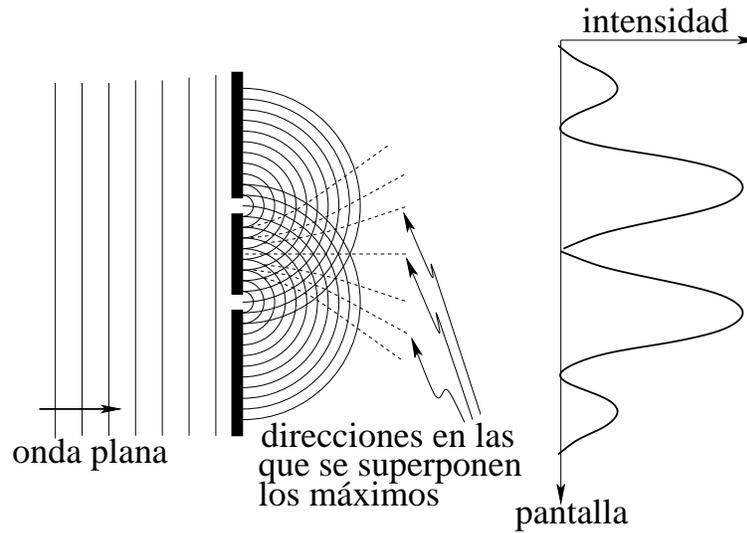


Figura 11: Experimento de interferencia.

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

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

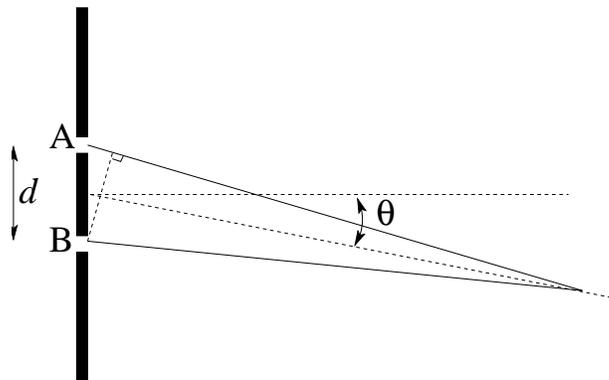


Figura 12: Geometría del experimento de interferencia.

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.

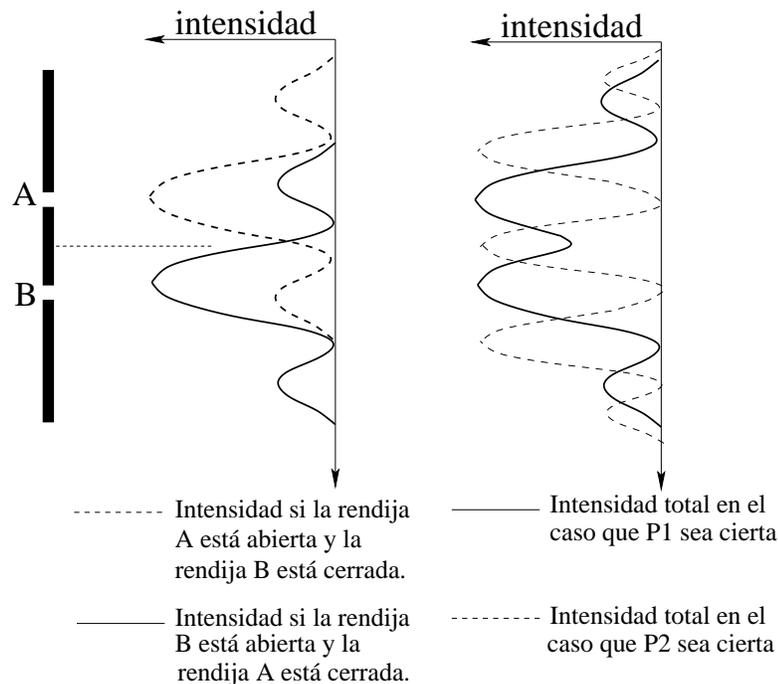


Figura 13: Experimento de dos fotones.

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 $P1$. Éste 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 términos de concepciones 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 sí”.

0.7. Principio de correspondencia.

En la óptica física, al considerar ondas electromagnéticas de longitud de onda λ 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 (11)

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (11)$$

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

Podemos entonces enunciar el *Principio de correspondencia* en la siguiente forma:

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 σ 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 una 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.

0.8. 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

$$\frac{dW}{dr} = \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^3} a^2 \quad (12)$$

(ver "Classical Electrodynamics", Jackson, ec. 14.22), donde a es la aceleración.

La fuerza centrífuga y la fuerza Coulombiana atractiva vienen dadas por

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

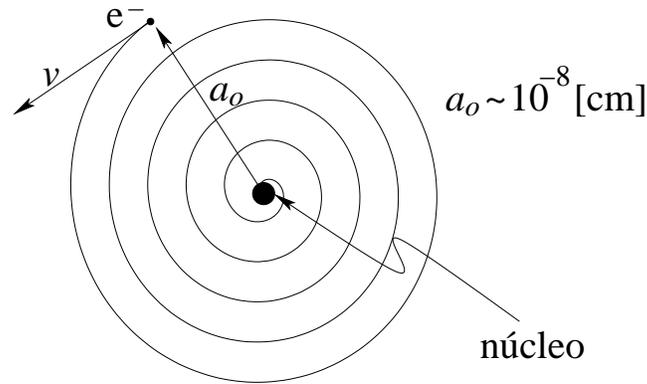


Figura 14: Electrón precipitándose al núcleo.

Al imponer

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

se concluye

$$mv^2 = \frac{e^2}{r} . \quad (13)$$

La aceleración a viene dada por

$$a = \frac{v^2}{r} . \quad (14)$$

De (12), (13) y (14) se concluye que

$$\frac{dW}{dt} = \frac{2e^6}{3c^3m^2r^4} \quad (\text{Potencia irradiada}). \quad (15)$$

Por otra parte, la energía del sistema es

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{e^2}{r} = -\frac{e^2}{2r} = -\frac{1}{2}mv^2 , \quad (16)$$

luego

$$\frac{dE}{dt} = \frac{e^2}{2r^2} \cdot \frac{dr}{dt} \quad (\text{Variación de la energía del sistema}) . \quad (17)$$

Como, por conservación de energía,

$$\frac{dW}{dt} + \frac{dE}{dt} = 0 , \quad (18)$$

se obtiene, sustituyendo (15) y (17) en (18) que

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

Finalmente, integrando, el tiempo de “decaimiento” resulta ser

$$\int_{t(r=a_0)}^{t(r=0)} dt = \frac{1}{4} \frac{c^3m^2}{e^4} r^3 \Big|_{r=a_0}^{r=0} = \frac{c^3m^2a_0^3}{4e^4} \sim 10^{-5} \text{ [s]} .$$

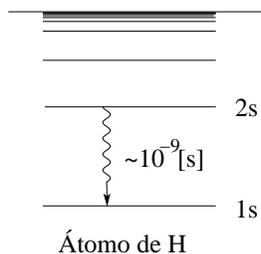


Figura 15: Vida media del primer estado excitado del hidrógeno.

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 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

$$\hbar\omega = E_n - E_{n-1} = \frac{E_n - E_{n-1}}{n - (n-1)} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \frac{dE(n)}{dn} = \hbar\bar{\omega},$$

con

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

Usando (13) esta ecuación se puede escribir de la forma

$$\bar{\omega} = \frac{mv^3}{e^2}. \quad (19)$$

Se tiene

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

donde la primera igualdad corresponde al principio de correspondencia, la segunda igualdad a la ecuación (19) y la última a la ecuación (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

$$E_n = - \left(\frac{e^4 m}{2\hbar^2} \right) \frac{1}{n^2} = - \frac{R}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots , \quad (20)$$

donde R , la constante de Rydberg es

$$R \equiv \frac{e^4 m}{2\hbar^2} = \frac{e^2}{2a_0} \approx 13,6 \text{ [eV]} . \quad (21)$$

En (21) a_0 es el radio de Bohr y viene dado por

$$a_0 \equiv \frac{\hbar^2}{m} \approx 0,53 \times 10^{-8} \text{ [cm]} .$$

Los radios de las distintas órbitas de Bohr vienen dados por

$$r_n = - \frac{e^2}{2E_n} = a_0 n^2 .$$

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

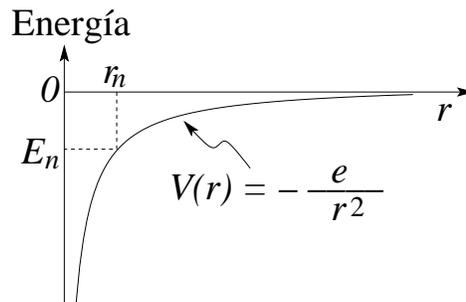


Figura 16: Radio clásico de una órbita de Bohr.

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:

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

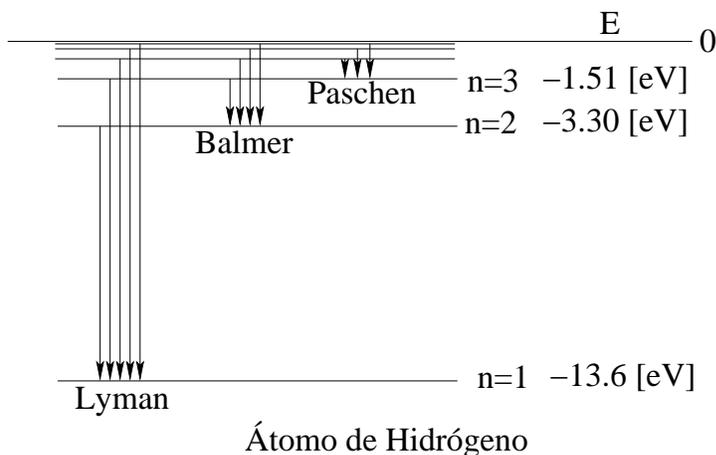


Figura 17: Átomo de hidrógeno, transiciones entre niveles.

o sea, obtenemos el siguiente sorprendente resultado:

$$L_n = n\hbar \quad (\text{Cuantización del momento angular}). \quad (22)$$

En lugar de la hipótesis iii, también se podría haber postulado (22) para encontrar la ecuación (20) para la energía de los estados excitados del átomo de hidrógeno.

Hacemos notar que el resultado (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 (11) se obtiene

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

o sea

$$n = \frac{2\pi r}{\lambda} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (23)$$

Es decir, la longitud de onda de De Broglie asociada al electrón 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”.

0.9. La regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld.

El razonamiento que nos llevó a la ecuación (23) lo podemos generalizar para cualquier movimiento periódico.

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

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

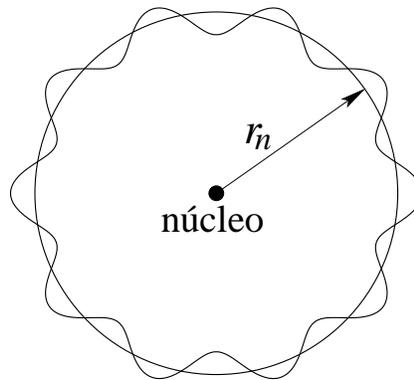


Figura 18: Órbita electrónica como onda estacionaria.

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 (11) se obtiene la así llamada *regla de cuantificación de Bohr-Sommerfeld*:

$$\boxed{\oint p(q) dq = nh} \quad (24)$$

Poniendo

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

la ecuación (24) queda de la forma

$$\oint p(q) dq = \oint mv^2 dt = 2 \oint T dt \equiv 2\tau \langle T \rangle = nh, \quad (25)$$

donde $\langle \dots \rangle$ representa al promedio temporal, $T = \frac{1}{2}mv^2$ es la energía cinética y τ 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:

$$\langle T \rangle = \frac{S}{S+2} E, \quad (26)$$

donde E es la energía total.

A partir de (24), (25) y (26) se deduce que

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

o sea

$$E_n = h\nu_{E_n} \left(\frac{S+2}{2S} \right)^n . \quad (27)$$

En (27) ν_{E_n} es la frecuencia de la oscilación que está relacionada con el período por la ecuación

$$\nu_{E_0} = \frac{1}{\tau} .$$

Apliquemos estas últimas relaciones a algunos casos particulares:

1. Oscilador armónico.

El potencial para el oscilador armónico es

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

es decir en este caso $S = 2$. La frecuencia del oscilador armónico es independiente de la energía. Usando (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 está 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 $\hbar\omega/2$.

2. Partícula en una caja.

Consideremos el potencial

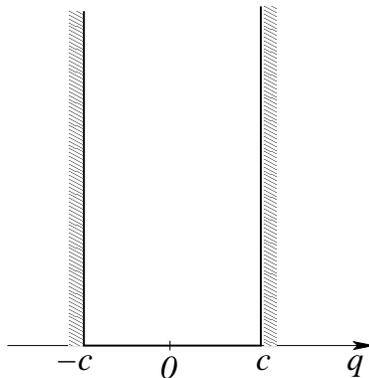


Figura 19: Potencial de pozo.

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

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

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

$$\tau = \frac{1}{\nu_E} = \frac{4c}{v} = 4c\sqrt{\frac{m}{2E}}. \quad (28)$$

Usando (27) con $S \rightarrow +\infty$ y sustituyendo (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 (26) con $S = -1$ se obtiene que

$$\langle T \rangle = -E. \quad (29)$$

Consideremos las partes radial y angular separadamente:

$$\langle T \rangle = \langle T_r \rangle + \langle T_\theta \rangle. \quad (30)$$

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

$$\langle T_\theta \rangle = \frac{1}{2}m\langle (r\dot{\theta})^2 \rangle = \frac{L\langle \dot{\theta} \rangle}{2}, \quad (31)$$

mientras que $\langle T_r \rangle$ se obtiene usando (25) para la parte radial:

$$\langle T_r \rangle = \frac{nh}{2\tau} = \frac{h\nu_E n}{2}. \quad (32)$$

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

$$L = \ell\hbar, \quad \ell = 0, 1, \dots. \quad (33)$$

También se tiene que

$$\langle \dot{\theta} \rangle = \omega_E = 2\pi\nu_E, \quad (34)$$

luego a partir de (31), (33) y (34) se obtiene

$$\langle T_\theta \rangle = \frac{\hbar \ell 2\pi \nu_E}{2} = \frac{h \ell \nu_E}{2}. \quad (35)$$

De las ecuaciones (29), (30), (32) y (35) resulta

$$E_N = -\frac{h\nu_E}{2}(n + \ell) = -\frac{h\nu_E}{2}N, \quad (36)$$

donde

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

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

$$\tau^2 = \frac{1}{\nu_E^2} = \frac{m^2 \pi^2}{2Ze^2} R^3, \quad (37)$$

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 relacionados por

$$E = -\frac{Ze^2}{R}, \quad (38)$$

luego, de (36), usando (37) y (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	ℓ	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)].

0.10. 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, ésta 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 θ dado por

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

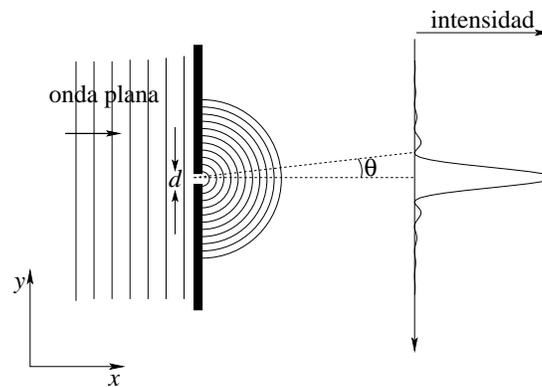


Figura 20: Experimento de difracción.

El hecho de 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 Δy en la determinación de y es

$$\Delta y = \frac{d}{2} . \quad (39)$$

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.*

$$\Delta p_y \approx p \text{sen } \theta . \quad (40)$$

De (39) y (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

$$\boxed{\Delta y \Delta p_y \geq \frac{\hbar}{2}} \quad (41)$$

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 (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

$$\Delta x \sim a_0 \sim 0,5 \times 10^{-8} \text{ [cm]} ,$$

luego

$$\begin{aligned} \Delta v &= \frac{\Delta p}{m_e} = \mathcal{O} \left(\frac{\hbar}{\Delta x} \frac{1}{m_e} \right) = \mathcal{O} \left(\frac{\hbar}{a_0 m_e} \right) \\ &= \mathcal{O} \left(\frac{e^2}{\hbar} \right) = \mathcal{O} \left(\frac{e^2}{\hbar c} \right) \sim 2000 \left[\frac{\text{km}}{\text{s}} \right] , \end{aligned}$$

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 (Fig. 21).

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 Δx , 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

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

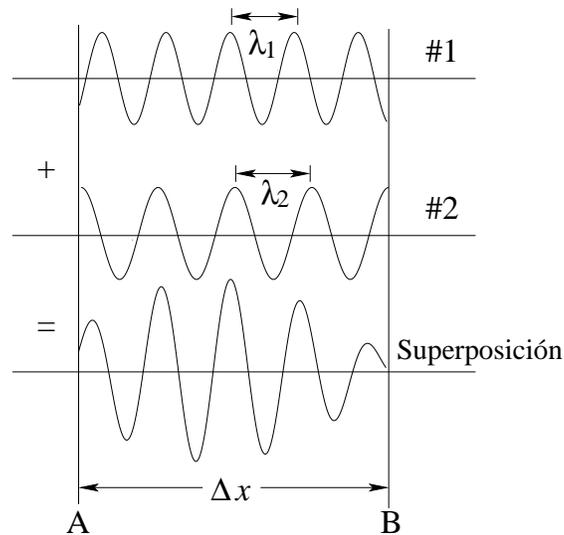


Figura 21: Superposición de ondas.

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 (Fig. 22). Para este paquete se tiene que $\Delta x \Delta p_x \sim \hbar$. Por otra parte

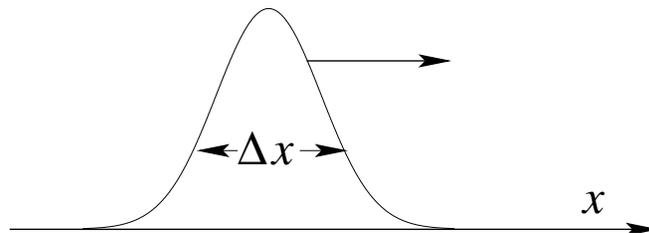


Figura 22: Paquete de ondas.

$$E = \frac{p_0^2}{2m},$$

o sea

$$\Delta E = \frac{p_x \Delta p_x}{m} = v_x \Delta p_x. \quad (42)$$

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

$$\Delta t = \frac{\Delta x}{v_x}. \quad (43)$$

De (42) y (43) se obtiene

$$\Delta E \Delta t = \Delta x \Delta p_x \sim \hbar . \quad (44)$$

Otra circunstancia en que interviene la relación (44) es en el decaimiento de estados cuasiestacionarios.

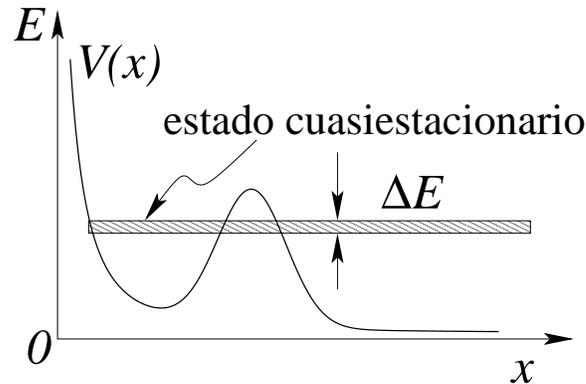


Figura 23: Estados cuasiestacionarios.

Tanto más demora el sistema en decaer tanto menor es ΔE . 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 τ en el pozo y el período del sistema en el pozo es T , entonces lo único que debe satisfacerse es que al cabo del tiempo τ/T , la onda no se desincronice en más de $\tau/2$. Luego, tanto mayor es τ , tanto menor es la desincronización de la onda dentro del pozo.

0.11. Problemas.

0-1) En la colisión de Compton, demuestre que la velocidad del centro de masa v viene dada por

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

0-2) Colisión de Compton, demuestre la ecuación (9)

$$\Delta\lambda = \lambda_c(1 - \cos\theta), \quad (9)$$

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

0-3) Muestre que en un scattering de Compton, producto del cual, respecto a la dirección de incidencia del fotón, el electrón es dispersado en un ángulo ϕ y el fotón en un ángulo θ , la relación entre estos ángulos viene dada por:

$$\cot\phi = \left(1 + \frac{h\nu}{m_e c^2}\right) \tan(\theta/2).$$

Capítulo 1

Introducción matemática.

versión 5 junio 2007

En el capítulo anterior revisamos ciertos hechos experimentales y teóricos básicos que condujeron a la conclusión de que era necesario reformular la Mecánica en el dominio de los fenómenos microscópicos. Asimismo, se introdujo, de una manera heurística, una teoría que permitía describir dichos hechos experimentales, pero en realidad aún necesitamos desarrollar un formalismo matemáticamente satisfactorio. Por razones que serán evidentes más adelante, dicha teoría matemática se establecerá en términos de espacios vectoriales. En este capítulo, se recopilarán, entonces, algunos resultados matemáticos —sobre todo del álgebra lineal— que serán de mucha utilidad para el desarrollo del formalismo. Muchos resultados no serán demostrados, suponiéndose que el lector ya los conoce de los cursos de matemáticas.

1.1. 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:

1) 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:

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

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

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) $1 \cdot |x\rangle = |x\rangle$.
- b) $\alpha \cdot (\beta \cdot |x\rangle) = (\alpha\beta) \cdot |x\rangle$, $\beta \in \mathbb{C}$ (Ley asociativa).
- 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.

1.2. Operadores lineales.

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

- I) $\tilde{\mathbf{A}}|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, $\forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$,
- II) $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$ y $|x\rangle, |y\rangle \in \mathcal{H}$, $\tilde{\mathbf{A}}(\alpha|x\rangle + \beta|y\rangle) = \alpha\tilde{\mathbf{A}}|x\rangle + \beta\tilde{\mathbf{A}}|y\rangle$.

1.3. 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 $\mathcal{H}^\dagger \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$, un *producto interno* entre los elementos de \mathcal{H} y \mathcal{H}^\dagger por:

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

La aplicación $\mathcal{H}^\dagger \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{C}$ debe cumplir 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 $|x\rangle = |0\rangle$.

1.4. 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

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

1.5. Espacios vectoriales de dimensión continua.

La 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 ∞ . 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 δ 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.

1.6. La δ de Dirac.

La δ 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 δ 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 $x = x_0$. Entonces algunas propiedades de la δ de Dirac son:

I) $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) f(x) dx = f(x_0)$.

II) $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta'(x - x_0) f(x) dx = -f'(x_0)$.

III) $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(n)}(x - x_0) f(x) dx = (-1)^n f^{(n)}(x_0)$.

IV) $\delta(x) = \delta(-x) = \delta^*(x)$, o sea, la δ 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: $x \delta(x) = 0$.

VIII) $\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|}$.

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

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

XI) $\delta'(x) = -\delta'(-x)$. La derivada de la δ 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 δ 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 $r = 0$.

1.7. 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, y lo último ocurre sólo si $|x\rangle = |0\rangle$.

1.8. 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 $|m_1\rangle$:

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

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 $|\bar{m}_1\rangle$. Es fácil mostrar que el vector

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\check{\mathbf{A}} = \sum_{\ell j} A_{\ell j}|m_{\ell}\rangle\langle m_j|. \quad (1.1)$$

En efecto,

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

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 δ de Dirac.

1.10. El operador identidad.

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

$$|\psi\rangle = \sum_k \psi_k|m_k\rangle. \quad (1.2)$$

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,

$$\psi_{\ell} = \langle m_{\ell}|\psi\rangle. \quad (1.3)$$

El resultado anterior nos dice simplemente que los coeficientes de la expansión de un vector en una base se obtienen como el producto interno entre el vector y cada elemento de la base.

Reemplazando (1.3) en (1.2), se obtiene

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

Esto nos permite identificar

$$\boxed{\sum_k |m_k\rangle\langle m_k| = \check{\mathbf{1}} \quad \text{Operador identidad.}} \quad (1.4)$$

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 en la forma

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

1.11. Operadores unitarios.

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

$$\langle \psi | \phi \rangle = \langle \bar{\psi} | \bar{\phi} \rangle, \quad (1.5)$$

donde,

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

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

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

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

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

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

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

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

y finalmente,

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

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

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

$$\begin{aligned}\check{\mathbf{A}}|\psi\rangle &= \check{\mathbf{1}} \cdot \check{\mathbf{A}} \cdot \check{\mathbf{1}}|\psi\rangle = \check{\mathbf{1}} \cdot \check{\mathbf{A}} \sum_{\ell} |m_{\ell}\rangle \langle m_{\ell} | \psi \rangle \\ &= \sum_{k\ell} |m_k\rangle \langle m_k | \check{\mathbf{A}} | m_{\ell} \rangle \psi_{\ell} = \sum_{k\ell} |m_k\rangle A_{k\ell} \psi_{\ell} \\ &= \sum_k |m_k\rangle \left(\sum_{\ell} A_{k\ell} \psi_{\ell} \right).\end{aligned}$$

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

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

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:

$$\text{I) } (\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}})^{\dagger} = \check{\mathbf{B}}^{\dagger}\check{\mathbf{A}}^{\dagger}.$$

$$\text{II) } (\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}}\check{\mathbf{C}})^{\dagger} = \check{\mathbf{C}}^{\dagger}\check{\mathbf{B}}^{\dagger}\check{\mathbf{A}}^{\dagger}.$$

Definición 1.1 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 $\check{\mathbf{U}}$ y una base ortonormal $\{|m_i\rangle\}$. Denotemos por $|\bar{m}_i\rangle$ a los vectores que resultan al operar con el operador $\check{\mathbf{U}}$ sobre los vectores de la base, es decir, $|\bar{m}_i\rangle \equiv \check{\mathbf{U}}|m_i\rangle$. Se tiene, usando (1.5),

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

luego,

$$\langle m_i | \check{\mathbf{U}}^\dagger \check{\mathbf{U}} | m_j \rangle = \delta_{ij} . \quad (1.6)$$

Por otra parte se tiene

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{1}} &= \sum_i |m_i\rangle\langle m_i| = \sum_{ij} |m_i\rangle\langle m_i|m_j\rangle\langle m_j| \\ &= \sum_{ij} \delta_{ij} |m_i\rangle\langle m_j| . \end{aligned} \quad (1.7)$$

Reemplazando (1.6) en (1.7), se obtiene

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

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

$$\check{\mathbf{U}}^{-1} = \check{\mathbf{U}}^\dagger . \quad (1.8)$$

Recíprocamente, si un operador satisface la relación (1.8), entonces $\check{\mathbf{U}}$ es unitario. En efecto, sea $|\bar{\psi}\rangle = \check{\mathbf{U}}|\psi\rangle$ y $|\bar{\phi}\rangle = \check{\mathbf{U}}|\phi\rangle$, entonces

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

1.12. 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

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

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,

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

lo que nos permite identificar

$$({}^t A)_{kl} = \sum_{ij} \langle t_k|m_i\rangle ({}^m A)_{ij} \langle m_j|t_l\rangle . \quad (1.9)$$

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

$$\check{\mathbf{U}} = \check{\mathbf{1}}\check{\mathbf{U}} = \sum_{jk} |m_j\rangle\langle m_j|t_k\rangle\langle m_k| = (\check{\mathbf{U}} \text{ en la base } \{|m_k\rangle\}) ,$$

$$\check{\mathbf{U}} = \check{\mathbf{U}}\check{\mathbf{1}} = \sum_{k\ell} |t_k\rangle\langle m_k|t_\ell\rangle\langle t_\ell| = (\check{\mathbf{U}} \text{ en la base } \{|t_\ell\rangle\}) .$$

$$\check{\mathbf{U}}^{-1} = \check{\mathbf{1}}\check{\mathbf{U}}^{-1} = \sum_{jk} |t_j\rangle\langle t_j|m_k\rangle\langle t_k|$$

$$\check{\mathbf{U}}^{-1} = \check{\mathbf{U}}^{-1}\check{\mathbf{1}} = \sum_{jk} |m_j\rangle\langle t_j|m_k\rangle\langle m_k| .$$

De las relaciones anteriores se deduce que

$$({}^m U)_{jk} = \langle m_j | t_k \rangle = ({}^t U)_{jk} = U_{jk} , \quad (1.10)$$

y

$$({}^m U^{-1})_{jk} = \langle t_j | m_k \rangle = ({}^t U^{-1})_{jk} = U_{jk}^{-1} = U_{kj}^* , \quad (1.11)$$

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

Al reemplazar las ecuaciones (1.10) y (1.11) en (1.9) se obtiene

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

recuperando así un resultado conocido del Álgebra Lineal.

1.13. 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. Sin pérdida de generalidad, los vectores base pueden ser considerados como la base canónica, en cuyo caso podemos escribirlos como vectores columna:

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \dots, |N\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} .$$

¿Cómo escribimos ahora la base del espacio dual, $\{\langle 1|, \langle 2|, \dots, \langle N|\}$? Puesto que $(\langle 1|)(|1\rangle) = \langle 1|1\rangle = 1$, es inmediato que lo que corresponde es asociar a $\langle 1|$ un vector *fila*:

$$\langle 1| = (1 \ 0 \ \dots \ 0) .$$

De este modo, usando las reglas usuales de multiplicación de matrices,

$$\langle 1|1\rangle = (\langle 1|)(|1\rangle) = (1 \ 0 \ \dots \ 0) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \cdot 1 + 0 \cdot 0 + \dots + 0 \cdot 0 = 1 .$$

Ahora es inmediato notar que un vector arbitrario $|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |i\rangle$ se escribe, en la notación usual,

$$|\psi\rangle = \alpha_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \alpha_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \dots + \alpha_N \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_N \end{pmatrix} ,$$

y su dual $\langle \psi | = \sum_i \alpha_i^* \langle i |$ en la forma

$$\langle \psi | = (\alpha_1^* \quad \alpha_2^* \quad \cdots \quad \alpha_N^*) .$$

Y el producto interno entre un vector $|\psi\rangle = \sum_i \alpha_i |i\rangle$ y un vector dual $\langle \phi | = \sum_i \beta_i^* \langle i |$:

$$\langle \phi | \psi \rangle = (\beta_1^* \quad \beta_2^* \quad \cdots \quad \beta_N^*) \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_N \end{pmatrix} = \sum_i \beta_i^* \alpha_i ,$$

lo cual es consistente tanto con nuestros resultados anteriores como con la notación usual de matrices.

Ya hemos visto vectores ($|\psi\rangle$), vectores duales ($\langle \phi |$), y el producto interno ($\langle \phi | \psi \rangle$). Sólo nos faltan los objetos de la forma $|\psi\rangle\langle \phi |$. Como ya hemos visto, estos objetos corresponden a operadores. Ahora podemos reencontrar ese resultado con la notación convencional. Consideremos, por ejemplo, $|1\rangle\langle 2 |$. Escribiendo $|1\rangle$ como vector fila, y $\langle 2 |$ como vector columna, y usando las reglas usuales de multiplicación de matrices,

$$|1\rangle\langle 2 | = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} (0 \quad 1 \quad \cdots \quad 0) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} ,$$

lo cual es evidentemente una matriz, es decir, un operador. Es claro que, en general $|i\rangle\langle j |$ será una matriz donde todos los elementos son nulos, excepto $a_{ij} = 1$.

Consideremos ahora un operador general $\check{\mathbf{A}}$. Como ya hemos visto, $\check{\mathbf{A}}$ se puede expresar de la forma

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

Usando el resultado anterior,

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{A}} &= a_{11}|1\rangle\langle 1 | + a_{12}|1\rangle\langle 2 | + \cdots + a_{NN}|N\rangle\langle N | \\ &= a_{11} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} + a_{12} \begin{pmatrix} 0 & 1 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} + \cdots + a_{NN} \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & a_{NN} \end{pmatrix} . \end{aligned}$$

Así, los coeficientes a_{ij} forman una matriz cuadrada, que es la matriz de $\check{\mathbf{A}}$ en la base $\{|i\rangle\}_i$.

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

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

Consideremos ahora el producto de operadores. En la notación matricial, éste debería escribirse simplemente como el producto de las matrices asociadas a cada operador. Reobtenemos ese resultado con la notación de Dirac. 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:

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

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 $\check{\mathbf{B}}$, como esperábamos.

1.14. Autovalores de un operador.

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

$$\check{\mathbf{A}}|x\rangle = \lambda|x\rangle. \quad (1.12)$$

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

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} & \dots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & & & A_{2n} \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ A_{n1} & & & \dots & A_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} .$$

De acá se deduce la ecuación para λ :

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

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

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

En los complejos \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

$$\begin{aligned} \det(\check{\mathbf{A}} - x\check{\mathbf{I}}) &= \begin{vmatrix} \lambda_1 - x & 0 & 0 & & 0 \\ 0 & \lambda_2 - x & 0 & & \\ 0 & 0 & \lambda_3 - x & & \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ & & & & \lambda_n - x \end{vmatrix} \\ &= (\lambda_1 - x)(\lambda_2 - x) \cdots (\lambda_n - x) \\ &= P(x) , \end{aligned}$$

donde $P(x)$ es un polinomio de grado n . Las raíces de $P(x)$ 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:

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

o sea,

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

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:

$$|\lambda_1\rangle = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}.$$

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

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

no es diagonalizable. Demuestre como ejercicio (Problema 2-2) 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 $\check{\mathbf{M}}$.

Ejercicio: (Problema 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.

1.15. El caso de operadores autohermíticos.

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

Proposición 1.1 Los autovalores de $\check{\mathbf{A}}$ son reales.

Demostración Tomemos el dual de la relación (1.12):

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

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

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

q.e.d.

Proposición 1.2 Si λ_i y λ_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

$$\langle a_i | \check{\mathbf{A}} | a_j \rangle = \langle a_i | \lambda_j | a_j \rangle = \lambda_j \langle a_i | a_j \rangle \quad (1.13)$$

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

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

$$\langle a_i | \check{\mathbf{A}} | a_j \rangle = \lambda_i \langle a_i | a_j \rangle . \quad (1.14)$$

Restando (1.14) de (1.13) se obtiene

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

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

$$\langle a_i | a_j \rangle = 0 . \quad (1.15)$$

q.e.d.

Proposición 1.3 Los autovectores de $\check{\mathbf{A}}$ forman una base completa de \mathcal{H} .

Demostración Sea \mathcal{H}_1 el espacio generado 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 generado 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 λ_1 . Mediante el método de Gram-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 Gram-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! ya que supusimos que todos los autovectores están en \mathcal{H}_1 . Luego la hipótesis inicial, 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,

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

q.e.d.

Resumen:

La base formada por los 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.

1.16. Conmutadores.

Definición 1.2 El conmutador $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]$ de dos operadores $\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}$ viene definido por

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

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

Teorema 1.1 Sean $\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}$ dos operadores autohermíticos, entonces $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] = \check{\mathbf{0}}$ si y sólo si 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

1) 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

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

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.

1.16.1. 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

$$[\check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{A}}^n] = n\check{\mathbf{A}}^{n-1}[\check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{A}}]. \quad (1.16)$$

- 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 1.4

$$e^{\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}}} e^{-\check{\mathbf{A}}} = \check{\mathbf{B}} + [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] + \frac{1}{2!} [\check{\mathbf{A}}, [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]] + \frac{1}{3!} [\check{\mathbf{A}}, [\check{\mathbf{A}}, [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]]] + \dots . \quad (1.17)$$

Demostración Consideremos el operador

$$\check{\mathbf{f}}(\lambda) = e^{\lambda\check{\mathbf{A}}}\check{\mathbf{B}}e^{-\lambda\check{\mathbf{A}}} . \quad (1.18)$$

Expandimos tal operador en serie de Taylor

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

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

$$\frac{\partial \check{\mathbf{f}}}{\partial \lambda} = e^{\lambda \check{\mathbf{A}}} (\check{\mathbf{A}} \check{\mathbf{B}} - \check{\mathbf{B}} \check{\mathbf{A}}) e^{-\lambda \check{\mathbf{A}}} = e^{\lambda \check{\mathbf{A}}} [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] e^{-\lambda \check{\mathbf{A}}} . \quad (1.19)$$

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 (1.18) y (1.19) 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

$$\frac{d \check{\mathbf{f}}}{dx} = ((\check{\mathbf{A}} + \check{\mathbf{B}}) + [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] x) \check{\mathbf{f}}(x) . \quad (1.20)$$

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 (1.20) viene, por lo tanto, dada por

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

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

$$e^{\check{\mathbf{A}}x} e^{\check{\mathbf{B}}x} = e^{(\check{\mathbf{A}}+\check{\mathbf{B}})x+\frac{1}{2}x^2[\check{\mathbf{A}},\check{\mathbf{B}}]} . \quad (1.21)$$

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

Proposición 1.5 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 1.6 Si $\check{\mathbf{A}}$ y $\check{\mathbf{B}}$ conmutan con $[\check{\mathbf{A}},\check{\mathbf{B}}]$ entonces:

$$e^{\check{\mathbf{A}}} e^{\check{\mathbf{B}}} = e^{\check{\mathbf{A}}+\check{\mathbf{B}}+\frac{1}{2}[\check{\mathbf{A}},\check{\mathbf{B}}]} = e^{\check{\mathbf{A}}+\check{\mathbf{B}}} e^{\frac{1}{2}[\check{\mathbf{A}},\check{\mathbf{B}}]} = e^{\check{\mathbf{B}}} e^{\check{\mathbf{A}}} e^{\frac{1}{2}[\check{\mathbf{A}},\check{\mathbf{B}}]} . \quad (1.22)$$

Demostración Problema 2-5.

1.17. Valor esperado y varianza.

Definición 1.3 El valor esperado de un operador $\check{\mathbf{A}}$ para un vector $|\psi\rangle$ normalizado está dado por

$$\langle \check{\mathbf{A}} \rangle_{\psi} = \langle \psi | \check{\mathbf{A}} | \psi \rangle . \quad (1.23)$$

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

Mostremos que el valor esperado de un operador hermítico es real. Sean $\check{\mathbf{A}}$ 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,

$$\langle \check{\mathbf{A}} \rangle_{\psi} = \sum_j a_j |\langle a_j | \psi \rangle|^2 \in \mathbb{R} . \quad (1.24)$$

De (1.24) también se sigue que el valor esperado se puede interpretar como un promedio ponderado de todos los valores posibles de a_j , donde a cada a_j se le asigna un peso $|\langle a_j | \psi \rangle|^2$.

Definición 1.4 La varianza $\langle (\Delta A)^2 \rangle_{\psi}$ de un operador $\check{\mathbf{A}}$ para un vector $|\psi\rangle$ viene dada por

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle_{\psi} \equiv \langle \check{\mathbf{A}}^2 \rangle_{\psi} - \langle \check{\mathbf{A}} \rangle_{\psi}^2 . \quad (1.25)$$

Mostraremos que la varianza de un operador autohermítico es siempre mayor o igual a cero. 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 (1.25), se obtiene

$$\langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle (\check{\mathbf{A}} - \langle \check{\mathbf{A}} \rangle)^2 \rangle \geq 0 .$$

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

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

1.18. Desigualdad de Schwartz.

Teorema 1.2 Sean $|\psi\rangle, |\phi\rangle \in \mathcal{H}$ y $\langle\psi|, \langle\phi| \in \mathcal{H}^{\dagger}$ los vectores duales respectivos, entonces

$$\langle\psi|\psi\rangle\langle\phi|\phi\rangle \geq |\langle\psi|\phi\rangle|^2 . \quad (1.26)$$

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

$$\begin{aligned} 0 \leq I &\equiv \langle f|f\rangle \\ &= (\langle\phi| + \lambda^*\langle\psi|) (|\phi\rangle + \lambda|\psi\rangle) \\ &= \langle\phi|\phi\rangle + \lambda^*\langle\psi|\phi\rangle + \lambda\langle\phi|\psi\rangle + \lambda^*\lambda\langle\psi|\psi\rangle . \end{aligned} \quad (1.27)$$

Minimicemos I con respecto a λ y λ^* :

$$\frac{\partial I}{\partial \lambda} = 0 = \langle\phi|\psi\rangle + \lambda^*\langle\psi|\psi\rangle , \quad (1.28)$$

$$\frac{\partial I}{\partial \lambda^*} = 0 = \langle\psi|\phi\rangle + \lambda\langle\psi|\psi\rangle . \quad (1.29)$$

Luego el mínimo de I se obtiene al reemplazar en (1.27) los valores de λ^* y λ que se deducen de (1.28) y (1.29):

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

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 $\lambda = a + ib$, con $a, b \in \mathbb{R}$ y, en lugar de (1.28) y (1.29), exigir $\partial I/\partial a = \partial I/\partial b = 0$. Mostrar que el resultado final es el mismo.

1.19. Teorema: Principio de incerteza.

En el Capítulo 0 vimos que el principio de incertidumbre de Heisenberg emerge como uno de los hechos más paradójicos y, sin embargo, consistente con los resultados experimentales con partículas elementales. Dentro del formalismo que hemos desarrollado, sin embargo, aparece un resultado análogo, una mera consecuencia matemática de las definiciones que hemos introducido. Más adelante será clara la relación entre el resultado que demostraremos a continuación y las observaciones del capítulo anterior.

Teorema 1.3 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

$$\boxed{(\Delta A)(\Delta B) \geq \frac{\hbar}{2}\langle\check{\mathbf{C}}\rangle.} \quad (1.30)$$

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

$$\langle(\Delta A)^2\rangle\langle(\Delta B)^2\rangle = \langle\phi|\phi\rangle\langle\chi|\chi\rangle \geq |\langle\phi|\chi\rangle|^2. \quad (1.31)$$

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 $2\Gamma \equiv \langle \psi | (\check{\mathbf{a}} \check{\mathbf{b}} + \check{\mathbf{b}} \check{\mathbf{a}}) | \psi \rangle$. 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 (1.31), y suponiendo que Γ es un número real (lo demostraremos a la brevedad), 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,

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

demostrando el teorema. Sólo falta falta demostrar que Γ es efectivamente real. Se tiene:

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

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.

1.20. Problemas

1-1) 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) $(\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}}\check{\mathbf{C}})^\dagger = \check{\mathbf{C}}^\dagger\check{\mathbf{B}}^\dagger\check{\mathbf{A}}^\dagger$.

1-2) 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 $\check{\mathbf{M}}$.

1-3) 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) $\check{\mathbf{I}} \equiv \frac{1}{2}\{\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}\}_+ = \frac{1}{2}(\check{\mathbf{A}}\check{\mathbf{B}} + \check{\mathbf{B}}\check{\mathbf{A}})$.

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.

1-4) Demuestre que si $\check{\mathbf{A}}$ y $\check{\mathbf{B}}$ conmutan con $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]$, entonces:

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

1-5) Demuestre que si $\check{\mathbf{A}}$ y $\check{\mathbf{B}}$ conmutan con $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]$, entonces:

$$e^{\check{\mathbf{A}}}\check{\mathbf{B}}e^{\check{\mathbf{A}}} = e^{\check{\mathbf{A}}+\check{\mathbf{B}}+\frac{1}{2}[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]} = e^{\check{\mathbf{A}}+\check{\mathbf{B}}}e^{\frac{1}{2}[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]} = e^{\check{\mathbf{B}}}\check{\mathbf{A}}e^{[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}]} . \quad (1.22)$$

1-6) Poner $\lambda = a + ib$, con $a, b \in \mathbb{R}$ y, en lugar de (1.28) y (1.29), 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.

1-7) 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 a ella.

1-8) 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 $\mathcal{B} = \mathcal{A}^2$.

1-9) 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 $\check{\mathbf{H}} = \check{\mathbf{0}}$.

Capítulo 2

Las ecuaciones básicas de la Mecánica Cuántica.

versión 22 mayo 2007

2.1. 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

$$\nabla^2 \psi(\vec{r}, t) = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(\vec{r}, t) . \quad (2.1)$$

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

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} . \quad (2.2)$$

Aquí $\omega = 2\pi\nu$ es la frecuencia angular y $\vec{k} = k\hat{k}$ el vector de onda. De (2.2) se deduce que la magnitud del vector de onda \vec{k} está relacionada con la longitud de onda λ por

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} , \quad k = \left| \vec{k} \right| . \quad (2.3)$$

Para las ondas electromagnéticas, cada componente del campo eléctrico y magnético viene dada por una onda del tipo (2.2). 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

$$u(\vec{r}) = c \left| \vec{S}(\vec{r}) \right| . \quad (2.4)$$

Ahora recordemos las observaciones del Cap. 0. Las ondas electromagnéticas, en ciertas condiciones, parecen comportarse como partículas. Si eso es cierto, los flujos de energía y momento recién calculados corresponderían a la energía E y momento p de ciertas partículas, los fotones. (2.4) implica entonces que

$$E_{\text{fotón}} = p_{\text{fotón}} c . \quad (2.5)$$

Este resultado es consistente con la mecánica relativista. En efecto, 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 viajar con velocidad c , sólo es posible tener masa nula, en cuyo caso E se reduce precisamente a (2.5). Es interesante notar que el modelo de la luz como fotones está, en germen, en un resultado como (2.5), puramente clásico.

Ya hemos conectado la Electrodinámica Clásica con la Relatividad Especial. Ahora agreguemos un tercer elemento: los fenómenos contradictorios con la teoría clásica, como la radiación de cuerpo negro y el efecto fotoeléctrico. De acuerdo a Einstein, la energía de un “quantum” de luz de frecuencia ν viene dada por

$$E = \hbar\omega = h\nu \quad (\text{relación de Planck-Einstein}). \quad (2.6)$$

Al sustituir la función de onda dada por (2.2) en la ecuación diferencial, se obtiene

$$k = \frac{\omega}{c} , \quad (2.7)$$

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

De las ecuaciones (2.6) y (2.7) se deduce que

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

o sea, usando (2.5)

$$p = \hbar k .$$

Vectorialmente esta última ecuación queda como:

$$\vec{p} = \hbar\vec{k} \quad (\text{relación de Compton}). \quad (2.8)$$

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:

$$\{E, \vec{p}c\} = \hbar c \{\omega/c, \vec{k}\} . \quad (2.9)$$

De la relación de Compton y ecuación (2.3) se deduce que

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (\text{relación de de Broglie}). \quad (2.10)$$

Todos los resultados anteriores han sido obtenidos para ondas electromagnéticas o, en el nuevo lenguaje, para fotones, i.e., partículas de masa nula. Veamos ahora cuál es la situación para 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

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = A e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} . \quad (2.11)$$

En el caso electromagnético, el módulo al cuadrado de la onda es la intensidad, que uno puede reinterpretar como la probabilidad de que un fotón esté en un lugar dado. En aquellos lugares en que la intensidad sea mayor, habrá más fotones. Guiados entonces por estas 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} :

$$\rho(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t)^* \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = |A|^2 . \quad (2.12)$$

Hasta este punto, todo lo hecho ha sido una analogía exacta entre el caso electromagnético y el de partículas. Sin embargo, hay una diferencia importante. La relación entre \vec{p} y E para partículas masivas, en el límite no relativista, no es (2.5), sino

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

Luego, usando (2.6) y (2.8), la relación de dispersión para partículas materiales toma la forma

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar} \omega . \quad (2.13)$$

La dependencia cuadrática de ω con k implica que la propagación de la onda de la partícula será dispersiva.

¿Cuál será la ecuación de onda, análoga a la ecuación (2.1), 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 (2.11) con respecto al tiempo t y a las coordenadas \vec{r} . Se tiene:

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = -i\omega \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) , \quad (2.14)$$

$$\vec{\nabla} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = +i\vec{k} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) , \quad (2.15)$$

$$\nabla^2 \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = -k^2 \psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) . \quad (2.16)$$

Sustituyendo (2.13) en (2.16) y usando (2.14) se obtiene la ecuación buscada:

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t) .} \quad (2.17)$$

Ésta 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 (2.1) y (2.17) reside en que en (2.1) aparecen segundas derivadas con respecto al tiempo, mientras que en (2.17) sólo aparecen sus primeras derivadas. Así, para obtener la evolución de un sistema gobernado por la ecuación (2.17) basta con conocer $\psi(\vec{r}, t)$ en un instante $t = t_0$. Para un sistema gobernado por la ecuación (2.1), además de conocer $\psi(\vec{r}, t_0)$, también se requiere conocer $(\partial\psi(\vec{r}, t)/\partial t)_{t=t_0}$, $\forall \vec{r}$.

Para las ondas electromagnéticas, tanto la velocidad de fase $v_f = \omega/k$ como la 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 (2.15) la podemos reescribir de la forma

$$-i\hbar\vec{\nabla}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \hbar\vec{k}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \vec{p}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) . \quad (2.18)$$

Este resultado es muy interesante. Observemos que el momento \vec{p} es una variable medible físicamente (un *observable*), mientras que $-i\hbar\vec{\nabla}$ es un operador diferencial. Sin embargo, la ecuación (2.18) nos *sugiere* que tiene sentido identificar el gradiente con un operador diferencial asociado al momento: $-i\hbar\vec{\nabla} \equiv \vec{p}^{(op)}$. Algo parecido ocurre con la ecuación (2.14). Al reescribirla queda como

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \hbar\omega\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = E\psi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) . \quad (2.19)$$

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 (2.19) 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. Detengámonos en la relación

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

Notando que un operador es esencialmente una matriz, y que un observable es un número, la relación anterior se ve simplemente como un problema de autovalores. Esto muestra la cercana conexión que habrá entre la teoría cuántica y el álgebra lineal. No sólo eso, sino que sugiere que una cantidad física medible, un *observable*, es siempre un autovalor del operador asociado a tal observable. Esta observación prepara el terreno para el postulado 3. Resolver un problema cuántico será, en algún sentido, equivalente a resolver un problema de autovalores.

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

$$\frac{-i}{\hbar} [x_\alpha^{(op)}, p_\beta^{(op)}] = \delta_{\alpha\beta} .$$

Éste es el mismo resultado que se encuentra en la mecánica clásica para el corchete de Poisson de x_α y p_β . Este comentario prepara el terreno para el postulado 4. Nos avisa que hay una cierta estructura del sistema que se preservará al pasar desde la teoría clásica a la cuántica.

2.2. Los postulados.

Postulado 1:

Cada sistema tiene asociado un determinado espacio de Hilbert \mathcal{H} sobre los complejos; a cada estado posible del sistema le corresponde un vector de dicho espacio vectorial; 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 $\{q_n\}$. Si, como efecto de una medición del observable Q , se mide el valor q_n , el sistema queda representado, tras la medición, por un autovector $|q_n\rangle$ del operador \check{Q} , donde

$$\check{Q} |q_n\rangle = q_n |q_n\rangle . \quad (2.20)$$

Equivalentemente, 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 Ψ y sea $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ su vector asociado. Sea A un observable físico y $\check{\mathbf{A}} = \sum_n a_n |a_n\rangle\langle a_n|$ el operador asociado; (acá a_n y $|a_n\rangle$ son los autovalores y autovectores de $\check{\mathbf{A}}$). Elijamos el vector correspondiente al estado inicial Ψ 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).

$$P_n = |\langle a_n | \Psi \rangle|^2 . \quad (2.21)$$

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 (2.21) 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{H} el operador Hamiltoniano de un sistema físico. La evolución temporal de la función de estado está gobernada por la ecuación

$$\boxed{i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \check{H} |\psi(t)\rangle .} \quad (2.22)$$

Comentarios:

El postulado 1 establece el marco formal de la Teoría Cuántica. Todo estado de un sistema físico está representado por un vector en un determinado espacio vectorial. Esto está relacionado con el principio de superposición: en un experimento de difracción de neutrones por dos rendijas, un único neutrón puede presentar efectos de interferencia (Fig. 11), lo cual únicamente tiene sentido si el neutrón ha “pasado” por ambas rendijas al mismo tiempo. Su *estado* (la posición, en este caso) es la superposición de otros dos estados posibles (la posición de cada una de las dos rendijas). Emerge entonces la posibilidad de que un estado físico sea la superposición de dos o más estados físicos, y de ahí que el postulado 1 asocie estados físicos con vectores de un espacio vectorial, donde la suma de dos vectores es otro vector. Matemáticamente, se postula que dicho espacio vectorial es un *espacio de Hilbert*, esto es, un espacio vectorial en el cual hay definida una norma, y que es completo respecto a esa norma (es decir, que toda sucesión de Cauchy converge a un elemento del mismo espacio vectorial). Esto es importante, pues permite asegurar, por ejemplo, que las series infinitas y las integrales existen, lo cual es importante para asegurar el sentido de la teoría cuando la dimensión del espacio es infinita o no numerable.

El hecho de que la dimensión del espacio pueda ser infinita y no numerable 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 interesante el hecho de 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. Físicamente, los únicos resultados posibles de una medición son números reales. Esto sugiere que tiene sentido, como dice el postulado 2, que los resultados de una medición sólo pueden ser los autovalores de operadores autohermíticos (ver Proposición 1.1). Pero, ¿por qué deberían ser *autovalores* de algún operador? Supongamos un sistema en que una variable física puede tener sólo dos valores posibles, que denotaremos $+$ y $-$ (pueden representar la posición de cada rendija en un experimento de interferencia de neutrones, o las dos polarizaciones posibles de un fotón). Y consideremos un proceso de medición en que se mide el estado del sistema dos veces consecutivas, usando el mismo experimento (Fig. 2.1).

La primera medición tiene un resultado impredecible. Digamos que los dos resultados posibles son equiprobables, y que el resultado de la primera medición fue $+$. Es evidente que si medimos por segunda vez el sistema, y no hay ningún agente externo que modifique el estado del sistema, una segunda medición arrojará nuevamente el resultado $+$, con *total certeza*. Si representamos ahora cada estado como un vector, $|+\rangle$ y $|-\rangle$, el estado inicial, corresponde a alguna superposición de $|+\rangle$ y $|-\rangle$, y ello se refleja en el resultado incierto de la primera medición. Pero una vez obtenido un resultado ($+$), el estado del sistema ya no es una superposición, porque la segunda medición será siempre $+$. El experimento se puede

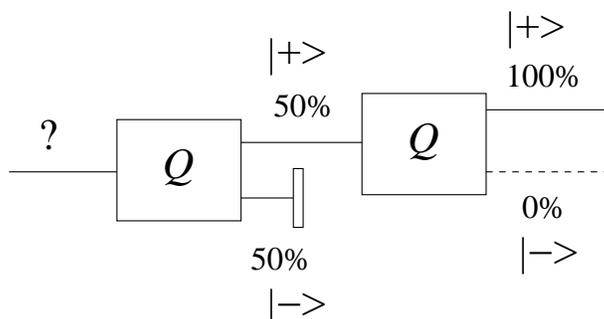


Figura 2.1: Dos mediciones consecutivas del mismo observable Q en un sistema con dos estados posibles.

repetir muchas veces, y siempre el resultado será el mismo, es decir, aplicar sucesivas veces el mismo operador \hat{Q} deja el estado invariante, lo que es consistente con (2.20) (recordemos que nos interesan los estados normalizados, de modo que multiplicar por un escalar no modifica el estado).

En otras palabras, mientras el postulado 1 se relaciona con el hecho de que la medición de una variable física tiene un resultado en principio indeterminado (porque un sistema se encuentra en general en una superposición de estados), el postulado 2 nos asegura que dicha superposición se destruye en cuanto realizamos una medición, y sucesivas mediciones de la misma variable darán siempre el mismo resultado.

El postulado 3, en tanto, establece claramente cuál es la probabilidad de una medición, cuando el sistema se encuentra en un estado arbitrario $|\Psi\rangle$. Matemáticamente, $|\Psi\rangle$ es cierta combinación lineal de autovectores de un operador autohermítico \hat{A} . Ello es siempre posible porque los autovectores de \hat{A} forman una base de \mathcal{H} . Los coeficientes de dicha combinación lineal corresponden físicamente, a la probabilidad de medir el autovalor correspondiente. En el caso de la Fig. 2.1, el estado inicial será

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+\rangle + |-\rangle),$$

ya que la probabilidad de medir $+$ y $-$ es $1/2$. Pero tras la primera medición, el estado es necesariamente

$$|\Psi'\rangle = |+\rangle,$$

pues es la única manera de asegurar que la segunda medición arroje con 100% de certeza el valor $+$.

El postulado 4 tiene por objeto asegurar el *Principio de Correspondencia* de Niels Bohr, entregando al mismo tiempo prescripciones precisas para asociar operadores con observables.

Finalmente, 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 2 habla de una variación brusca de la función de estado al hacerse una medición ($|\Psi\rangle \rightarrow |a_n\rangle$); tal cambio no es determinista sino que de naturaleza estadística, pudiendo conocerse sólo la probabilidad de un determinado resultado (postulado 3).

Este “doble standard” (evolución determinista, medición probabilística) 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 se entiende que 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). Dentro de ese contexto, los postulados son consistentes con todos los hechos experimentales, y por ende constituyen una teoría aceptable físicamente.

2.3. Conjunto completo de observables compatibles.

Diremos que $\{\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{C}}, \dots\}$ es un *conjunto completo de observables compatibles* si $\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}, \dots$ son operadores autohermíticos tales que existe una base de autovectores comunes a todos (en otras palabras, son diagonalizables en una misma base).

Para entender esta definición, construyamos un conjunto de tales operadores, para luego discutir su significado físico.

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 anteriormente, es posible elegir la base de \mathcal{H} de modo que $\check{\mathbf{A}}$ sea diagonal. En principio, denotamos al autovector asociado a un autovalor α como $|\alpha\rangle$. Sin embargo, pueden existir varios vectores base con un mismo autovalor para $\check{\mathbf{A}}$. Para distinguir entre sí autovectores dentro de un mismo subespacio de degeneración, necesitaremos un índice adicional, β . En general, será necesario un cierto conjunto de índices α, β, γ , etc., para rotular de modo unívoco los autovectores de $\check{\mathbf{A}}$. Consideremos entonces la base $\{|\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle\}$; esta base está formada por autovectores de $\check{\mathbf{A}}$:

$$\check{\mathbf{A}}|\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle = \alpha |\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle .$$

Es claro que

$$\check{\mathbf{A}} = \sum_{\alpha\beta\gamma\dots} \alpha |\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle \langle \alpha, \beta, \gamma, \dots| .$$

Ahora definamos operadores $\check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{C}}, \dots$, como sigue:

$$\check{\mathbf{B}} = \sum_{\alpha\beta\gamma\dots} \beta |\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle \langle \alpha, \beta, \gamma, \dots| ,$$

$$\check{\mathbf{C}} = \sum_{\alpha\beta\gamma\dots} \gamma |\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle \langle \alpha, \beta, \gamma, \dots| , \dots \text{etc.}$$

Si β, γ , etc., son reales, entonces es inmediato que $\check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{C}}$, etc. son operadores autohermíticos.

Además, se tiene

$$\begin{aligned}\check{\mathbf{A}}|\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle &= \alpha|\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle, \\ \check{\mathbf{B}}|\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle &= \beta|\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle, \\ \check{\mathbf{C}}|\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle &= \gamma|\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle, \\ &\text{etc.}\end{aligned}$$

Es decir, $\{|\alpha, \beta, \gamma, \dots\rangle\}$ son autovectores de todos los operadores. $\{\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{C}}, \dots\}$ es, por lo tanto, un conjunto completo de observables compatibles.

Es evidente que los operadores construidos conmutan todos entre sí:

$$[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] = 0, \quad [\check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{C}}] = 0, \quad [\check{\mathbf{C}}, \check{\mathbf{A}}] = 0, \quad \text{etc.}$$

La proposición inversa también es cierta: si dos operadores conmutan entre sí, entonces existe una base de autovectores de ambos, es decir, una base en la cual ambos son diagonales simultáneamente.

Podemos pensar entonces el problema a la inversa: Consideremos un sistema físico, con sus observables físicos conocidos. Cada uno tiene asociado un operador autohermítico. Escogemos uno ($\check{\mathbf{A}}$). Existe una base de autovectores, y los autovalores respectivos permiten rotular la base. Si existen autovalores degenerados, escogemos otro operador ($\check{\mathbf{B}}$) que conmute con el anterior. Entonces existe una base de autovectores comunes, pudiendo así rotularse la base con dos índices, lo cual romperá las degeneraciones. Si aún existen subespacios de degeneración, escogemos un tercer operador $\check{\mathbf{C}}$ que conmute con los anteriores, y así sucesivamente. Al final del proceso, obtendremos una base rotulada unívocamente, construida con autovectores comunes a todos los operadores compatibles. Observemos que en este proceso hay que evitar las redundancias, como $\{\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}, \check{\mathbf{B}}^2\}$. Aun cuando todos los operadores conmutan entre sí, un subespacio degenerado de $\check{\mathbf{B}}$ es también degenerado para $\check{\mathbf{B}}^2$, luego los autovalores de $\check{\mathbf{B}}^2$ no sirven como un rótulo independiente.

¿Cuál es el significado físico de dos observables compatibles? Recordemos la Fig. 2.1, pero modifiquémosla para considerar la medición de *dos* observables físicos.

En la Fig. 2.2(a) se miden dos observables Q y P , no compatibles entre sí. Tras la primera medición, el sistema queda en un autoestado de $\check{\mathbf{Q}}$, $|Q+\rangle$ (Postulado 2). La segunda medición arroja un resultado $P+$, luego el sistema queda en el autoestado de $\check{\mathbf{P}}$ $|P+\rangle$. Sin embargo, los operadores no son compatibles, luego no tienen una base común de autovectores, y por tanto $|P+\rangle$ no es un autovector de $\check{\mathbf{Q}}$. Luego, al medir nuevamente Q , el resultado no es único. Esto significa que al medir P , se ha perdido la información que ya teníamos sobre Q . En otras palabras, si dos operadores *no conmutan*, de modo que no son compatibles, es imposible saber con precisión el valor de ambos observables simultáneamente. Observemos que esto es consistente con el Principio de Incerteza enunciado anteriormente (Sec. 1.19).

Por el contrario, en la Fig. 2.2(b) se miden dos observables compatibles Q y R . Puesto que los operadores conmutan entre sí, un autoestado $|Q+\rangle$ es también autoestado de $\check{\mathbf{R}}$. Por tanto, al medir R el sistema sigue en el estado $|Q+\rangle$, la información obtenida en la primera medición no se destruye, y es posible conocer el valor de ambos observables simultáneamente.

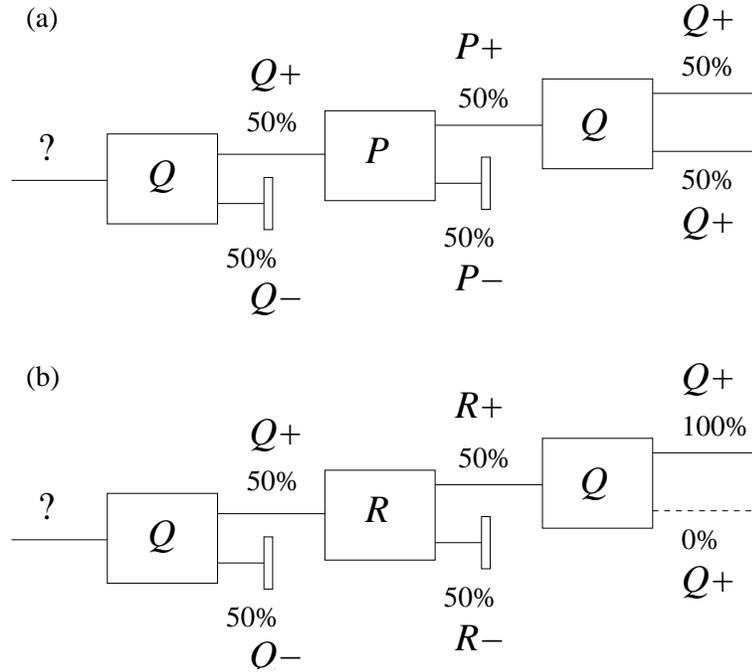


Figura 2.2: Mediciones consecutivas de dos observables (a) Q y P no compatibles, (b) Q y R compatibles. Cada observable puede asumir sólo dos valores posibles, Q_{\pm} , P_{\pm} , R_{\pm} , con probabilidad $1/2$.

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 ¹). 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: $\vec{r} = (\check{x}, \check{y}, \check{z})$ y $\vec{p} = (\check{p}_x, \check{p}_y, \check{p}_z)$. Sin embargo, si se incluyen $(\check{x}, \check{y}, \check{z})$ 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 \vec{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 $\{|\vec{r}\rangle = |x, y, z\rangle, \vec{r} \in \mathbb{R}^3\}$, con $\check{x}_j|\vec{r}\rangle = x_j|\vec{r}\rangle$, $j = 1, 2, 3$ (ver Sec. 2.4). 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 $\{\check{p}^2, \check{L}^2, \check{L}_z\}$, donde \check{L} es el operador asociado al momento angular $\check{L} = \vec{r} \times \vec{p}$. 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 $\{\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N\}$ es un posible conjunto completo de observables compatibles, siendo la

¹En 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 α ; para energías bastante menores que 20.1 MeV (la energía del primer estado excitado) la partícula no revelará su estructura interna.

base asociada de \mathcal{H} : $\{|\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N\rangle\}$, con $\vec{r}_i \in \mathbb{R}^3 \forall i$.

2.4. 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

$$\begin{aligned}\check{\mathbf{p}}|\vec{p}\rangle &= \vec{p}|\vec{p}\rangle, \\ \check{\mathbf{r}}|\vec{r}\rangle &= \vec{r}|\vec{r}\rangle.\end{aligned}$$

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 de 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 $\{1, 2, 3\}$ permite rotular una base completa del espacio tridimensional ordinario, el conjunto $\{\mathbb{R}^3 = \text{los puntos del espacio ordinario}\}$ sirve para rotular \mathcal{H} . También es importante darse cuenta de 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}_0 bien definido, entonces el sistema estará representado por el vector $|\vec{p}_0\rangle$. Esto concuerda con el postulado de Born, pues

$$\langle\vec{p}|\vec{p}_0\rangle = \delta(\vec{p} - \vec{p}_0), \quad (2.23)$$

de modo que la densidad de probabilidad $|\langle\vec{p}|\vec{p}_0\rangle|^2$ de obtener un valor $\vec{p} \neq \vec{p}_0$ es nula. Al efectuar una medición del momento se obtendrá con certeza el valor \vec{p}_0 .

Si la partícula tiene un momentum $\vec{p} = \vec{p}_0$ bien definido, la densidad de probabilidad de encontrar la partícula en el lugar \vec{r} vendrá dada por $|\langle\vec{r}|\vec{p}_0\rangle|^2$ (postulado 3). De acuerdo a la sección (2.1), es razonable el *ansatz*:

$$\langle\vec{r}|\vec{p}_0\rangle = A e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}_0 \cdot \vec{r}} = \psi_{\vec{p}_0}(\vec{r}). \quad (2.24)$$

Podemos verificar que (2.24) es una elección correcta, reproduciendo (2.23):

$$\begin{aligned}
 \delta(\vec{p} - \vec{p}') &= \langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle = \int d^3r \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \vec{p}' \rangle \\
 &= \int d^3r \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle^* \langle \vec{r} | \vec{p}' \rangle \\
 &= |A|^2 \int d^3r e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}' - \vec{p}) \cdot \vec{r}} \\
 &= |A|^2 (2\pi)^3 \delta\left(\frac{\vec{p} - \vec{p}'}{\hbar}\right) = |A|^2 (2\pi\hbar)^3 \delta(\vec{p} - \vec{p}') .
 \end{aligned}$$

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}_0 viene dada por

$$\langle \vec{r} | \vec{p}_0 \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}_0 \cdot \vec{r}} = \psi_{\vec{p}_0}(\vec{r}) . \quad (2.25)$$

Las expresiones (2.23) y (2.25) corresponden a representaciones concretas de la función de estado $|\vec{p}_0\rangle$, en el espacio de momento y el espacio de coordenadas, respectivamente. Se trata, simplemente, del mismo vector $|\vec{p}_0\rangle$, pero proyectado en dos bases distintas, $\{|\vec{r}\rangle\}$ y $\{|\vec{p}\rangle\}$. Ambas funciones tienen el mismo contenido físico: son la función de onda de una partícula con momento lineal bien definido \vec{p}_0 . 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 $\vec{r} = \vec{r}_0$, entonces el sistema viene descrito por el vector $|\vec{r}_0\rangle \in \mathcal{H}$. 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 $|\langle \vec{p} | \vec{r}_0 \rangle|^2$. A partir de (2.25) se obtiene que

$$\langle \vec{p} | \vec{r}_0 \rangle = \langle \vec{r}_0 | \vec{p} \rangle^* = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p} \cdot \vec{r}_0} .$$

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 representa-

ción? En la representación de coordenadas se tiene:

$$\begin{aligned}
\langle \vec{r} | \phi \rangle &= \langle \vec{r} | \check{\mathbf{p}} | \psi \rangle \\
&= \int d^3 p' \langle \vec{r} | \check{\mathbf{p}} | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \psi \rangle \\
&= \int d^3 p' \vec{p}' \langle \vec{r} | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \psi \rangle \\
&= \int d^3 p' \frac{\vec{p}'}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{r}} \langle \vec{p}' | \psi \rangle \\
&= \int d^3 p' \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} (-i\hbar \vec{\nabla}) e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{r}} \langle \vec{p}' | \psi \rangle \\
&= -i\hbar \vec{\nabla} \int d^3 p' \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p}' \cdot \vec{r}} \langle \vec{p}' | \psi \rangle \\
&= -i\hbar \vec{\nabla} \int d^3 p' \langle \vec{r} | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \psi \rangle \\
&= (-i\hbar \vec{\nabla}) \langle \vec{r} | \psi \rangle ,
\end{aligned}$$

o sea,

$$\langle \vec{r} | \check{\mathbf{p}} | \psi \rangle = (-i\hbar \vec{\nabla}) \langle \vec{r} | \psi \rangle . \quad (2.26)$$

Esto es, el operador $\check{\mathbf{p}}$ opera sobre funciones complejas de \vec{r} como el operador $-i\hbar \vec{\nabla}$, un resultado que habíamos obtenido de modo menos riguroso en (2.18).

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:

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

resultando,

$$\langle \vec{p} | \check{\mathbf{p}} | \psi \rangle = \vec{p} \langle \vec{p} | \psi \rangle , \quad (2.27)$$

El operador $\check{\mathbf{r}}$ 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:

$$\begin{aligned}
\langle \vec{r} | \varphi \rangle &= \langle \vec{r} | \check{\mathbf{r}} | \psi \rangle = (\check{\mathbf{r}}^\dagger | \vec{r} \rangle)^\dagger | \psi \rangle \\
&= (\check{\mathbf{r}} | \vec{r} \rangle)^\dagger | \psi \rangle = (\vec{r} | \vec{r} \rangle)^\dagger | \psi \rangle \\
&= \vec{r} (| \vec{r} \rangle)^\dagger | \psi \rangle = \vec{r} \langle \vec{r} | \psi \rangle ,
\end{aligned}$$

o sea,

$$\langle \vec{r} | \check{\mathbf{r}} | \psi \rangle = \vec{r} \langle \vec{r} | \psi \rangle . \quad (2.28)$$

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,

$$\begin{aligned} \langle \vec{p} | \check{\mathbf{r}} | \psi \rangle &= \int d^3 r' \langle \vec{p} | \check{\mathbf{r}} | r' \rangle \langle r' | \psi \rangle \\ &= \int d^3 r' \bar{r}' \langle \vec{p} | r' \rangle \langle r' | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3 r' \bar{r}' e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}'} \langle r' | \psi \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3 r' (i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{p}}) e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{r}'} \langle r' | \psi \rangle \\ &= (i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{p}}) \int d^3 r' \langle \vec{p} | r' \rangle \langle r' | \psi \rangle = (i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{p}}) \langle \vec{p} | \psi \rangle, \end{aligned}$$

es decir

$$\langle \vec{p} | \check{\mathbf{r}} | \psi \rangle = (i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{p}}) \langle \vec{p} | \psi \rangle. \quad (2.29)$$

En (2.29) 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 $+i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{p}}$.

2.4.1. 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 $\check{\mathbf{r}}$:

$$\check{\mathbf{p}} = (\check{p}_1, \check{p}_2, \check{p}_3), \quad \check{\mathbf{r}} = (\check{r}_1, \check{r}_2, \check{r}_3).$$

Evaluemos el conmutador $[\check{\mathbf{r}}_i, \check{\mathbf{p}}_j]$. Sea $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ un vector arbitrario. Se tiene:

$$\langle \vec{r} | [\check{\mathbf{r}}_i, \check{\mathbf{p}}_j] | \psi \rangle = \langle \vec{r} | \check{\mathbf{r}}_i \check{\mathbf{p}}_j | \psi \rangle - \langle \vec{r} | \check{\mathbf{p}}_j \check{\mathbf{r}}_i | \psi \rangle. \quad (2.30)$$

Evaluemos separadamente los dos términos del lado derecho de esta ecuación:

$$\langle \vec{r} | \check{\mathbf{r}}_i \check{\mathbf{p}}_j | \psi \rangle = r_i \langle \vec{r} | \check{\mathbf{p}}_j | \psi \rangle = -i\hbar r_i \frac{\partial}{\partial r_j} \langle \vec{r} | \psi \rangle. \quad (2.31)$$

El otro término:

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \check{\mathbf{p}}_j \check{\mathbf{r}}_i | \psi \rangle &= \langle \vec{r} | \check{\mathbf{p}}_j (\check{r}_i | \psi \rangle) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_j} (\langle \vec{r} | \check{r}_i | \psi \rangle) \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial r_j} (r_i \langle \vec{r} | \psi \rangle) \\ &= -i\hbar \left\{ \left(\frac{\partial r_i}{\partial r_j} \right) \langle \vec{r} | \psi \rangle + r_i \frac{\partial}{\partial r_j} \langle \vec{r} | \psi \rangle \right\} \\ &= -i\hbar \delta_{ij} \langle \vec{r} | \psi \rangle - i\hbar r_i \frac{\partial}{\partial r_j} \langle \vec{r} | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Sustituyendo (2.31) y (2.32) en (2.30) 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 $i\hbar \delta_{ij} \check{\mathbf{1}}$:

$$\boxed{[\check{\mathbf{r}}_i, \check{\mathbf{p}}_j] = i\hbar \delta_{ij} \check{\mathbf{1}} .} \quad (2.33)$$

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* (2.14) sobre las autofunciones de momento así como los resultados (2.26)–(2.29) 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

$$[\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}}_x] = [\check{\mathbf{y}}, \check{\mathbf{p}}_y] = [\check{\mathbf{z}}, \check{\mathbf{p}}_z] = i\hbar .$$

De estos resultados se sigue, por ejemplo, que $\check{\mathbf{x}}$ y $\check{\mathbf{p}}_x$ no pueden ser ambos parte de un conjunto completo de observables compatibles, es decir, es imposible medir al mismo tiempo la posición x y su momento conjugado p_x .

2.4.2. 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):

$$[\check{\mathbf{L}}_i, \check{\mathbf{L}}_j] = i\epsilon_{ijk} \hbar \check{\mathbf{L}}_k .$$

2.4.3. 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

$$\check{\mathbf{p}} = \int d^3p' |\vec{p}'\rangle \vec{p}' \langle\vec{p}'|. \quad (2.34)$$

Comparando con (1.1), esto dice simplemente que el operador $\check{\mathbf{p}}$ tiene, en la base de momentum, una representación diagonal, con valores \vec{p}' sobre la diagonal.

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,

$$\begin{aligned}\langle\vec{p}'|\check{\mathbf{p}}|\psi\rangle &= \int d^3r \langle\vec{p}'|\check{\mathbf{p}}|\vec{r}\rangle \langle\vec{r}|\psi\rangle \\ &= \int d^3r \vec{p}' \langle\vec{p}'|\vec{r}\rangle \langle\vec{r}|\psi\rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r \vec{p}' e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}} \langle\vec{r}|\psi\rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r \left\{ (i\hbar\vec{\nabla}) e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}} \right\} \langle\vec{r}|\psi\rangle .\end{aligned}$$

Integrando por partes se obtiene

$$\langle\vec{p}'|\check{\mathbf{p}}|\psi\rangle = \frac{i\hbar}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \left[e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}} \langle\vec{r}|\psi\rangle \Big|_{\vec{r}=\infty} - \int d^3r e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}} \vec{\nabla} \langle\vec{r}|\psi\rangle \right] .$$

Pero $\langle\vec{r}|\psi\rangle|_{r=\infty} = 0$ (de lo contrario $|\psi\rangle$ no estaría normalizada), por lo tanto

$$\begin{aligned}\langle\vec{p}'|\check{\mathbf{p}}|\psi\rangle &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}'\cdot\vec{r}} (-i\hbar\vec{\nabla}) \langle\vec{r}|\psi\rangle \\ &= \int d^3r \langle\vec{p}'|\vec{r}\rangle (-i\hbar\vec{\nabla}) \langle\vec{r}|\psi\rangle \\ &= \langle\vec{p}'| \left\{ \int d^3r |\vec{r}\rangle (-i\hbar\vec{\nabla}) \langle\vec{r}| \right\} |\psi\rangle ,\end{aligned}$$

es decir, podemos hacer la identificación

$$\check{\mathbf{p}} = -i\hbar \int d^3r |\vec{r}\rangle \vec{\nabla} \langle \vec{r}|, \quad (2.35)$$

Análogamente, para el operador $\check{\mathbf{r}}$ se obtienen las relaciones

$$\check{\mathbf{r}} = i\hbar \int d^3p |\vec{p}\rangle \vec{\nabla}_{\vec{p}} \langle \vec{p}| \quad (2.36)$$

y

$$\check{\mathbf{r}} = \int d^3r |\vec{r}\rangle \vec{r} \langle \vec{r}|. \quad (2.37)$$

Como ejercicio, usemos la ecuación (2.36) y deduzcamos nuevamente la ecuación (2.29). Tenemos:

$$\begin{aligned} \langle \vec{p} | \check{\mathbf{r}} | \psi \rangle &= \langle \vec{p} | \left(i\hbar \int d^3p' |\vec{p}'\rangle \vec{\nabla}_{\vec{p}'} \langle \vec{p}'| \right) | \psi \rangle \\ &= i\hbar \int d^3p' \langle \vec{p} | \vec{p}' \rangle \vec{\nabla}_{\vec{p}'} \langle \vec{p}' | \psi \rangle \\ &= i\hbar \int d^3p' \delta(\vec{p} - \vec{p}') \vec{\nabla}_{\vec{p}'} \langle \vec{p}' | \psi \rangle = (i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{p}}) \langle \vec{p} | \psi \rangle. \end{aligned}$$

2.5. Uso del principio de correspondencia.

En esta sección usaremos el principio de correspondencia (postulado 4), para asignar operadores cuánticos a observables clásicos. Si bien es cierto este procedimiento no determina de manera unívoca el operador cuántico, será suficiente para determinar la teoría cuántica para los sistemas clásicos de interés.

Supongamos que tenemos los operadores cuánticos asociados a las variables canónicas conjugadas $x \longrightarrow \check{\mathbf{x}}$, $p \longrightarrow \check{\mathbf{p}}$, cumpliéndose

$$[\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}}] = i\hbar \mathbf{1}. \quad (2.38)$$

Proposición 2.1

$$\check{\mathbf{p}} \check{\mathbf{x}}^n = \check{\mathbf{x}}^n \check{\mathbf{p}} + \mathcal{O}(\hbar).$$

La demostración de esta proposición es directa.

Proposición 2.2 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 2.3

$$\check{p} [\check{p}, \check{x}^j] = [\check{p}, \check{x}^j] \check{p} + \mathcal{O}(\hbar^2) .$$

Demostración Por inducción, para $j = 1$ se tiene

$$\begin{aligned} \check{p} [\check{p}, \check{x}] &= \check{p}\check{p}\check{x} - \check{p}\check{x}\check{p} \\ &= \check{p}(\check{x}\check{p} - i\hbar\check{1}) - (\check{x}\check{p} - i\hbar\check{1})\check{p} \\ &= [\check{p}, \check{x}] \check{p} \end{aligned}$$

o sea, la hipótesis se cumple para $j = 1$. Supongamos que la proposición es cierta para $j = n$, es decir, que se cumple

$$\check{p} [\check{p}, \check{x}^n] = [\check{p}, \check{x}^n] \check{p} + \mathcal{O}(\hbar^2) ,$$

y demostremos que entonces también es válida para $j = n + 1$. Se tiene:

$$\begin{aligned} \check{p} [\check{p}, \check{x}^{n+1}] &= \check{p} [\check{p}, \check{x}^n \check{x}] \\ &= \check{p}\check{x}^n [\check{p}, \check{x}] + \check{p} [\check{p}, \check{x}^n] \check{x} \\ &= \check{p}\check{x}^n (-i\hbar\check{1}) + ([\check{p}, \check{x}^n] \check{p} + \mathcal{O}(\hbar^2))\check{x} \end{aligned} \tag{2.39}$$

Por otra parte

$$\begin{aligned} [\check{p}, \check{x}^{n+1}] \check{p} &= [\check{p}, \check{x}^n \check{x}] \check{p} \\ &= \check{x}^n [\check{p}, \check{x}] \check{p} + [\check{p}, \check{x}^n] \check{x}\check{p} \\ &= (-i\hbar) \check{x}^n \check{p} + [\check{p}, \check{x}^n] (\check{p}\check{x} + i\hbar\check{1}) \\ &= -i\hbar\check{x}^n \check{p} + [\check{p}, \check{x}^n] \check{p}\check{x} + (\check{p}\check{x}^n - \check{x}^n \check{p})i\hbar \end{aligned}$$

Pero

$$-i\hbar\check{x}^n \check{p} + (\check{p}\check{x}^n - \check{x}^n \check{p})i\hbar = -i\hbar\check{p}\check{x}^n + \mathcal{O}(\hbar^2) ,$$

luego

$$[\check{p}, \check{x}^{n+1}] \check{p} = \check{p}\check{x}^n (-i\hbar\check{1}) + ([\check{p}, \check{x}^n] \check{p} + \mathcal{O}(\hbar^2))\check{x} . \tag{2.40}$$

Comparando las ecuaciones (2.39) y (2.40) se demuestra la proposición.

q.e.d.

Proposición 2.4 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 $\check{\mathbf{B}} = \mathcal{B}(\check{x}, \check{p})$. Entonces

$$[\check{p}, \check{\mathbf{B}}] \check{p} = \check{p} [\check{p}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) .$$

La demostración queda como ejercicio (Problema 3-2).

Proposición 2.5 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

$$[\check{\mathbf{p}}^\ell, \check{\mathbf{B}}] = \left[\frac{\partial}{\partial p} (p)^\ell \right]_{\check{\mathbf{p}}} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) . \quad (2.41)$$

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 (2.41) para el operador $\check{\mathbf{x}}$:

$$[\check{\mathbf{x}}^\ell, \check{\mathbf{B}}] = \left[\frac{\partial}{\partial x} (x)^\ell \right]_{\check{\mathbf{x}}} [\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) . \quad (2.42)$$

Proposición 2.6 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

$$[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] = \frac{\partial \check{\mathbf{A}}}{\partial p} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + \frac{\partial \check{\mathbf{A}}}{\partial x} [\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) . \quad (2.43)$$

Demostración

$$\begin{aligned}
[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{B}}] &= \left[\sum_{k,\ell} A_{k\ell} \check{x}^k \check{p}^\ell, \check{\mathbf{B}} \right] \\
&= \sum_{k,\ell} A_{k\ell} \left(\check{x}^k [\check{p}^\ell, \check{\mathbf{B}}] + [\check{x}^k, \check{\mathbf{B}}] \check{p}^\ell \right) \\
&= \sum_{k,\ell} A_{k\ell} \left\{ \check{x}^k \left(\frac{\partial}{\partial p} (p^\ell) \right)_{\check{\mathbf{p}}} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + \left(\frac{\partial}{\partial x} (x^k) \right)_{\check{\mathbf{x}}} \check{p}^\ell [\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) \right\} \\
&= \left(\sum_{k,\ell} A_{k\ell} x^k \frac{\partial p^\ell}{\partial p} \right)_{\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}}} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + \left(\sum_{k,\ell} A_{k\ell} \frac{\partial x^k}{\partial x} p^\ell \right)_{\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}}} [\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) \\
&= \left(\frac{\partial \check{\mathbf{A}}}{\partial p} \right) [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + \left(\frac{\partial \check{\mathbf{A}}}{\partial x} \right) [\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) ,
\end{aligned}$$

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.

Observemos que todos estos resultados son análogos a los correspondientes en Mecánica Clásica, reemplazando $\check{\mathbf{A}}$ y $\check{\mathbf{B}}$ por sus variables clásicas asociadas \mathcal{A} y \mathcal{B} , y los conmutadores por corchetes de Poisson. En realidad, son iguales, *excepto* por términos de orden \hbar^2 . Por tanto, el principio de correspondencia (Postulado 4) sigue cumpliéndose, pero a nivel cuántico los resultados difieren.

Proposición 2.7 Sea $\mathcal{A}(x, p)$ un observable clásico con el desarrollo

$$\mathcal{A}(x, p) = \sum_{k,\ell} A_{k\ell} x^k p^\ell .$$

Entonces

$$[\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{A}}] = i\hbar \frac{\partial \check{\mathbf{A}}}{\partial p} , \tag{2.44}$$

$$[\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{A}}] = -i\hbar \frac{\partial \check{\mathbf{A}}}{\partial x} . \tag{2.45}$$

Demostración Consideremos (2.44). Se tiene

$$[\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{A}}] = \sum_{k,\ell} A_{k\ell} \check{x}^k [\check{\mathbf{x}}, \check{p}^\ell] .$$

Notemos que

$$[\check{\mathbf{p}}, [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{x}}]] = [\check{\mathbf{p}}, -i\hbar\check{\mathbf{1}}] = 0 ,$$

de modo que, poniendo $\check{\mathbf{A}} = \check{\mathbf{p}}$ y $\check{\mathbf{B}} = \check{\mathbf{x}}$ en (1.16), la expresión anterior se escribe

$$\begin{aligned} [\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{A}}] &= \sum_{k,\ell} A_{k\ell} \check{\mathbf{x}}^k \ell \check{\mathbf{p}}^{\ell-1} [\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}}] \\ &= \sum_{k,\ell} A_{k\ell} \check{\mathbf{x}}^k \ell \check{\mathbf{p}}^{\ell-1} i\hbar \\ &= i\hbar \frac{\partial \check{\mathbf{A}}}{\partial \check{\mathbf{p}}} , \end{aligned}$$

demostrándose así (2.44). De modo análogo se demuestra (2.45).

q.e.d.

Para magnitudes vectoriales las últimas relaciones quedan de la forma

$$[\check{\vec{\mathbf{r}}}, f(\check{\vec{\mathbf{r}}}, \check{\vec{\mathbf{p}}})] = +i\hbar \left(\vec{\nabla}_{\check{\vec{p}}} f(\check{\vec{r}}, \check{\vec{p}}) \right) \check{\mathbf{1}}$$

y

$$[\check{\vec{\mathbf{p}}}, f(\check{\vec{\mathbf{r}}}, \check{\vec{\mathbf{p}}})] = -i\hbar \left(\vec{\nabla} f(\check{\vec{r}}, \check{\vec{p}}) \right) \check{\mathbf{1}} .$$

La Prop. 2.7 es, nuevamente, una relación entre operadores que es idéntica a la relación equivalente en Mecánica Clásica, reemplazando los operadores por observables y los conmutadores por corchetes de Poisson. En este caso, las relaciones clásica y cuántica son iguales, sin términos adicionales de orden \hbar .

Notemos, finalmente, cómo todo lo que hemos dicho afecta la asociación entre observables clásicos y operadores cuánticos. 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. Ésta es, por cierto, la elección natural. Pero no es la única. Por ejemplo, consideremos $\mathcal{A}(x, p) = xp = px$; clásicamente el orden de los dos escalares p y x no importa. Sin embargo, podemos construir dos operadores cuánticos:

$$\check{\mathbf{A}}_1 = \check{\mathbf{x}}\check{\mathbf{p}} ,$$

y

$$\check{\mathbf{A}}_2 = \check{\mathbf{p}}\check{\mathbf{x}} = \check{\mathbf{x}}\check{\mathbf{p}} - i\hbar\check{\mathbf{1}} = \check{\mathbf{A}}_1 - i\hbar\check{\mathbf{1}} .$$

Ambos operadores son distintos, difiriendo en un término del orden de \hbar . El límite clásico será el mismo, pero a nivel cuántico los resultados son distintos. Surge entonces el problema de cómo asignar un operador cuántico a un observable clásico, y la prescripción para hacerlo está dada en el siguiente Teorema.

Teorema 2.1 Sean $\mathcal{A}(x, p)$ y $\mathcal{B}(x, p)$ dos observables clásicos, con corchete de Poisson

$$\{\mathcal{A}, \mathcal{B}\} = \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial p} - \frac{\partial \mathcal{A}}{\partial p} \frac{\partial \mathcal{B}}{\partial x} = \{\mathcal{A}, p\}\{x, \mathcal{B}\} - \{x, \mathcal{A}\}\{\mathcal{B}, p\} . \quad (2.46)$$

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:

$$\mathcal{A}(x, p) \longrightarrow \mathcal{A}(\check{x}, \check{p}) \longrightarrow \check{\mathbf{A}} = \frac{1}{2} [\mathcal{A}(\check{x}, \check{p}) + \mathcal{A}^\dagger(\check{x}, \check{p})] . \quad (2.47)$$

(Ídem para el operador \mathcal{B} .)

Demostración Reemplazando (2.44) y (2.45) en (2.43) 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 de 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.

Como ejemplo de cuantización de un observable clásico, consideremos la energía de una partícula libre. 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

$$\check{\mathbf{T}} \longrightarrow \frac{(-i\hbar\vec{\nabla})^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 .$$

Ahora bien, de acuerdo al postulado 5, la evolución temporal de las funciones de estado $|\psi(t)\rangle$ viene dada por:

$$\check{\mathbf{H}}|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle .$$

Para la partícula libre

$$\check{\mathbf{H}} = \check{\mathbf{T}} = \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2m}.$$

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

$$\boxed{-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{r}, t)}, \quad (2.48)$$

que es la ecuación de Schrödinger para la partícula libre, (2.17).

Concluimos entonces que la ecuación de Schrödinger para la partícula libre no es otra cosa que la forma que toma, en representación de coordenadas, la ecuación de evolución temporal del postulado 5.

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	$\check{\mathbf{T}}$	$-\hbar^2 \nabla^2 / (2m)$	$p^2 / (2m)$

2.6. Ilustraciones.

Para familiarizarnos con los conceptos desarrollados en las secciones anteriores, usémoslos para obtener algunos resultados importantes. Para ello, consideremos $\check{\mathbf{H}}$ el Hamiltoniano del sistema, y $\{|\Psi_n\rangle\}$ una base de autovalores de $\check{\mathbf{H}}$, con $\check{\mathbf{H}}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle$.

2.6.1. Teorema del virial.

Sea $\check{\mathbf{A}}$ un operador arbitrario, 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:

$$\begin{aligned}[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{H}}] &= -\frac{i}{\hbar} [\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{H}}] \\ &= -\frac{i}{\hbar} [\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{H}}] \cdot \check{\mathbf{p}} - \frac{i}{\hbar} \check{\mathbf{r}} \cdot [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{H}}] \\ &= (\check{\nabla}_{\check{\mathbf{p}}} \check{\mathbf{H}}) \cdot \check{\mathbf{p}} - \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\nabla} \check{\mathbf{H}}\end{aligned}$$

Si el Hamiltoniano es de la forma $\check{\mathbf{H}} = \check{\mathbf{T}} + \check{\mathbf{V}}$, con $\check{\mathbf{T}}$ el operador de energía cinética y $\check{\mathbf{V}}$ el operador asociado a un potencial, entonces

$$[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{H}}] = \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{m} - \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\nabla} \check{\mathbf{V}} = 2\check{\mathbf{T}} + \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{F}},$$

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*, y es el análogo cuántico del teorema homónimo en mecánica clásica.

2.6.2. Regla de suma de Thomas-Reiche-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

$$\check{\mathbf{H}} = \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\check{\mathbf{x}}).$$

Definamos

$$f_{0 \rightarrow n} \equiv \frac{2m}{\hbar^2} (E_n - E_0) |\langle \Psi_n | \check{\mathbf{x}} | \Psi_0 \rangle|^2.$$

Demostraremos que

$$\sum_n f_{0 \rightarrow n} = 1 .$$

Este resultado es conocido por el nombre de *Regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn*.

Demostración

$$\begin{aligned} \sum_n f_{0 \rightarrow n} &= \frac{2m}{\hbar^2} \sum_n (E_n - E_0) |\langle \Psi_n | \check{\mathbf{x}} | \Psi_0 \rangle|^2 \\ &= \frac{m}{\hbar^2} \sum_n 2(E_n - E_0) \langle \Psi_0 | \check{\mathbf{x}} | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \check{\mathbf{x}} | \Psi_0 \rangle \\ &= \frac{m}{\hbar^2} \sum_n ((E_n - E_0) \langle \Psi_0 | \check{\mathbf{x}} | \Psi_n \rangle) \langle \Psi_n | \check{\mathbf{x}} | \Psi_0 \rangle + \\ &\quad + \frac{m}{\hbar^2} \sum_n \langle \Psi_0 | \check{\mathbf{x}} | \Psi_n \rangle ((E_n - E_0) \langle \Psi_n | \check{\mathbf{x}} | \Psi_0 \rangle) . \end{aligned}$$

Pero

$$\begin{aligned} (E_n - E_0) \langle \Psi_0 | \check{\mathbf{x}} | \Psi_n \rangle &= -\langle \Psi_0 | (E_0 \check{\mathbf{x}} - \check{\mathbf{x}} E_n) | \Psi_n \rangle \\ &= -\langle \Psi_0 | \check{\mathbf{H}} \check{\mathbf{x}} - \check{\mathbf{x}} \check{\mathbf{H}} | \Psi_n \rangle = -\langle \Psi_0 | [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{x}}] | \Psi_n \rangle . \end{aligned}$$

Análogamente,

$$(E_n - E_0) \langle \Psi_n | \check{\mathbf{x}} | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_n | [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{x}}] | \Psi_0 \rangle .$$

Luego para la sumatoria se obtiene

$$\begin{aligned} \sum_n f_{0 \rightarrow n} &= -\frac{m}{\hbar^2} \sum_n \langle \Psi_0 | [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{x}}] | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \check{\mathbf{x}} | \Psi_0 \rangle \\ &\quad + \frac{m}{\hbar^2} \sum_n \langle \Psi_0 | \check{\mathbf{x}} | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{x}}] | \Psi_0 \rangle \\ &= -\frac{m}{\hbar^2} \langle \Psi_0 | [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{x}}] \check{\mathbf{x}} | \Psi_0 \rangle + \frac{m}{\hbar^2} \langle \Psi_0 | \check{\mathbf{x}} [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{x}}] | \Psi_0 \rangle \\ &= \frac{m}{\hbar^2} \langle \Psi_0 | [\check{\mathbf{x}}, [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{x}}]] | \Psi_0 \rangle . \end{aligned}$$

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,

$$\sum_n f_{0 \rightarrow n} = \frac{m}{\hbar^2} \langle \Psi_0 | \frac{\hbar^2}{m} | \Psi_0 \rangle = 1 .$$

q.e.d.

2.7. Paquetes de ondas y transformada de Fourier.

2.7.1. Superposición de ondas planas.

Ya hemos visto que la ecuación de evolución para una partícula libre está dada por la ecuación de Schrödinger (2.48). Soluciones particulares de esta ecuación son las ondas planas monocromáticas

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \vec{k}, t \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} .$$

Notar que $\omega = \omega(k)$ es una función de k . En efecto, ω está relacionada con \vec{k} a través de la relación de dispersión de la partícula libre (ecuación 2.13)

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

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:

$$\int d^3k \Psi(\vec{k}) \left(\langle \vec{r} | \vec{k} \rangle e^{-i\omega(k)t} \right) = \Psi(\vec{r}, t) . \quad (2.49)$$

Estamos usando la misma letra Ψ para denotar 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. Esto es particularmente interesante, porque nos permite conectar la teoría cuántica con nuestras experiencias clásicas. En efecto, las ondas planas son soluciones particulares de la ecuación de Schrödinger para la partícula libre. Sin embargo, una onda plana tiene momentum definido (algo adecuado para una partícula clásica), pero está completamente deslocalizada. La amplitud $|\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}, t)|^2$, que mide la probabilidad de encontrar la partícula en la posición \vec{r} , es constante, y por lo tanto la partícula está en todas partes con la misma probabilidad. Sin embargo, clásicamente las

partículas sí están en un lugar definido. Esta aparente contradicción se resuelve si consideramos ahora una *superposición* de ondas planas. Como dicha superposición sí tiene un ancho finito, concluimos que lo adecuado no es asociar una partícula clásica a una onda plana, sino a un paquete de ondas.

Obtengamos ahora algunos resultados útiles para paquetes de ondas. 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 usar la notación $\Psi(\vec{r}, t) = \langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle$.

Para $t = 0$, (2.49) 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 en la base $|\vec{k}\rangle$, 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

$$\langle \vec{r} | \Psi(0) \rangle = \int d^3k \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | \Psi(0) \rangle , \quad (2.50)$$

y

$$\Psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \Psi(\vec{k}) . \quad (2.51)$$

También podemos partir de $\langle \vec{k} | \Psi(0) \rangle$, e introducir el operador identidad en la base $|\vec{r}\rangle$:

$$\langle \vec{k} | \Psi(0) \rangle = \int d^3r \langle \vec{k} | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \Psi(0) \rangle , \quad (2.52)$$

o, en la notación convencional,

$$\Psi(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3r e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \Psi(\vec{r}, 0) . \quad (2.53)$$

Las ecuaciones (2.51) y (2.53) dicen que $\Psi(\vec{r}, 0)$ y $\Psi(\vec{k})$ son una la transformada de Fourier de la otra.

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, y están conectadas a través de una transformada de Fourier.

2.7.2. Transformada de Fourier.

Los resultados anteriores muestran que la transformada de Fourier juega un rol de gran importancia en la mecánica cuántica. Por un lado, podemos interpretarla como la superposición de infinitas ondas planas, deslocalizadas, para formar un paquete de ondas localizado, capaz de representar una partícula clásica. Por otro, corresponde simplemente a la operación que permite pasar de una representación de coordenadas a una de momentum. Notemos de hecho, que, por lo tanto, la transformada de Fourier no es sino el operador de cambio de base entre las bases $|\vec{r}\rangle$ y $|\vec{p}\rangle$. Por consiguiente, debería ser unitario. ¿Lo es? ¡Ciertamente! Si \check{U} es el “operador transformada de Fourier”, \check{U}^\dagger se obtiene simplemente cambiando $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \rightarrow e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, que es el único factor complejo. Pero dicho cambio es equivalente a hacer la transformada de Fourier inversa, luego $\check{U}^\dagger = \check{U}^{-1}$.

Dada la importancia de la transformada de Fourier, entonces, recordemos algunas de sus propiedades. Por fijar ideas nos restringiremos a funciones en una dimensión, pero los resultados son fácilmente generalizables a tres.

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 2.3 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 δ de Dirac.
 - Si existe $(\partial/\partial k)^n f(k)$, entonces $x^n f(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$.
 - Si $f(k) \xrightarrow{k \rightarrow \infty} \mathcal{O}(1/k)^{n+1}$, entonces existe $(\partial/\partial x)^n f(x)$.

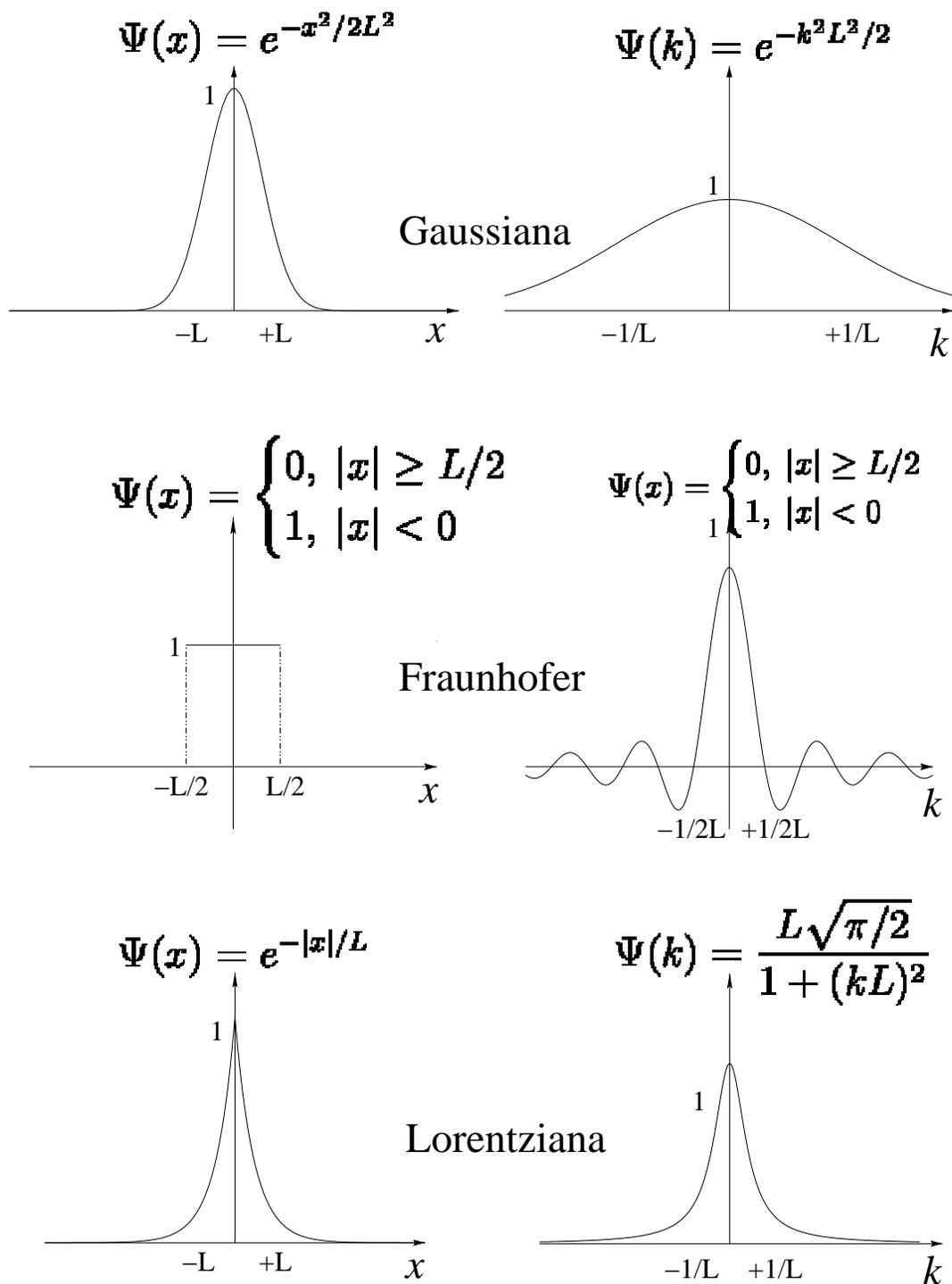


Figura 2.3: Transformada de Fourier de algunas funciones.

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 .

2.7.3. Teorema de Parseval.

Teorema 2.2 Si un paquete de ondas $\Psi(\vec{r}, t)$ está normalizado en cierto instante $t = 0$, entonces estará *siempre* normalizado, o sea,

$$\int d^3r |\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \int d^3r |\Psi(\vec{r}, 0)|^2 = \langle \Psi | \Psi \rangle = \int d^3k |\Psi(\vec{k})|^2 .$$

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.

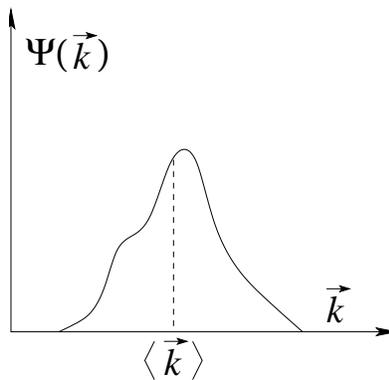


Figura 2.4: Distribución en el espacio de momento de las amplitudes de las distintas componentes de un paquete de ondas.

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 $\check{\mathbf{H}}^\dagger = \check{\mathbf{H}}$.

2.7.4. Propagación de un paquete de ondas.

Volvamos a la ecuación (2.49) que define la función $\Psi(\vec{r}, t)$. Definamos $\Psi(\vec{k}, t)$ por

$$\Psi(\vec{k}, t) \equiv \langle \vec{k} | \Psi \rangle e^{-i\omega(\vec{k})t} .$$

Entonces (2.49) 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

$$\Psi(\vec{k}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3r e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \Psi(\vec{r}, t) .$$

Supongamos que $\Psi(\vec{k})$ tiene la forma mostrada en la figura 2.4, y estudiemos cómo el paquete de ondas se propaga en el tiempo.

Expandamos $\omega(\vec{k})$ en torno a $\langle \vec{k} \rangle$:

$$\omega(\vec{k}) = \omega(\langle \vec{k} \rangle) + \vec{\nabla}_{\vec{k}} \omega(\vec{k}) \Big|_{\vec{k}=\langle \vec{k} \rangle} \cdot (\vec{k} - \langle \vec{k} \rangle) + \dots . \quad (2.54)$$

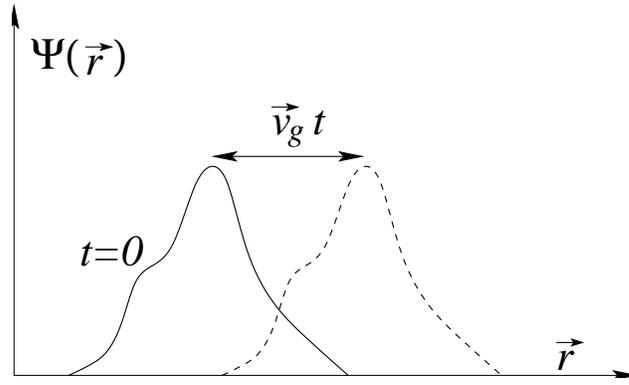


Figura 2.5: Propagación de un paquete de ondas para tiempos no muy grandes.

Usando esta expansión se obtiene para el paquete de ondas la expresión:

$$\begin{aligned}
 \Psi(\vec{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \Psi(\vec{k}) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega(\vec{k}))t} e^{-i(\vec{\nabla}_{\vec{k}}\omega)\cdot(\vec{k}-\langle\vec{k}\rangle)t} \\
 &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i(\vec{\nabla}_{\vec{k}}\omega(\langle\vec{k}\rangle)\langle\vec{k}\rangle-\omega(\langle\vec{k}\rangle))t} \int d^3k e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\vec{\nabla}_{\vec{k}}\omega(\langle\vec{k}\rangle)\vec{k}t)} \Psi(\vec{k}) \\
 &= (\text{factor de fase}) \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k \Psi(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{\nabla}_{\vec{k}}\omega t)} \\
 &= (\text{factor de fase}) \Psi(\vec{r}-\vec{\nabla}_{\vec{k}}\omega(\vec{k})|_{\vec{k}=\langle\vec{k}\rangle}t, 0) ,
 \end{aligned}$$

o sea,

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 \approx |\Psi(\vec{r}-\vec{\nabla}_{\vec{k}}\omega(\vec{k})t, 0)|^2 .$$

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 $\vec{v}_g \cdot t$ (figura 2.5), donde \vec{v}_g es la velocidad de grupo

$$\vec{v}_g \equiv (\vec{\nabla}_{\vec{k}} \omega(\vec{k}))_{\vec{k}=\langle\vec{k}\rangle} .$$

Una vez más advertimos que un paquete de ondas se comporta precisamente como esperamos de una partícula clásica: no sólo está localizado, sino que, a medida que transcurre el tiempo, se desplaza con velocidad constante, como corresponde a una partícula libre. Sin embargo, esta analogía con nuestras experiencias clásicas es posible sólo aproximadamente, pues hemos despreciado términos de orden superior en (2.54). Si mantenemos el término cuadrático en (2.54), entonces la velocidad de grupo depende de la frecuencia, y el paquete de ondas ya no se desplaza como un todo. En otras palabras, el paquete de ondas se *dispersa*.

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

$$\frac{\hbar(\Delta k)^2}{m} \approx \frac{\Delta v}{\Delta x} t ,$$

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.

2.7.5. 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

$$\langle (\Delta \check{\mathbf{r}})^2 \rangle = \langle (\Delta \check{\mathbf{x}})^2 \rangle + \langle (\Delta \check{\mathbf{y}})^2 \rangle + \langle (\Delta \check{\mathbf{z}})^2 \rangle = 3\sigma_0^2 ,$$

y

$$\langle (\Delta \check{\mathbf{k}})^2 \rangle = \frac{3}{4\sigma_0^2} .$$

Conociendo $\Psi(\vec{r}, 0)$ en un cierto instante podemos obtener $\Psi(\vec{r}, t)$ para cualquier instante t :

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \Psi(\vec{k}) e^{-i\omega(\vec{k})t} \\ &= \frac{C'}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3 k e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \hbar k^2 t / (2m))} e^{-\sigma_0^2 k^2} . \end{aligned}$$

Al evaluar esta integral (y también la relación entre C y C') se obtiene el siguiente resultado (Problema 3-3):

$$\Psi(\vec{r}, t) = C \left(\frac{m}{2\pi \hbar i t} \right)^{3/2} \gamma^{-3} \exp \left(\frac{i\beta r^2}{4\sigma_0^2 \gamma} \right) , \quad (2.55)$$

donde β y γ vienen definidos por

$$\beta \equiv \frac{m}{2\hbar t} ,$$

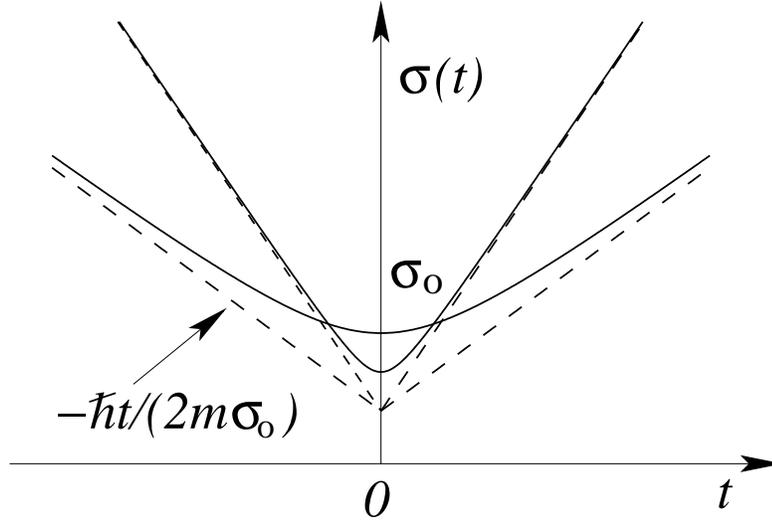


Figura 2.6: Ancho de un paquete de ondas gaussianas en función del tiempo.

y

$$\gamma = \frac{1}{4\sigma_0^2} - i\beta .$$

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

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 \propto \frac{1}{\sigma^3(t)} e^{-r^2/(2\sigma^2(t))} . \quad (2.56)$$

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 (2.56) el ancho $\sigma(t)$ viene dado por (demuéstrelo como Problema 3-4)

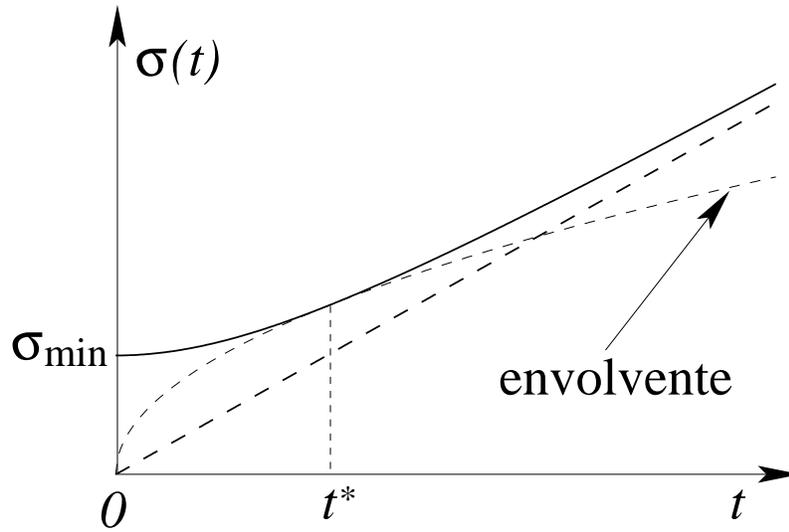
$$\sigma^2(t) = \sigma_0^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma_0^2} .$$

Esta ecuación muestra claramente que el paquete de ondas (para la partícula libre) se dispersa. La figura 2.6 muestra el comportamiento del ancho del paquete de ondas en función del tiempo para varios valores de σ_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 σ_0 , tanto más rápidamente ocurre posteriormente la dispersión (principio de incerteza).

Partiendo con un paquete de ondas gaussianas, ¿qué elección de σ_0 minimiza $\sigma(t)$ a un tiempo $t = t^*$ dado? Para responder esta interrogante derivemos la expresión para $\sigma(t)$ con

Figura 2.7: Gráfico de la envolvente $\sigma(t^*)$.

respecto a σ_0 e igualémosla a cero. De esta manera se obtiene que el valor de σ 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 2.7 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,

$$\frac{\hbar T}{m} \ll r^2 .$$

Multiplicando por $2\pi m/T$ se obtiene

$$\frac{2\pi m}{T} \cdot \frac{\hbar T}{m} = \hbar \ll \frac{2\pi m}{T} r^2 = m r^2 \omega = L = \text{momento angular} ,$$

o sea, se debe tener

$$L \gg \hbar .$$

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 \AA . 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 \AA .
3. Para una partícula microscópica de 10^{-3} g y localizada en una región del tamaño de 0.1 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, $\sim 6 \times 10^{13} \text{ años}$.

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:

$$\text{I) } 2\Gamma = \langle \psi | (\check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{b}} + \check{\mathbf{b}}\check{\mathbf{a}}) | \psi \rangle = 0.$$

$$\text{II) } |\phi\rangle = \lambda|\chi\rangle, \lambda \in \mathbb{C}.$$

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 λ 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

$$\begin{aligned} \langle x | (\check{\mathbf{x}} - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle) | \psi \rangle &= -\frac{2i}{c\hbar} \langle x | (\check{\mathbf{p}}_x - \langle \check{\mathbf{p}}_x \rangle) | \psi \rangle, \\ (x - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle) \langle x | \psi \rangle &= -\frac{2i}{c\hbar} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \langle \check{\mathbf{p}}_x \rangle \right) \langle x | \psi \rangle, \\ (x - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle) \psi(x) &= -\frac{2}{c} \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} + \frac{2i}{c\hbar} \langle \check{\mathbf{p}}_x \rangle \psi(x), \end{aligned}$$

de lo cual se concluye,

$$\frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = -\frac{c}{2} (x - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle) \psi(x) + \frac{i}{\hbar} \langle \check{\mathbf{p}}_x \rangle \psi(x).$$

Ésta 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

$$\psi(x) = A \exp \left\{ -\frac{(x - \langle \check{x} \rangle)^2}{(2\Delta x)^2} + i \frac{\langle \check{p}_x \rangle x}{\hbar} \right\}, \quad (2.57)$$

que corresponde precisamente a una gaussiana. 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*.

2.8. 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 caja de ancho L , con paredes impenetrables. Con este “truco”, el soporte de la función de onda es necesariamente finito, siendo por tanto normalizable. Luego se hace tender $L \rightarrow \infty$.

Otra manera consiste en suponer que la partícula no es libre sino que se encuentra en el interior de una caja de tamaño L e imponer condiciones de borde periódicas, es decir, $\psi(x) = \psi(x + L)$. Este problema es esencialmente equivalente al de paredes impenetrables (del mismo modo que el problema de una cuerda con extremos fijos es esencialmente el mismo que con extremos libres), y por ende nuevamente la función de estado es normalizable. Al final, L se hace infinito.

Una tercera forma de proceder consiste en usar “sucesiones a la delta”. Por ejemplo, supongamos que $|\Psi\rangle = |\vec{r}\rangle$. Entonces

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \int d^3 r' |\vec{r}'\rangle \langle \vec{r}' | \Psi \rangle = \int d^3 r' |\vec{r}'\rangle \delta(\vec{r} - \vec{r}') \\ &= \int d^3 r' |\vec{r}'\rangle \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(\pi\epsilon)^{3/2}} \exp\left(-\frac{|\vec{r}' - \vec{r}|^2}{\epsilon}\right) \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{(\pi\epsilon)^{3/2}} \int d^3 r' |\vec{r}'\rangle \exp\left(-\frac{|\vec{r}' - \vec{r}|^2}{\epsilon}\right). \end{aligned}$$

Pongamos $\epsilon = \epsilon_0$ fijo, muy chico, pero distinto de cero. Entonces

$$|\Psi\rangle \approx \frac{1}{(\pi\epsilon_0)^{3/2}} \int d^3 r' |\vec{r}'\rangle \exp\left(-\frac{|\vec{r}' - \vec{r}|^2}{\epsilon_0}\right).$$

Esta expresión tiene la ventaja de que sí es normalizable, en efecto

$$\begin{aligned}
\langle \Psi | \Psi \rangle &\approx \frac{1}{(\pi\epsilon_0)^3} \int d^3 r' \int d^3 r'' \langle \vec{r}'' | \vec{r}' \rangle \exp\left(-\frac{|\vec{r}' - \vec{r}|^2 + |\vec{r}'' - \vec{r}'|^2}{\epsilon_0}\right) \\
&= \frac{1}{(\pi\epsilon_0)^3} \int d^3 r' \int d^3 r'' \delta(\vec{r}' - \vec{r}'') \exp\left(-\frac{|\vec{r}' - \vec{r}|^2 + |\vec{r}'' - \vec{r}'|^2}{\epsilon_0}\right) \\
&= \frac{1}{(\pi\epsilon_0)^3} \int d^3 r' \exp\left(-\frac{2}{\epsilon_0} |\vec{r}' - \vec{r}|^2\right) = \frac{1}{(\pi\epsilon_0)^3} \int d^3 r' \exp\left(-\frac{2}{\epsilon_0} r'^2\right) \\
&= \frac{4\pi}{\pi^3 \epsilon_0^3} \int_0^\infty dr r^2 \exp\left(-\frac{2}{\epsilon_0} r^2\right) = \frac{4}{\pi^2 \epsilon_0^3} \frac{1}{2} \left(\frac{\epsilon_0^2}{2}\right)^{3/2} \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) = \frac{1}{(2\pi\epsilon_0)^{3/2}}.
\end{aligned}$$

Definamos

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \frac{|\Psi\rangle}{\sqrt{\langle \Psi | \Psi \rangle}} = \left(\frac{2}{\pi\epsilon_0}\right)^{3/4} \int d^3 r' |\vec{r}'\rangle \exp\left(-\frac{|\vec{r}' - \vec{r}|^2}{\epsilon_0}\right).$$

Esta expresión, con $\epsilon_0 \rightarrow 0$, representa bastante bien al vector $|\vec{r}'\rangle$ normalizado a 1.

2.9. La función de Green para la partícula libre.

Consideremos un vector $|\psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$ y expresémoslo en la forma

$$|\psi(t)\rangle = \int d^3 k |\vec{k}\rangle \langle \vec{k} | \psi(t) \rangle.$$

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

$$|\psi(t)\rangle = \int d^3 k e^{-i\omega(k)(t-t')} |\vec{k}\rangle \langle \vec{k} | \psi(t') \rangle.$$

Definimos el *operador de Green* o *propagador* por:

$$\check{\mathbf{G}}_0(t_0) \equiv \int d^3 k e^{-i\omega(k)t_0} |\vec{k}\rangle \langle \vec{k} |,$$

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

$$\begin{aligned}
\langle \vec{r} | \psi(t) \rangle &= \langle \vec{r} | \check{\mathbf{G}}(t-t') |\psi(t')\rangle \\
&= \int d^3 r' \langle \vec{r} | \check{\mathbf{G}}(t-t') | \vec{r}' \rangle \langle \vec{r}' | \psi(t') \rangle.
\end{aligned}$$

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 de 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

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) &\equiv \langle \vec{r} | \psi(t) \rangle = \int d^3 r' G(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \psi(\vec{r}', t') \\ &= G(\vec{r}, t - t') * \psi(\vec{r}, t') , \end{aligned}$$

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

$$\psi(\vec{r}, t) = \int d^3 r' G(\vec{r} - \vec{r}', t) \psi(\vec{r}', 0) . \quad (2.58)$$

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

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}, t) &= \int d^3 r' G(\vec{r} - \vec{r}', t) \delta(\vec{r}' - \vec{r}_0) \\ &= G(\vec{r} - \vec{r}_0, t) , \end{aligned}$$

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 (2.58) 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:

$$\begin{aligned} G(\vec{r} - \vec{r}', t - t') &= \langle \vec{r} | \check{\mathbf{G}}(t - t') | \vec{r}' \rangle \\ &= \langle \vec{r} | \int d^3 k e^{-i\omega(t-t')} | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | \vec{r}' \rangle \\ &= \int d^3 k e^{-i\omega(t-t')} \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | \vec{r}' \rangle \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 k \exp \left(i \left[\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}') + \frac{\hbar k^2}{2m} (t' - t) \right] \right) . \end{aligned}$$

Completando el cuadrado en el numerador, se sigue que

$$G(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = \left(\frac{m}{2\pi\hbar i(t - t')} \right)^{3/2} \exp \left(\frac{im}{2\hbar(t - t')} |\vec{r} - \vec{r}'|^2 \right) ,$$

de donde, finalmente

$$G(\vec{r}, t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{3/2} \exp \left(i \frac{m r^2}{2\hbar t} \right) .$$

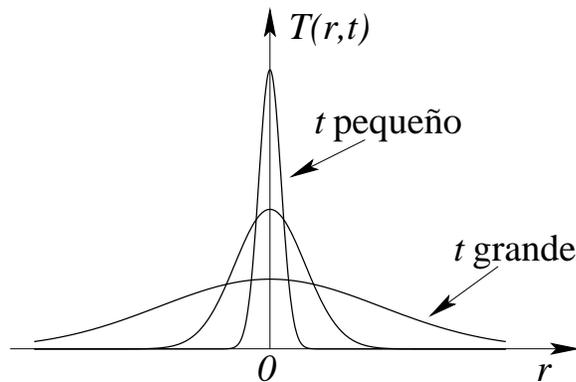


Figura 2.8: Evolución temporal de la temperatura en un sólido al depositar cierta cantidad de energía en $\vec{r} = 0$.

(Analice 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 $\vec{r} = 0$.)

Observemos, finalmente, que hay una cercana analogía entre el problema cuántico de una partícula libre y el problema de difusión del calor. En efecto, si $T(\vec{r}, t)$ es la temperatura en el lugar \vec{r} en el instante t y D es el coeficiente de difusión, la ecuación de difusión del calor en un cuerpo tridimensional homogéneo es

$$D \nabla^2 T(\vec{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} T(\vec{r}, t), \quad (2.59)$$

que es de la misma forma que la ecuación de Schrödinger (segunda derivada espacial, primera derivada temporal). La función de Green para esta ecuación diferencial es

$$G_D(\vec{r}, t) = \left(\frac{1}{4\pi Dt} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{r^2}{4Dt} \right).$$

$G_D(\vec{r}, t)$ 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 2.8.

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 $i\hbar/(2m)$.

2.10. 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:

- a) Consideramos el problema de una partícula sin spin que además no posee “grados internos de libertad”.

- b) 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 $H = T + V$.
- c) 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

$$\begin{aligned} \langle \vec{r} | \check{H} | \Psi(t) \rangle &= i\hbar \langle \vec{r} | \frac{d}{dt} | \Psi(t) \rangle \\ \langle \vec{r} | \check{T} | \Psi(t) \rangle + \langle \vec{r} | V(\check{\vec{r}}) | \Psi(t) \rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{r} | \Psi(t) \rangle , \end{aligned}$$

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,

$$\boxed{\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) .} \quad (2.60)$$

Ésta 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

$$\begin{aligned} \langle \vec{p} | \check{H} | \Psi(t) \rangle &= i\hbar \langle \vec{p} | \frac{d}{dt} | \Psi(t) \rangle \\ \langle \vec{p} | \check{T} | \Psi(t) \rangle + \langle \vec{p} | V(\check{\vec{r}}) | \Psi(t) \rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{p} | \Psi(t) \rangle \\ \frac{p^2}{2m} \langle \vec{p} | \Psi(t) \rangle + \langle \vec{p} | V(\check{\vec{r}}) | \Psi(t) \rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \vec{p} | \Psi(t) \rangle . \end{aligned} \quad (2.61)$$

Investiguemos el significado de la expresión $\langle \vec{p} | V(\check{\vec{r}}) | \Psi(t) \rangle$. Escribimos

$$\langle \vec{p} | V(\check{\vec{r}}) | \Psi(t) \rangle = \int d^3p' \langle \vec{p} | V(\check{\vec{r}}) | \vec{p}' \rangle \langle \vec{p}' | \Psi(t) \rangle . \quad (2.62)$$

Observemos que

$$\begin{aligned} \langle \vec{p} | V(\vec{r}) | \vec{p}' \rangle (2\pi\hbar)^{3/2} &= \int d^3r \langle \vec{p} | \check{V}(\vec{r}) | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \vec{p}' \rangle (2\pi\hbar)^{3/2} \\ &= \int d^3r \langle \vec{p} | \vec{r} \rangle V(\vec{r}) \langle \vec{r} | \vec{p}' \rangle (2\pi\hbar)^{3/2} \\ &= \int d^3r V(\vec{r}) \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}(\vec{p}' - \vec{p}) \cdot \vec{r}\right), \end{aligned}$$

de modo que

$$\langle \vec{p} | V(\vec{r}) | \vec{p}' \rangle (2\pi\hbar)^{3/2} \equiv V(\vec{p} - \vec{p}'), \quad (2.63)$$

donde

$$V(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3r V(\vec{r}) e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}.$$

La función $V(\vec{p})$ es la transformada de Fourier de $V(\vec{r})$, como corresponde, ya que, como hemos visto, la transformada de Fourier es el operador que permite pasar de coordenadas en la base $|\vec{r}\rangle$ a la base $|\vec{p}\rangle$. 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 (2.61) y (2.63) se encuentra que la ecuación de evolución temporal para una función de onda en la representación de momentum, viene dada por la ecuación integrodiferencial

$$\left(\frac{p^2}{2m} - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi(\vec{p}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p' V(\vec{p} - \vec{p}') \Psi(\vec{p}', t). \quad (2.64)$$

Es importante enfatizar que (2.60) y (2.64) son la misma ecuación. Corresponden simplemente a la ecuación vectorial (2.22), resuelta en dos bases distintas, $|\vec{r}\rangle$ y $|\vec{p}\rangle$. $\psi(\vec{r}, t)$ y $\psi(\vec{p}, t)$ son los coeficientes de la solución en cada una de estas bases, y la relación entre una y otra es un operador unitario de cambio de base [la transformada de Fourier, como indican (2.50)–(2.53)].

2.11. 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 ρ , 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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, t) . \quad (2.65)$$

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

$$\begin{aligned} -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\vec{r}, t) &= \left(\langle \vec{r} | \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2m} | \Psi(t) \rangle \right)^\dagger + V(\vec{r}) \Psi^*(\vec{r}, t) \\ &= \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) \right)^\dagger + V(\vec{r}) \Psi^*(\vec{r}, t) \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^*(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \Psi^*(\vec{r}, t) . \end{aligned} \quad (2.66)$$

Multiplicando (2.65) por $\Psi^*(\vec{r}, t)$ y (2.66) 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

$$\begin{aligned} -i\hbar \left(\Psi^*(\vec{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) + \Psi(\vec{r}, t) \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\vec{r}, t) \right) \\ = -\frac{\hbar^2}{2m} \{ \Psi^*(\vec{r}, t) \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) \nabla^2 \Psi^*(\vec{r}, t) \} . \end{aligned} \quad (2.67)$$

El lado izquierdo es simplemente la derivada temporal de la densidad:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t)) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) . \quad (2.68)$$

Por otra parte, el lado derecho se puede escribir de la forma

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\hbar^2}{2m} \{ \Psi^*(\vec{r}, t) \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) \nabla^2 \Psi^*(\vec{r}, t) \} \\
 & = \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla} \cdot \left\{ \Psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, t) - \Psi(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \Psi^*(\vec{r}, t) \right\} = -i\hbar \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) , \quad (2.69)
 \end{aligned}$$

donde \vec{j} viene definido por

$$\begin{aligned}
 \vec{j}(\vec{r}, t) & \equiv -\frac{i\hbar}{2m} \left\{ \Psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, t) - \text{complejo conjugado} \right\} \\
 & = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\Psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, t)) . \quad (2.70)
 \end{aligned}$$

Reemplazando (2.69) y (2.68) en (2.67) se obtiene la *ecuación de continuidad*

$$\boxed{\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) + \vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}, t) = 0 .} \quad (2.71)$$

El vector $\vec{j}(\vec{r}, t)$ corresponde a 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

$$-\frac{d}{dt} \int_{\mathcal{V}} d^3r \rho(\vec{r}, t) = \oint_{S(\mathcal{V})} \vec{j}(\vec{r}, t) \cdot d\vec{A} . \quad (2.72)$$

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} . Así, la ecuación de continuidad, en su forma diferencial (2.71) o integral (2.72), dice que la probabilidad se conserva, en el sentido que no hay sumideros o fuentes de probabilidad, y que cualquier cambio en la densidad de probabilidad en un volumen dado se debe a un flujo de probabilidad a través de la superficie que delimita dicho volumen. Esto, naturalmente, es completamente análogo a otras leyes de conservación, como la conservación de la masa o de la carga eléctrica.

La definición de corriente se puede hacer mas intuitiva al notar que $\check{\mathbf{p}}/m = \check{\mathbf{v}}$ es el “operador velocidad” y por lo tanto

$$\begin{aligned}
 \vec{j}(\vec{r}, t) & = \frac{\hbar}{m} \text{Im}(\Psi^*(\vec{r}, t) \vec{\nabla} \Psi(\vec{r}, t)) \\
 & = \frac{1}{m} \text{Re}(\Psi^*(\vec{r}, t) (-i\hbar \vec{\nabla}) \Psi(\vec{r}, t)) \\
 & = \frac{1}{m} \text{Re} \left(\langle \Psi(t) | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \check{\mathbf{p}} | \Psi(t) \rangle \right) \\
 & = \text{Re} \left(\langle \Psi(t) | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \check{\mathbf{v}} | \Psi(t) \rangle \right) .
 \end{aligned}$$

Usando esta última relación se obtiene, por ejemplo,

$$\int d^3r \vec{j}(\vec{r}, t) = \langle \Psi | \check{\vec{v}} | \Psi \rangle ,$$

lo que tiene sentido, ya que \vec{j} es una densidad de corriente, de modo que su integral es una corriente.

Podemos graficar los resultados de esta sección escribiendo explícitamente la densidad y la corriente de probabilidad para una onda plana:

$$\phi_{\vec{p}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \exp\left(i \frac{\vec{p} \cdot \vec{r}}{\hbar} - i\omega t\right) .$$

En este caso, la densidad de probabilidad es

$$\rho(\vec{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} ,$$

una constante, como debe ocurrir para una onda plana, completamente deslocalizada espacialmente, y la densidad de corriente es

$$\vec{j}(\vec{r}, t) = \frac{\vec{p}}{m} \rho(\vec{r}, t) = \vec{v} \rho(\vec{r}, t) ,$$

un resultado esperable.

2.12. 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 δt se tiene

$$|\Psi(\delta t)\rangle = |\Psi(0)\rangle + \delta t \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(0)\rangle ,$$

o sea,

$$|\Psi(\delta t)\rangle = \left[1 - \frac{i}{\hbar} \check{\mathbf{H}} \delta t \right] |\Psi(0)\rangle . \quad (2.73)$$

Observemos que la expresión entre paréntesis es un operador cuyo efecto es trasladar temporalmente el vector $|\psi\rangle$, desde $t = 0$ a $t = \delta t$. 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 $N \rightarrow \infty$ se sigue que

$$|\Psi(t)\rangle = \check{\mathbf{G}}(t)|\Psi(0)\rangle ,$$

con el *Operador de Green* o *Propagador* dado por

$$\check{\mathbf{G}}(t) = e^{-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar} . \quad (2.74)$$

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.

2.13. 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 2.3 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. Éste 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

$$\boxed{\frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{F}} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{H}}] \rangle + \left\langle \frac{\partial \check{\mathbf{F}}}{\partial t} \right\rangle} . \quad (2.75)$$

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 (2.75). De hecho, este teorema establece de manera precisa la conexión que hay entre la teoría cuántica y la clásica. En Mecánica Cuántica las partículas se pueden comportar como ondas. Su evolución está determinada por la ecuación vectorial (2.22), o equivalentemente por la ecuación de Schrödinger (2.60). ¿Cómo entender que uno pueda, sin embargo, describir la evolución de una partícula a través de una ecuación clásica, a través de las leyes de Newton, en otras palabras? En (2.75) tenemos la clave: la evolución de la función de onda completa es descrita por las ecuaciones cuánticas, pero al tomar *promedios*, dichos promedios satisfacen la ecuación de evolución clásica.

Antes de estudiar éstas y otras 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

$$\begin{aligned} [\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{H}}] &= [\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{T}}] = \frac{1}{2m} [\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}^2] = \frac{i\hbar}{2m} \vec{\nabla}_{\check{\mathbf{p}}} \check{\mathbf{p}}^2 = \frac{i\hbar}{m} \check{\mathbf{p}} , \\ [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{H}}] &= [\check{\mathbf{p}}, V(\check{\mathbf{r}})] = -i\hbar \vec{\nabla} V(\check{\mathbf{r}}) = i\hbar \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}) , \end{aligned}$$

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 $\check{\mathbf{F}} = \check{\mathbf{p}}$, entonces

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{p}} \rangle = \left\langle [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{H}}] \right\rangle = i\hbar \langle -\vec{\nabla} V(\check{\mathbf{r}}) \rangle ,$$

es decir,

$$\frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{p}} \rangle = \langle \check{\mathbf{F}} \rangle . \quad (2.76)$$

Otra forma de escribir esta última ecuación se obtiene notando que

$$\check{\mathbf{F}} = -\check{\nabla}V(\check{\mathbf{r}}) = -\check{\nabla}\mathbf{H}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) ,$$

luego

$$\frac{d}{dt}\langle\check{\mathbf{p}}\rangle = \langle-\check{\nabla}\check{\mathbf{H}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}})\rangle . \quad (2.77)$$

(II) Usando el teorema con $\check{\mathbf{F}} = \check{\mathbf{r}}$ se obtiene

$$i\hbar\frac{d}{dt}\langle\check{\mathbf{r}}\rangle = \langle[\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{H}}]\rangle = \frac{i\hbar}{m}\langle\check{\mathbf{p}}\rangle ,$$

o bien,

$$\frac{d}{dt}\langle\check{\mathbf{r}}\rangle = \frac{\langle\check{\mathbf{p}}\rangle}{m} . \quad (2.78)$$

Otra forma de escribir esta ecuación clásica se obtiene notando que

$$\frac{\check{\mathbf{p}}}{m} = \check{\nabla}_{\check{\mathbf{p}}}\check{\mathbf{T}} = \check{\nabla}_{\check{\mathbf{p}}}\check{\mathbf{H}} .$$

Luego

$$\frac{d}{dt}\langle\check{\mathbf{r}}\rangle = \langle\check{\nabla}_{\check{\mathbf{p}}}\check{\mathbf{H}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}})\rangle . \quad (2.79)$$

Observemos que las ecuaciones (2.77) y (2.79) no son sino las *ecuaciones de Hamilton* para un sistema clásico. Nuevamente, vemos que, a pesar de la descripción cuántica subyacente, los promedios del momentum y la posición satisfacen las ecuaciones clásicas usuales.

Combinando las ecuaciones (2.76) y (2.78) obtenemos una ecuación análoga a la 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

$$\langle\check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}})\rangle \approx \check{F}(\langle\check{\mathbf{r}}\rangle) . \quad (2.80)$$

La última relación es exacta para fuerzas constantes y armónicas. De cumplirse (2.80) se tiene que el valor esperado de la posición $\langle\check{\mathbf{r}}(t)\rangle$ 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 $\check{\mathbf{F}} = \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}}$. Obtenemos

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}\langle\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}}\rangle &= \langle[\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{H}}]\rangle \\ &= i\hbar 2\langle\check{\mathbf{T}}\rangle + i\hbar\langle\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{F}}\rangle , \end{aligned}$$

o sea,

$$\frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}} \rangle = \langle 2\check{\mathbf{T}} \rangle + \langle \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{F}} \rangle .$$

Esta relación corresponde al *Teorema del virial*.

Consideremos ahora un estado cuya dependencia temporal es de la forma

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle e^{-iEt/\hbar} .$$

Un tal estado se llama *estacionario* (ver Definición 2.2. Para estados estacionarios el valor esperado de cualquier operador $\check{\mathbf{A}}$ que no depende explícitamente del tiempo, es independiente del tiempo. En efecto

$$\begin{aligned} \langle \check{\mathbf{A}} \rangle &= \langle \psi(t) | \check{\mathbf{A}} | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | e^{iEt/\hbar} \check{\mathbf{A}} e^{-iEt/\hbar} | \psi(0) \rangle \\ &= \langle \psi(0) | \check{\mathbf{A}} | \psi(0) \rangle = \text{independiente de } t. \end{aligned}$$

Para estados estacionarios la derivada temporal de $\langle \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}} \rangle = 0$ y, por consiguiente, el teorema del virial queda:

$$2\langle \check{\mathbf{T}} \rangle = \langle \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\nabla} V(\check{\mathbf{r}}) \rangle .$$

e) Teorema general de conservación. Si un operador $\check{\mathbf{A}} = \check{\mathbf{A}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}})$ conmuta con $\check{\mathbf{H}}$, entonces $\langle \check{\mathbf{A}} \rangle$ es constante en el tiempo. En efecto

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{A}} \rangle = \langle [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{H}}] \rangle = \langle \check{\mathbf{0}} \rangle = 0 ,$$

luego,

$$\text{Si } [\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{H}}] = 0 \text{ entonces } \frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{A}} \rangle = 0 .$$

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 $\check{\mathbf{H}}$ se obtiene considerando las distintas constantes de movimiento del problema, pero sólo reteniendo aquéllas que conmutan entre sí. Y así, podremos encontrar un conjunto de rótulos para etiquetar unívocamente una base del espacio vectorial estableciendo las constantes de movimiento *clásicas*.

2.14. 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:

$$\langle \check{\mathbf{F}} \rangle = \langle \psi_S(t) | \check{\mathbf{F}}_S | \psi_S(t) \rangle = \langle \psi_H | \mathbf{F}(t)_H | \psi_H \rangle . \quad (2.81)$$

Este resultado puede parecer una trivialidad, pero apunta a dos maneras distintas de formular la Mecánica Cuántica. Hasta el momento, hemos considerado que un sistema físico está representado por estados $|\psi(t)\rangle$ dependientes del tiempo, y cuya evolución está dada por (2.22). Sobre dichos estados pueden actuar operadores independientes del tiempo. Este modo de plantear la teoría se conoce como *cuadro de Schrödinger*.

Alternativamente, la relación (2.81) nos dice que podríamos formular todo en términos de estados $|\psi_H\rangle$ *independientes del tiempo*, sobre los cuales actúan *operadores dependientes del tiempo*. Los promedios, que es lo relevante clásicamente, no se verían afectados. Esta formulación corresponde al *cuadro de Heisenberg*.

¿Cuál es la ecuación dinámica que nos da la evolución temporal de los operadores en el cuadro de Heisenberg? Para encontrarla evaluemos

$$\frac{d}{dt} \check{\mathbf{F}}_H(t) = \frac{d}{dt} [\exp(+i\check{\mathbf{H}}t/\hbar) \check{\mathbf{F}}_S \exp(-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar)] .$$

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*

$$i\hbar \frac{d}{dt} \check{\mathbf{F}}_H(t) = [\check{\mathbf{F}}_H, \check{\mathbf{H}}] .$$

Observamos que en el cuadro de Heisenberg la analogía con la Mecánica Clásica es evidente a nivel de operadores, pues éstos satisfacen la misma ecuación de evolución clásica que los observables del sistema, reemplazando el conmutador por el corchete de Poisson. Esto contrasta con el cuadro de Schrödinger, donde la formulación clásica se recupera sólo al hacer promedios (Teorema de Ehrenfest).

En la siguiente tabla se resumen las principales características de ambos cuadros:

	Cuadro de Schrödinger	Cuadro de Heisenberg
Operadores	$\check{\mathbf{F}}_S = \check{\mathbf{F}}$ Los operadores son fijos <i>No</i> 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, <i>No</i> 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 2.8 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

$$i\hbar\frac{d}{dt}\check{\mathbf{F}}_H(t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\check{\mathbf{F}}_H(t) + [\check{\mathbf{F}}_H, \check{\mathbf{H}}] .$$

2.15. 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.

2.16. 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

$$|\vec{r}_0\rangle \longrightarrow \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} |\vec{r}_0\rangle = |T_{\vec{a}} \vec{r}_0\rangle = |\vec{r}_0 + \vec{a}\rangle . \quad (2.82)$$

Por supuesto, se tiene que

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{r}} |T_{\vec{a}} \vec{r}_0\rangle &= \check{\mathbf{r}} \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} |\vec{r}_0\rangle = \check{\mathbf{r}} |T_{\vec{a}} \vec{r}_0\rangle = \check{\mathbf{r}} |\vec{r}_0 + \vec{a}\rangle = (\vec{r}_0 + \vec{a}) |\vec{r}_0 + \vec{a}\rangle \\ &= T_{\vec{a}} \vec{r}_0 |T_{\vec{a}} \vec{r}_0\rangle = (T_{\vec{a}} \vec{r}_0) \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} |\vec{r}_0\rangle . \end{aligned}$$

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

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}^{-1} \check{\mathbf{r}} \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} = (\check{\mathbf{r}} + \vec{a} \check{\mathbf{1}}) . \quad (2.83)$$

Hemos demostrado que si $\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}$ es un operador de traslación en \mathcal{H} entonces se cumple (2.83). Recíprocamente, mostremos ahora que si un operador cumple con (2.83) entonces $\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}$ es un operador de traslación en \mathcal{H} . Hay que mostrar que si (2.83) 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 (2.83) 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 $\check{U}_{\vec{a}}|\vec{r}_0\rangle = |\vec{r}_0 + \vec{a}\rangle$, en concordancia con la relación (2.82)). En otras palabras, la relación (2.83) es una condición necesaria y suficiente para que $\check{U}_{\vec{a}}$ sea un *operador de traslaciones*.

Encontramos ahora una expresión explícita para el operador $\check{U}_{\vec{a}}$. Para ello consideremos primero las traslaciones infinitesimales $\delta\vec{a}$:

$$\check{U}_{\delta\vec{a}}|\vec{r}_0\rangle = |\vec{r}_0 + \delta\vec{a}\rangle. \quad (2.84)$$

Proposición 2.9 Si $\delta\vec{a}$ es un vector infinitesimal entonces $\check{U}_{\delta\vec{a}}$ viene dado por:

$$\check{U}_{\delta\vec{a}} = \check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}. \quad (2.85)$$

Demostración

I) Mostremos primero que $\check{U}_{\delta\vec{a}}$ es unitario.

$$\begin{aligned} \check{U}_{\delta\vec{a}}\check{U}_{\delta\vec{a}}^\dagger &= \left(\check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}\right) \left(\check{\mathbf{1}} + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}^\dagger\right) \\ &= \check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}} + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}^\dagger + \mathcal{O}((\delta\vec{a})^2). \end{aligned}$$

Como $\delta\vec{a}$ es infinitesimal, los términos del orden $(\delta\vec{a})^2$ se desprecian, quedando que es unitario

$$\check{U}_{\delta\vec{a}}\check{U}_{\delta\vec{a}}^\dagger = \check{\mathbf{1}}.$$

II) Mostremos ahora que $\check{U}_{\delta\vec{a}}$ cumple con (2.83).

$$\begin{aligned} \check{U}_{\delta\vec{a}}^{-1}\check{\mathbf{r}}\check{U}_{\delta\vec{a}} &= \check{U}_{\delta\vec{a}}^\dagger\check{\mathbf{r}}\check{U}_{\delta\vec{a}} \\ &= \left(\check{\mathbf{1}} + \frac{i}{\hbar}\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}\right)\check{\mathbf{r}}\left(\check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar}\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}\right) \\ &= \check{\mathbf{r}} + \frac{i}{\hbar}(\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}})\check{\mathbf{r}} - \frac{i}{\hbar}\check{\mathbf{r}}(\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}) \\ &= \check{\mathbf{r}} + \frac{i}{\hbar}[\delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{r}}]. \end{aligned}$$

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, habíamos encontrado [ver (2.73)]:

$$|\psi(t + \delta\tau)\rangle = \left(\check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \delta\tau \check{\mathbf{H}} \right) |\psi(t)\rangle ,$$

donde $\delta\tau$ es un desplazamiento temporal infinitesimal. Esta ecuación se compara con

$$|\vec{r}_0 + \delta\vec{a}\rangle = \left(\check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}} \right) |\vec{r}_0\rangle . \quad (2.86)$$

Podemos decir que $\check{\mathbf{H}}$ es el *generador* de las traslaciones temporales infinitesimales; por su parte $\check{\mathbf{p}}$ es el generador de las traslaciones espaciales infinitesimales. Observemos, incidentalmente, que este resultado es consistente con uno mucho más familiar: en representación de coordenadas, y en una dimensión (2.86) es

$$\psi(\vec{r}_0 + \delta\vec{a}) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a} \cdot -i\hbar \vec{\nabla} \right) \psi(\vec{r}_0) = \left(1 - \delta\vec{a} \cdot \vec{\nabla} \right) \psi(\vec{r}_0) ,$$

que no es sino el primer término de una expansión de Taylor.

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 (2.83). Definamos

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} \equiv \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}}\right) . \quad (2.87)$$

Por ser $\check{\mathbf{p}}$ un operador autohermítico, es inmediato que $\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}$, definido por (2.87), es un operador unitario. Demostremos que este operador satisface la relación (2.83). 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:

$$\check{U}_{\vec{a}}^{-1} \check{\mathbf{r}} \check{U}_{\vec{a}} = \check{U}_{\vec{a}}^{-1} \left(\check{U}_{\vec{a}} \check{\mathbf{r}} + \vec{a} \check{U}_{\vec{a}} \right) = \check{\mathbf{r}} + \vec{a} \check{\mathbf{1}} .$$

Concluimos que el operador $\check{U}_{\vec{a}}$ dado por (2.87) 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 2.1 Un operador $\check{\mathbf{F}}$ se dice que es *invariante* ante un operador unitario \check{U} si

$$\check{U}^{-1} \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) \check{U} = \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) .$$

En otras palabras, si $\check{\mathbf{F}}$ es invariante ante \check{U} entonces $\check{\mathbf{F}}$ y \check{U} conmutan.

Proposición 2.10 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

$$\begin{aligned} 0 &= \check{\mathbf{F}} \check{U}_{\delta\vec{a}} - \check{U}_{\delta\vec{a}} \check{\mathbf{F}} \\ &= \check{\mathbf{F}} \left(\check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}} \right) - \left(\check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a} \cdot \check{\mathbf{p}} \right) \check{\mathbf{F}} \\ &= \check{\mathbf{F}} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a} \cdot (\check{\mathbf{F}} \check{\mathbf{p}}) - \check{\mathbf{F}} + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{a} \cdot (\check{\mathbf{p}} \check{\mathbf{F}}) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \delta\vec{a} \cdot (\check{\mathbf{F}} \check{\mathbf{p}} - \check{\mathbf{p}} \check{\mathbf{F}}) , \end{aligned}$$

y finalmente

$$\check{\mathbf{F}}\check{\mathbf{p}} - \check{\mathbf{p}}\check{\mathbf{F}} = [\check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{p}}] = 0 .$$

Resumen:

Si $\check{\mathbf{H}}$ es invariante bajo traslaciones, entonces

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}^{-1} \check{\mathbf{H}} \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} = \check{\mathbf{H}} \iff [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}] = 0 \iff [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{p}}] = 0 \implies \frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{p}} \rangle = 0 .$$

Las relaciones anteriores constituyen el equivalente cuántico del *Teorema de Noether* en Mecánica Clásica: Si $\check{\mathbf{H}}$ es invariante ante el operador de traslaciones espaciales, entonces el valor esperado del operador canónico conjugado respectivo (el operador de momentum) se conserva. El mismo análisis se puede realizar para cualquier par de variables clásicas canónicamente conjugadas. De hecho, en un capítulo posterior repetiremos lo hecho en esta sección, para un Hamiltoniano invariante bajo rotaciones. En ese caso, la cantidad conservada será el valor esperado del momento angular.

Finalmente note que para los operadores de traslación $\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}$ se cumple que

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} \check{\mathbf{U}}_{\vec{b}} = \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}+\vec{b}} = \check{\mathbf{U}}_{\vec{b}+\vec{a}} = \check{\mathbf{U}}_{\vec{b}} \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}} ,$$

de modo que los operadores de traslación conmutan entre sí. Es lo esperado: clásicamente, trasladar un sistema en \vec{a} y luego en \vec{b} es equivalente a trasladarlo primero en \vec{b} y luego en \vec{a} . Este hecho se preserva a nivel cuántico.

Además, la relación anterior nos muestra que el producto de dos operadores de traslación es un nuevo operador de traslación, de modo que el conjunto de los operadores

$$\{\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}\}_{\vec{a} \in \mathbb{R}^3}$$

forma un *grupo*. En el caso en que el Hamiltoniano es invariante ante dicho grupo, éste se denomina *grupo de simetría*. En este caso particular el grupo es un grupo conmutativo isomorfo al grupo aditivo en \mathbb{R}^3 .

2.17. Estados estacionarios.

En lo que queda de este capítulo consideraremos sistemas descritos por un operador Hamiltoniano $\check{\mathbf{H}}$ que no dependa explícitamente del tiempo.

Definición 2.2 Una función de estado es *estacionaria* si la dependencia temporal es factorizable de la manera

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(0)\rangle e^{-iEt/\hbar} = |\psi\rangle e^{-iEt/\hbar} . \quad (2.88)$$

Los estados $|\psi(t)\rangle$ evolucionan según la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \check{\mathbf{H}} |\psi(t)\rangle . \quad (2.89)$$

Reemplazando (2.88) en (2.89) se obtiene

$$\begin{aligned}\check{\mathbf{H}}|\psi\rangle e^{-iEt/\hbar} &= i\hbar \frac{d}{dt}|\psi\rangle e^{-iEt/\hbar} \\ &= i\hbar|\psi\rangle \left(-\frac{i}{\hbar}E\right) e^{-iEt/\hbar},\end{aligned}$$

o sea, cancelando el número complejo $e^{-iEt/\hbar}$, se obtiene

$$\boxed{\check{\mathbf{H}}|\psi\rangle = E|\psi\rangle}, \quad (2.90)$$

ecuación que se conoce con el nombre “Ecuación de Schrödinger tiempo independiente” o ecuación de autovalores de energía. La ecuación (2.90) representa un problema de valores propios. Como el Hamiltoniano es hermítico ($\check{\mathbf{H}} = \check{\mathbf{H}}^\dagger$) los autovalores, es decir la energía E , son reales. Una vez obtenido el espectro de energía, basta multiplicar por $e^{-iEt/\hbar}$ para tener la evolución temporal de los autovectores.

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 (aun 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,

$$\begin{aligned}\check{\mathbf{H}}|\phi_{E_n}\rangle &= E_n|\phi_{E_n}\rangle, \\ |\phi_{E_n}(t)\rangle &= |\phi_{E_n}\rangle e^{-iE_n t/\hbar}.\end{aligned} \quad (2.91)$$

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 (2.91). 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 $A_{nm} \equiv \langle \phi_{E_n} | \check{\mathbf{A}} | \phi_{E_m} \rangle$.

2.17.1. 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

$$\check{\mathbf{G}}(t) = \sum_n |\phi_{E_n}\rangle e^{-iE_n t/\hbar} \langle \phi_{E_n} |, \quad (2.92)$$

se encuentra que

$$|\Psi(t)\rangle = \check{\mathbf{G}}(t) |\Psi(0)\rangle.$$

Con esta definición, la función de Green queda

$$\begin{aligned}G(\vec{r}, \vec{r}', t) &= \langle \vec{r} | \check{\mathbf{G}}(t) | \vec{r}' \rangle \\ &= \sum_n \langle \vec{r} | \phi_{E_n} \rangle e^{-iE_n t/\hbar} \langle \phi_{E_n} | \vec{r}' \rangle.\end{aligned} \quad (2.93)$$

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 (2.92) coincide con el resultado obtenido en la sección 2.12. Se tiene

$$\begin{aligned} \check{G}(t) &= \sum_n | \phi_{E_n} \rangle e^{-iE_n t/\hbar} \langle \phi_{E_n} | \\ &= \sum_n e^{-iE_n t/\hbar} | \phi_{E_n} \rangle \langle \phi_{E_n} | \\ &= \sum_n e^{-i\check{H}t/\hbar} | \phi_{E_n} \rangle \langle \phi_{E_n} | \\ &= e^{-i\check{H}t/\hbar} \sum_n | \phi_{E_n} \rangle \langle \phi_{E_n} | = e^{-i\check{H}t/\hbar} , \end{aligned}$$

resultado que coincide con la ecuación (2.74).

2.17.2. 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. La ecuación de autovalores es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_E(x) = E\psi_E(x) ,$$

con soluciones

$$\psi_E(x) = e^{ikx}, \quad k = \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}.$$

En este caso el espectro es continuo: todos los valores positivos de E son autovalores del Hamiltoniano. La degeneración de todos los autovalores es dos. Matemáticamente, esto viene de que la ecuación de autovalores es una ecuación cuadrática para k . Las soluciones tiempo dependientes asociadas son las ondas planas $\Psi_E(x, t) = \psi_E(x)e^{-iEt/\hbar}$,

$$\Psi_E^+(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} = \Psi_E^+(x) e^{-i\omega t},$$

y

$$\Psi_E^-(x, t) = e^{i(-kx - \omega t)} = \Psi_E^-(x) e^{-i\omega t}.$$

Cada una de ellas representa ondas que viajan en la dirección $+\hat{x}$ y $-\hat{x}$, respectivamente. Son dos autofunciones linealmente independientes correspondientes al mismo autovalor $E = (\hbar k)^2/2m$ (como debe ocurrir si el espectro es doblemente degenerado). A pesar de ser funciones complejas, son éstas las funciones que deben usarse para representar ondas planas con corriente no nula.

Como demostramos recién, también podemos encontrar dos funciones reales, linealmente independientes, y autofunciones de $\check{\mathbf{H}}$ para el mismo autovalor E (pero de corriente nula). Una elección posible es:

$$\Psi_E^{(1)} = \Psi_E^+ + \Psi_E^-,$$

y

$$\Psi_E^{(2)} = i (\Psi_E^+ - \Psi_E^-).$$

2.18. Degeneración del espectro y simetrías.

En esta sección repetiremos algunos de los desarrollos hechos en la sección 2.4, ilustrando los resultados con un ejemplo concreto.

Comenzamos recordando un teorema que se demostró en la introducción matemática.

Teorema 2.4 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

$$\check{\mathbf{U}}_\lambda \equiv \exp(-i\lambda\check{\mathbf{A}}/\hbar), \quad \lambda \in \mathbb{R}.$$

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 $\{\check{U}_\lambda\}_{\lambda \in \mathbb{R}} \equiv G_{\check{H}}$ forman un grupo ².

Los operadores $\{\check{U}_\lambda\}$ están estrechamente relacionados con la degeneración del espectro de energía, es decir, con la existencia de varias autofunciones del Hamiltoniano \check{H} que tienen el mismo autovalor de energía. En efecto, sea $|\psi_E\rangle$ un autoestado del Hamiltoniano con autovalor E . Mostremos que entonces $\check{U}_\lambda|\psi_E\rangle$ también es un autovector de \check{H} con el mismo autovalor. En efecto (usando el hecho que \check{U}_λ conmuta con \check{H}):

$$\check{H} (\check{U}_\lambda |\psi_E\rangle) = \check{U}_\lambda \check{H} |\psi_E\rangle = \check{U}_\lambda E |\psi_E\rangle = E (\check{U}_\lambda |\psi_E\rangle) .$$

Sin embargo, en general, no todos los vectores que se obtienen de un vector $|\psi_E\rangle$ aplicando el operador \check{U}_λ 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{H} y \check{A} , o sea,

$$\check{H}|E, a\rangle = E|E, a\rangle \quad \check{A}|E, a\rangle = a|E, a\rangle .$$

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{B} que conmuta simultáneamente con \check{A} y \check{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 $\check{H}, \check{A}, \check{B}, \check{C}, \dots$ forman un *conjunto completo de operadores compatibles*. Notamos que pueden existir operadores que conmuten con \check{H} , pero que deben excluirse del 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:

$$\check{H} = \frac{\check{p}_x^2}{2m} .$$

Para cada valor positivo E , la ecuación de autovalores

$$\check{H}|\psi_E\rangle = E|\psi_E\rangle$$

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{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

$$\check{A} = \frac{\check{k}_x}{|k_x|} = \frac{\check{p}_x}{|p_x|} .$$

²El grupo $G_{\check{H}}$ puede tener varios “generadores”, es decir, varios operadores \check{A}, \check{B} , etc., que conmutan con \check{H} . En tal caso los operadores unitarios son $\check{U}(\lambda_1, \lambda_2, \dots) = \exp[-i(\lambda_1 \check{A} + \lambda_2 \check{B} + \dots)]$.

En efecto, $[\check{\mathbf{A}}, \check{\mathbf{H}}] = 0$ y los autovectores comunes a $\check{\mathbf{A}}$ y $\check{\mathbf{H}}$ son

$$|\psi_E^+\rangle \equiv |E, +\rangle = |\psi_E^{(1)}\rangle + i|\psi_E^{(2)}\rangle \quad y \quad |\psi_E^-\rangle \equiv |E, -\rangle = |\psi_E^{(1)}\rangle - i|\psi_E^{(2)}\rangle .$$

En la representación de coordenadas estos estados corresponden a las ondas planas

$$\langle x | \psi_E^+ \rangle = e^{+ik_x x} \quad y \quad \langle x | \psi_E^- \rangle = e^{-ik_x x} .$$

Los estados $|E, +\rangle$ y $|E, -\rangle$ son autovectores de $\check{\mathbf{A}}$ y $\check{\mathbf{H}}$ y se tiene

$$\check{\mathbf{A}}|E, +\rangle = +|E, +\rangle \quad y \quad \check{\mathbf{A}}|E, -\rangle = -|E, -\rangle ,$$

$$\check{\mathbf{H}}|E, +\rangle = E|E, +\rangle \quad y \quad \check{\mathbf{H}}|E, -\rangle = E|E, -\rangle .$$

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 $|\psi_E^{(1)}\rangle$?

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{U}}_\lambda |\psi_E^{(1)}\rangle &= e^{-i\lambda\check{\mathbf{A}}/\hbar} |\psi_E^{(1)}\rangle \\ &= e^{-i\lambda\check{\mathbf{A}}/\hbar} \frac{1}{2} (|\psi_E^+\rangle + |\psi_E^-\rangle) \\ &= \frac{1}{2} [e^{-i\lambda\check{\mathbf{A}}/\hbar} |E, +\rangle + e^{-i\lambda\check{\mathbf{A}}/\hbar} |E, -\rangle] \\ &= \frac{1}{2} (e^{-i\lambda/\hbar} |E, +\rangle + e^{i\lambda/\hbar} |E, -\rangle) . \end{aligned}$$

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.*

2.19. 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:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + k^2 - U(x) \right] \psi(x) = 0 . \quad (2.94)$$

Definición 2.3 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 (2.94) 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:

$$\psi_2\psi_1'' = (U - k^2)\psi_2\psi_1 \quad \text{y} \quad \psi_1\psi_2'' = (U - k^2)\psi_1\psi_2 .$$

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 (2.94) y si el Wronskiano es cero en un punto, entonces $\psi_1(x)$ y $\psi_2(x)$ son linealmente dependientes.

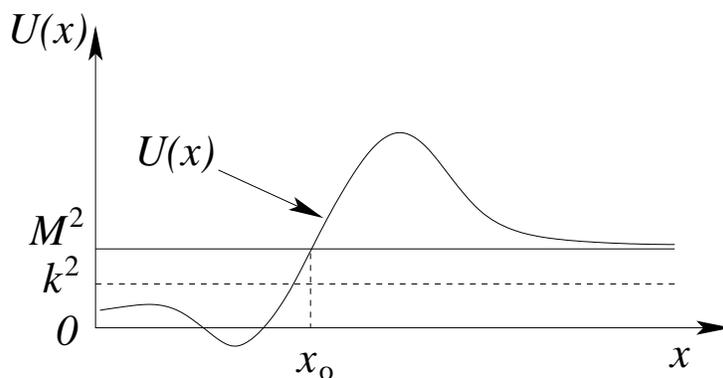


Figura 2.9: Representación esquemática de la energía potencial y cinética para el caso en que $U(x) - k^2 \geq M^2 > 0 \quad \forall x > x_0$.

2.20. 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 2.9). Escribamos nuevamente la ecuación de Schrödinger en la forma (2.94):

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - (U(x) - k^2) \right] \psi(x) = 0 .$$

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 (2.94) una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden, las dos funciones ϕ_1 y ϕ_2 forman un conjunto completo de soluciones. Toda solución de la ecuación (2.94) puede escribirse como combinación lineal de tales funciones.

Las soluciones $\phi_1(x)$ y $\phi_2(x)$ tienen las siguientes propiedades:

- I) $\forall x > x_0$, $\phi_1(x) > 0$ y $\phi_2(x) > 0$, pues, de acuerdo a la ecuación diferencial (2.94), las segundas derivadas de la solución tienen el mismo signo que la función (ver también figura 2.10).
- 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

$$\phi_1'' \geq M^2 \phi_1 \quad \forall x > x_0 \quad \text{y} \quad \phi_2'' \geq M^2 \phi_2 \quad \forall x > x_0 .$$

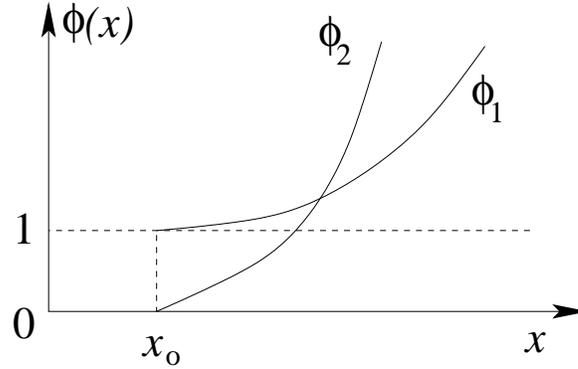


Figura 2.10: Comportamiento de las funciones $\phi_1(x)$ y $\phi_2(x)$ para $x > x_0$.

Consideremos ahora las soluciones particulares de la ecuación $u'' = M^2u$, 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 ϕ_1 , ϕ_2 satisfacen las mismas condiciones de borde en $x = x_0$ y las segundas derivadas de ϕ_1 , ϕ_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 $x > x_0$, ϕ_1 y ϕ_2 crecen al menos como $\frac{1}{2} \exp(Mx)$.

III) El Wronskiano $W(\phi_1, \phi_2)(x) = 1$.

Demostración ϕ_1 y ϕ_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 (2.94) 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 Γ (ver figura 2.11).

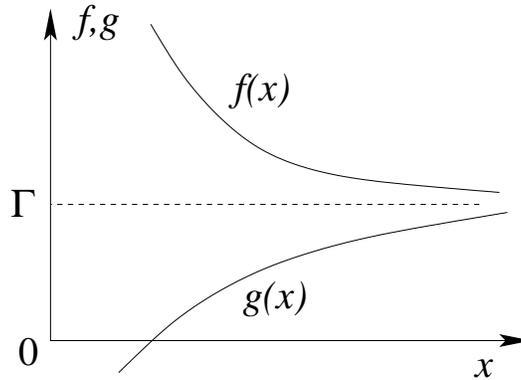


Figura 2.11: Comportamiento de las funciones $f(x)$ y $g(x)$ para $x \rightarrow \infty$.

Resumiendo: Existe $\Gamma \in \mathbb{C}$ tal que $\lim_{x \rightarrow \infty} f(x) = \lim_{x \rightarrow \infty} g(x) = \Gamma$.

Es claro que $g(x) < \Gamma < f(x)$. Restando Γ , se obtiene

$$g(x) - \Gamma < 0 < f(x) - \Gamma . \quad (2.95)$$

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 (2.95) se deduce que

$$-\frac{1}{\phi_2 \phi_2'} < g(x) - \Gamma < 0 < f(x) - \Gamma < \frac{1}{\phi_2 \phi_2'} . \quad (2.96)$$

Consideremos ahora la solución particular de (2.94) 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 (2.96) 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 ∞ en forma exponencial, luego $\Phi(x)$ es positivo y tiende a cero exponencialmente. Hemos encontrado entonces la solución con sentido físico para la ecuación de Schrödinger. Cualquier otra solución de (2.94) diverge, y por tanto no es normalizable. 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 (2.94) 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 (2.94), 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

$$\Psi(x) = A_0 \operatorname{sen}(\sqrt{k^2 - U_0}x + \phi_0) ,$$

donde A_0 y ϕ_0 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_0 , con $U_0 < U^-$ (ver figura 2.12).

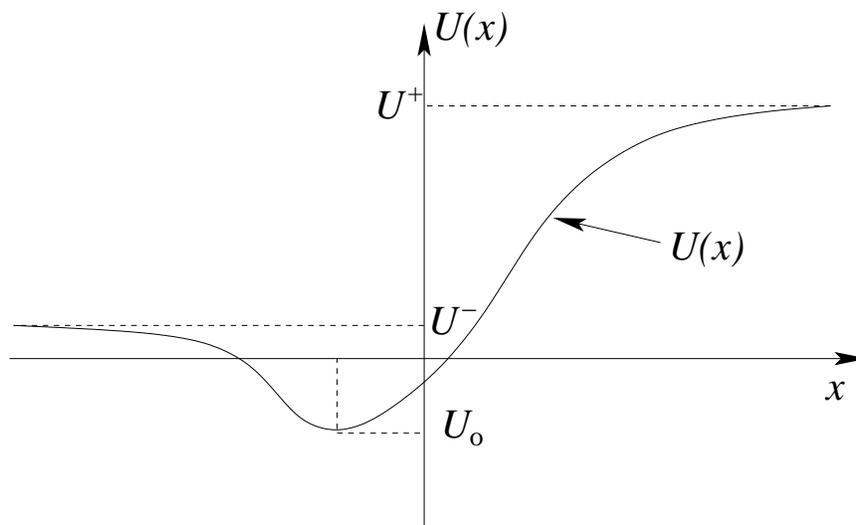


Figura 2.12: Comportamiento esquemático de la energía potencial del ejemplo discutido en el texto para establecer las características del espectro de energía.

Podemos dividir el problema en tres regiones:

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 (2.94) en las regiones asintóticas oscila entre dos límites finitos. Tal función de onda se puede normalizar a la función δ de Dirac. Como (2.94) 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 δ . 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, entonces, una condición de borde adicional, determinando que exista sólo una solución para cada energía.

c) $U_0 < k^2 < U^-$.

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 ∞ .

2.20.1. 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 δ 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 δ '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.

2.21. Problemas

2-1) Definamos el operador *Momento Angular* por $\vec{\mathbf{L}} \equiv \vec{\mathbf{r}} \times \vec{\mathbf{p}} = (\check{\mathbf{L}}_1, \check{\mathbf{L}}_2, \check{\mathbf{L}}_3)$. Demuestre que:

$$[\check{\mathbf{L}}_i, \check{\mathbf{L}}_j] = i\epsilon_{ijk}\hbar\check{\mathbf{L}}_k .$$

2-2) 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

$$[\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] \check{\mathbf{p}} = \check{\mathbf{p}} [\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{B}}] + \mathcal{O}(\hbar^2) .$$

2-3) Demuestre que la integral:

$$\begin{aligned} \Psi(\vec{r}, t) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \Psi(\vec{k}) e^{-i\omega(\vec{k})t} \\ &= \frac{C'}{(2\pi)^{3/2}} \int d^3k e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r} - \hbar k^2 t / (2m))} e^{-\sigma_0^2 k^2} \end{aligned}$$

tiene como resultado

$$\Psi(\vec{r}, t) = C \left(\frac{m}{2\pi\hbar i t} \right)^{3/2} \gamma^{-3} \exp \left(\frac{i\beta r^2}{4\sigma_0^2 \gamma} \right) ,$$

donde β y γ vienen definidas por

$$\beta \equiv \frac{m}{2\hbar t} ,$$

y

$$\gamma = \frac{1}{4\sigma_0^2} - i\beta ,$$

encuentre la relación entre C y C' .

2-4) Demuestre que en la ecuación (2.56) el ancho $\sigma(t)$ viene dado por:

$$\sigma^2(t) = \sigma_0^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{4m^2 \sigma_0^2} .$$

2-5) Encuentre los tiempos de dispersión para un átomo localizado dentro de una región del tamaño de 1 \AA .

2-6) Un virus, ¿se comportará ya definitivamente como un objeto clásico?

2-7) 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:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \check{\mathbf{F}}_H(t) = i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} \check{\mathbf{F}}(t) \right)_H + [\check{\mathbf{F}}_H, \check{\mathbf{H}}] .$$

- 2-8) Considere el Hamiltoniano $\check{H} = \check{\mathbf{p}}^2/(2m) + V(\check{\mathbf{r}})$, 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:

$$\sum_k (E_k - E_l) |\langle k | \check{X} | l \rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2m},$$

donde \check{X} es una componente cartesiana de $\check{\mathbf{r}}$.

- 2-9) 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

$$\check{H} = E(|I\rangle\langle D| + |D\rangle\langle I|).$$

- Encuentre los autovalores y autovectores del sistema.
 - 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?
 - Suponga que erróneamente se usa $\check{H} = E(|D\rangle\langle I|)$. Muestre que en tal caso no se conserva la probabilidad.
- 2-10) Sea \check{A}_θ el operador asociado a la medición de cierta variable dinámica de un sistema dado en la dirección θ . En cierta base, este operador está representado por la matriz

$$A_\theta = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & -i \sin \theta \\ i \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}.$$

- ¿Puede \check{A}_θ asociarse realmente a un observable físico?
 - Calcular los autovectores, ortonormalizarlos y verificar la completitud de la base obtenida.
 - ¿Cuáles son los valores posibles que se obtienen al medir este observable?
 - Se mide \check{A}_z ($\check{A}_{\theta=0}$) y se obtiene como resultado a_1 ($\geq a_2$). Se vuelve a medir \check{A}_z . ¿Cuál es la probabilidad de obtener a_2 ?
 - Se mide \check{A}_z y se obtiene a_1 . Luego se mide \check{A}_θ (θ arbitrario). ¿Qué se obtiene? ¿Hay algún θ para el cual se obtenga a_2 con certeza?
 - Se mide \check{A}_z y se obtiene a_2 . Luego se mide $\check{A}_{\pi/2}$ y se obtiene a_1 . ¿Qué probabilidad hay de obtener a_2 al medir \check{A}_z ?
- 2-11) Normalice los siguientes paquetes de onda y calcule $\langle(\Delta x)^2\rangle$ y $\langle(\Delta p)^2\rangle$:

- $\psi(x) = e^{-|x|/L}$.

b) $\psi(x) = H_n(x/L)e^{-x^2/(2L^2)}$, donde H_n es el polinomio de Hermite de orden n .

2-12) Muestre que $\langle \Delta x \rangle$ es igual al valor de α que minimiza la expresión

$$V(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x + \alpha)x^2\psi(x + \alpha) dx ,$$

y que este mínimo es

$$V_{\min} = \langle (\Delta x)^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 .$$

2-13) 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.

2-14) Considere el Hamiltoniano $\check{\mathbf{H}} = \check{\mathbf{H}}_0 + \check{\mathbf{H}}_1$ y su correspondiente operador de evolución asociado $\check{\mathbf{U}}(t, t_0)$. Sea $\check{\mathbf{U}}_0$ el operador de evolución asociado al término $\check{\mathbf{H}}_0$ del Hamiltoniano. Se define el cuadro de interacción, intermedio o de Dirac, a través de los kets:

$$|\psi_I(t)\rangle = \check{\mathbf{U}}_0^\dagger(t, t_0) |\psi_S(t)\rangle .$$

a) Demuestre que ellos satisfacen la ecuación

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi_I(t)\rangle = \check{\mathbf{H}}_I |\psi_I(t)\rangle , \quad \text{donde } \check{\mathbf{H}}_I = \check{\mathbf{U}}_0^\dagger \check{\mathbf{H}}_1 \check{\mathbf{U}}_0 .$$

b) Encuentre el operador de evolución de este cuadro, $\check{\mathbf{U}}_I(t, t_0)$ y demuestre que satisface la ecuación

$$i\hbar \frac{d}{dt} \check{\mathbf{U}}_I(t, t_0) = \check{\mathbf{H}}_I \check{\mathbf{U}}_I .$$

c) Demuestre que en este cuadro los operadores satisfacen la ecuación de evolución

$$i\hbar \frac{d}{dt} \check{\mathbf{Q}}_I = \left[\check{\mathbf{H}}_0^{(I)}, \check{\mathbf{Q}}_I \right] + \left(\frac{\partial}{\partial t} \check{\mathbf{Q}}_S \right)_I , \quad \text{donde } \check{\mathbf{H}}_0^{(I)} = \check{\mathbf{U}}_0^\dagger \check{\mathbf{H}}_0 \check{\mathbf{U}}_0 .$$

d) Demuestre que $\check{\mathbf{U}}_I$ satisface la ecuación integral

$$\check{\mathbf{U}}_I(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \check{\mathbf{H}}_I(t') \check{\mathbf{U}}_I(t', t_0) dt' .$$

2-15) a) Para sistemas conservativos, muestre que si en $t = 0$ el vector de estado $|\psi(t)\rangle$ es un autovector del observable $\check{\mathbf{A}}$ asociado al autovalor a , entonces, para $t > 0$, $|\psi(t)\rangle$ será un autovector del operador $\check{\mathbf{A}}_H(-t)$ asociado al mismo autovalor a .

b) Evalúe los conmutadores

$$[\check{\mathbf{p}}_H(t_1), \check{\mathbf{x}}_H(t_2)] , \quad [\check{\mathbf{p}}_H(t_1), \check{\mathbf{p}}_H(t_2)] , \quad [\check{\mathbf{x}}_H(t_1), \check{\mathbf{x}}_H(t_2)] .$$

2-16) Considere un sistema físico cuyo espacio de estados es $\mathcal{E}_{\vec{r}}$. Se define el operador paridad $\check{\mathcal{P}}$ a través de su acción sobre los vectores base $|\vec{r}\rangle$ de $\mathcal{E}_{\vec{r}}$:

$$\check{\mathcal{P}}|\vec{r}\rangle \equiv |-\vec{r}\rangle \quad (\neq -|\vec{r}\rangle !!) .$$

- a) Encuentre los elementos de matriz de $\check{\mathcal{P}}$ y de $\check{\mathcal{P}}^\dagger$ en la representación $\{|\vec{r}\rangle\}$.
- b) Demuestre que $\langle \vec{r} | \check{\mathcal{P}} | \psi \rangle = \psi(-\vec{r})$.
- c) Pruebe que $\check{\mathcal{P}} = \check{\mathcal{P}}^{-1}$.
- d) Encuentre los autovalores de $\check{\mathcal{P}}$.
- e) Considere $\check{\mathcal{P}}_\pm = \frac{1}{2}(\mathbf{1} \pm \check{\mathcal{P}})$. Demuestre que $\check{\mathcal{P}}_+$ y $\check{\mathcal{P}}_-$ son proyectores sobre dos espacios \mathcal{E}_+ y \mathcal{E}_- ortogonales y complementarios.
- f) Un vector $|\psi_+\rangle$ ($|\psi_-\rangle$) se dice par (impar) si

$$\check{\mathcal{P}}|\psi_+\rangle = \psi_+ \quad (\check{\mathcal{P}}|\psi_-\rangle = -|\psi_-\rangle) .$$

Demuestre que todo ket de $\mathcal{E}_{\vec{r}}$ puede descomponerse como una combinación lineal de vectores pares e impares. Encuentre dicha expansión y muestre que es única.

g) ¿Es $\check{\mathcal{P}}$ un observable? Justifique su respuesta.

2-17) Muestre que la adición de una parte imaginaria al potencial en la ecuación de onda describe la presencia de fuentes o sumideros de probabilidad. (Encuentre la ecuación de continuidad apropiada.)

Resuelva la ecuación de onda para un potencial de la forma $V = V_0(1 + i\zeta)$, donde V_0 y ζ son constantes positivas. Si $\zeta \ll 1$, muestre que hay soluciones estacionarias que representan ondas planas con amplitud exponencialmente decreciente, describiendo absorción de las ondas. Calcule el coeficiente de absorción.

Capítulo 3

Solución de algunos problemas unidimensionales.

versión 28 mayo 2007

En los capítulos anteriores hemos expuesto en detalle el formalismo matemático de la Mecánica Cuántica. En principio, lo importante es encontrar las autofunciones del problema a estudiar, ya sea de modo abstracto, como kets en un espacio de Hilbert, o bien en alguna representación particular. En la mayoría de los problemas de interés físico, sin embargo, el potencial es conocido como una función de las coordenadas espaciales, de modo que usualmente lo adecuado es resolver el problema de autovalores en representación de coordenadas. Tal será la situación en este capítulo, restringiéndonos específicamente a problemas en una dimensión. Ya sea a través de la solución exacta de algunos de ellos, de argumentos semiclásicos o soluciones numéricas, discutiremos una serie de resultados aplicables a potenciales más generales, y que nos permitirán ganar intuición física respecto a las soluciones de la ecuación de Schrödinger y, por tanto, respecto al comportamiento de sistemas cuánticos en general.

3.1. El pozo infinito.

Consideremos una partícula de masa m en un pozo de potencial (ver figura 3.1).

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x \leq 0 \\ 0 & 0 < x < L \\ \infty & L \leq x \end{cases} .$$

3.1.1. Autofunciones y energías.

La función de onda será no nula sólo en el intervalo $]0, L[$. Si $x < 0$ ó $x > L$ la función de onda es idénticamente nula debido al carácter altamente prohibido de tales regiones. En el intervalo $]0, L[$, la función de onda ψ es solución de la ecuación de Schrödinger de la partícula libre, de modo que

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x < 0, x > L \\ Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & 0 < x < L \end{cases} , \quad (3.1)$$

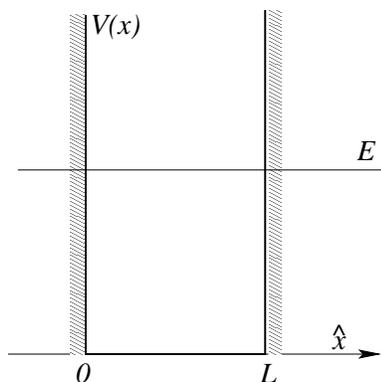


Figura 3.1: Pozo infinito.

con $k = \sqrt{2mE}/\hbar$. Hasta este punto, tenemos un espectro continuo (cualquier valor de $E > 0$ es posible), y doblemente degenerado (k y $-k$ corresponden a funciones de onda distintas asociadas a la misma energía), en concordancia con lo visto en la Sec. 2.20.

$\psi(x)$ debe ser continua, de modo que

$$\begin{aligned}\psi(0^+) &= \psi(0^-) , \\ \psi(L^+) &= \psi(L^-) .\end{aligned}$$

La continuidad en $x = 0$ lleva a la ecuación

$$A - B = 0 ,$$

de modo que podemos reescribir

$$\psi(x) = C \sin(kx) ,$$

con $C = A/(2i)$. Notemos que imponer la continuidad de $\psi(x)$ en $x = 0$ es, en este caso, equivalente a imponer que la función de onda no explote para $x \rightarrow \infty$. Recordando nuevamente la Sec. 2.20, vemos cómo la condición de que la función de onda decaiga al menos exponencialmente para $x \rightarrow \infty$, por encontrarse en una zona clásicamente prohibida de energía, hace que el espectro de energía sea continuo y no degenerado. Es continuo porque sigue siendo cierto que cualquier $E > 0$ da una solución físicamente aceptable, pero ahora el cambio $k \rightarrow -k$ deja invariante la función de onda (en realidad, la modifica en un signo global, pero el producto entre un escalar y un estado representa el mismo estado físico). Por tanto, ya no es cierto que hay dos soluciones linealmente independientes con la misma energía, y por ende el espectro es no degenerado.

Ahora imponemos la continuidad en $x = L$, que da la ecuación:

$$\sin(kL) = 0 ,$$

con solución

$$k = \frac{n\pi}{L} , \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

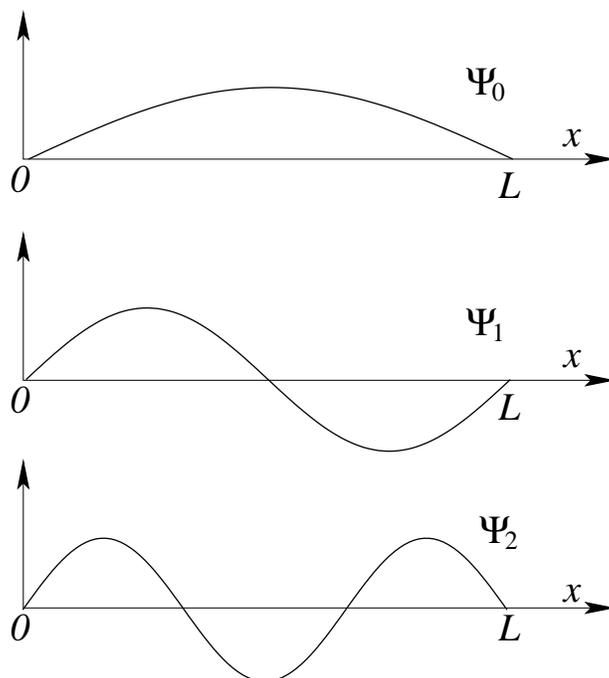


Figura 3.2: Funciones de onda de los tres primeros estados de un pozo infinito.

Notemos que $n = 0$ es también una solución posible, pero en ese caso $\psi(x) = 0$. Lo cual evidentemente es una solución de (cualquier) ecuación de Schrödinger, pero representa un estado en que no hay partícula, y por ende no es una solución de interés físico. La relación anterior nos dice que la segunda condición de borde (continuidad en $x = L$ o, equivalentemente, que la función de onda decaiga al menos exponencialmente para $x \rightarrow \infty$ por ser una región clásicamente prohibida), ha tenido el efecto de restringir k , discretizándolo.

La solución original (3.1) tenía tres constantes indeterminadas, A , B y k . Hemos determinado dos usando las dos condiciones de borde, o bien las dos condiciones de continuidad de la función de onda. La tercera se obtiene de la condición de normalización de la función de onda, que en este caso se reduce a

$$\int_0^L dx |\psi_n(x)|^2 = 1 .$$

El resultado final para las energías y las funciones de onda normalizadas es

$$E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n+1)^2 , \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots ,$$

y

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \operatorname{sen} \left(\frac{(n+1)\pi}{L} x \right) , \quad x \in [0, L] .$$

El espectro es no degenerado y discreto. En la figura 3.2 se muestran las funciones de onda de los tres estados de menor energía.

Observemos que la función de onda designada con el rótulo (número cuántico), n tiene una paridad respecto al punto $x = L/2$ es $(-1)^n$, y que el número de nodos en el intervalo (abierto) $]0, L[$ es n .

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. De hecho, L infinito corresponde a una partícula libre, que tiene un espectro continuo.

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 Δx en posición es $\Delta x \leq L/2$, lo que implica que $\Delta p \geq \hbar / (2\Delta x) = \hbar / L$. Como $\langle \mathbf{p} \rangle = 0$, se sigue que

$$\frac{(\Delta p)^2}{2m} = \frac{\langle p^2 \rangle}{2m} \geq \frac{\hbar^2}{2mL^2} .$$

Pero $\langle p^2 \rangle / (2m) = T = E$, 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 π^2 de por medio. Observamos entonces que una consecuencia adicional del principio de incerteza, es que sólo por el hecho de localizar a una partícula le estamos entregando energía cinética. Esto es completamente opuesto al comportamiento esperado clásicamente: una piedra puede estar en reposo en el fondo de un pozo profundo. Pero cuánticamente no es así: en cuanto intentamos localizar una partícula en una región de ancho Δx adquiere una energía cinética, para que el principio de incerteza siga cumpliéndose, y por tanto la energía de la partícula, aún en el estado de mínima energía, será distinta de cero.

3.1.2. 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.

3.1.3. Ensanchamiento repentino.

Consideremos ahora el caso en que el pozo de potencial se ensancha bruscamente de L a $2L$ en $t = t_0$. Digamos que la partícula se encuentra inicialmente en el estado fundamental. Dicho estado es naturalmente un autoestado del Hamiltoniano original, pero no del nuevo, y por lo tanto, para $t > t_0$, el sistema se encontrará necesariamente en una superposición de autoestados del nuevo Hamiltoniano. Por ende, al medir la energía, se encontrará algún valor, de entre muchos posibles. Por tanto, tiene sentido hacernos la siguiente pregunta: Si el sistema se encuentra inicialmente en el estado fundamental, ¿cuál es la probabilidad de encontrar el sistema, para $t > t_0$, en el estado n ? La respuesta, naturalmente, tiene relación con la combinación lineal exacta que representa al estado original en la nueva base de autoestados.

Ahora bien, 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,

$$\begin{aligned} P_n &= |\langle \bar{\Psi}_n | \psi_0 \rangle|^2 \\ &= \left| \frac{\sqrt{2}}{L} \int_0^L \operatorname{sen} \left(\frac{(n+1)\pi x}{2L} \right) \operatorname{sen} \left(\frac{\pi x}{L} \right) dx \right|^2 \\ &= \begin{cases} 0 & \text{si } n \text{ impar } \neq 1 \\ 1/2 & \text{si } n = 1 \\ 2\pi^{-2} \left(\left(\frac{n+1}{2} \right)^2 - 1 \right)^{-2} & \text{si } n \text{ par} \end{cases} \end{aligned}$$

Analicemos un momento estos resultados. La mayor probabilidad es que el sistema quede en el primer estado excitado del nuevo Hamiltoniano, y luego las probabilidades se reparten entre los modos con n par. Pero observemos que $P_n \sim 1/n$, para n grande, de modo que, en realidad, el sistema tiene una probabilidad cada vez menor de quedar en un estado con n alto. Lo cual es razonable, porque si inicialmente el sistema se encontraba en un estado de mínima energía, es esperable que sea más probable encontrar, tras la expansión, al sistema en un estado de energía relativamente baja, y que sea muy poco probable que el sistema adquiriera tanta energía como para acceder a uno de los estados más altos.

Un análisis cuantitativo de lo anterior se encuentra en el Cuadro 3.1, donde se evalúan numéricamente las probabilidades para los primeros 6 estados. Observamos que bastan los 6 primeros estados para dar cuenta del estado de la partícula con un error del 0.3 %, y dar cuenta de la energía con un error de 7 %.

Más aún, también es esperable que la mayor probabilidad sea de quedar en el primer estado excitado del nuevo sistema. En efecto, el estado fundamental del sistema inicial es nulo en $x = L$ (panel superior de la Fig. 3.2. Por su parte, el primer estado excitado del sistema final es el segundo panel de la Fig. 3.2, pero con $L \rightarrow 2L$. Que es exactamente la misma función original, salvo que se le ha agregado un semiperiodo adicional. Las funciones son esencialmente iguales, y es por tanto completamente esperable que el sistema prefiera quedarse donde estaba. El hecho de que no lo haga con certeza tiene que ver con que las funciones no son realmente la misma. Los mismos argumentos nos permiten intuir que si ensanchamos bruscamente el pozo de L a $3L$, el sistema se encontrará, con la mayor probabilidad, en el segundo estado excitado del nuevo sistema, que corresponde al estado fundamental del pozo con ancho L , pero con dos semiperiodos adicionales.

Observemos que, como debe ser, la suma de todas las probabilidades es 1 (es decir, al medir la energía se obtiene *algún* autovalor del nuevo Hamiltoniano):

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_n = 1 \quad ,$$

o sea,

$$\frac{1}{2} + \frac{2}{\pi^2} \sum_{\substack{n>0 \\ n \text{ par}}} \frac{1}{\left(\frac{(n+1)^2}{4} - 1\right)^2} = 1 \quad .$$

Esta última relación es verdadera, ya que, efectivamente,

$$\sum_{\substack{n>0 \\ n \text{ impar}}} \frac{1}{(n^2 - 4)^2} = \frac{\pi^2}{64} \quad .$$

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. En efecto, antes de la expansión el sistema se encuentra en un autoestado de energía E_0 , teniéndose, por consiguiente, para el valor esperado:

$$\langle \check{\mathbf{H}} \rangle = E_0 \quad .$$

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,

$$\langle \check{\mathbf{H}} \rangle = \sum_n P_n \bar{E}_n \quad .$$

La igualdad del valor esperado de la energía antes y después de la expansión implica que

$$E_0 = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{E}_n P_n \quad .$$

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,

$$\sum_{\substack{n>0 \\ n \text{ impar}}} \frac{n^2}{(n^2 - 4)^2} = \frac{\pi^2}{4}.$$

Todo esto nos recuerda resultados conocidos de la Termodinámica: para una expansión brusca, o *expansión libre*, la energía interna se conserva. Por otro lado, si el sistema fuera un gas de partículas, sabríamos que la entropía del sistema, en este proceso, aumenta. Clásicamente, esto tiene que ver con la pérdida de información asociada a saber que las partículas siguen confinadas, pero en un espacio mayor, de modo que su posición se conoce con menos certeza. En el problema cuántico, hemos encontrado que si 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 sobre la energía puede vincularse también a un aumento de la entropía del sistema.

n	P_n	%	\bar{E}_n/E_0	$P_n \bar{E}_n/E_0$
0	$32/(9\pi^2) = 0.36035$	(~ 36 %)	1/4	0.09006
1	$1/2 = 0.5$	(50 %)	1	0.50000
2	$32/(25\pi^2) = 0.12969$	(~ 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 → 5	0.99729	(~ 99.7 %)		0.92780 (~ 93 %)

Cuadro 3.1: 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.

3.1.4. 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

$$\bar{E}_n = \frac{\hbar^2(n+1)^2\pi^2}{2m\bar{L}^2}, \quad \bar{\Psi}_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\bar{L}}} \operatorname{sen} \left(\frac{\pi(n+1)x}{\bar{L}} \right).$$

Calculemos la probabilidad de que el sistema siga en el estado fundamental después del ensanchamiento. Tal probabilidad viene dada por

$$\begin{aligned} P &= |\langle \bar{\Psi}_0 | \psi_0 \rangle|^2 \\ &= \left| \int_0^L \psi_0(x) \bar{\Psi}_0(x) dx \right|^2 \\ &= \frac{4}{L\bar{L}} \left| \int_0^L \operatorname{sen} \left(\frac{\pi x}{L} \right) \operatorname{sen} \left(\frac{\pi x}{\bar{L}} \right) dx \right|^2. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Note que

$$\begin{aligned} \operatorname{sen} \left(\frac{\pi x}{\bar{L}} \right) &= \operatorname{sen} \left(\frac{\pi x}{\bar{L} - L + L} \right) \approx \operatorname{sen} \left[\frac{\pi x}{L} \left(1 - \frac{\Delta L}{L} \right) \right] \\ &= \operatorname{sen} \left(\frac{\pi x}{L} (1 - \epsilon) \right) \\ &= \operatorname{sen} \left(\frac{\pi x}{L} \right) + \frac{\pi x}{L} \epsilon \cos \left(\frac{\pi x}{L} \right) + \mathcal{O}(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Luego, reemplazando (3.3) en (3.2), 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

$$P = \underbrace{(1 + \mathcal{O}(\epsilon^2))^2 \cdot (1 + \mathcal{O}(\epsilon^2))^2 \cdots (1 + \mathcal{O}(\epsilon^2))^2}_{N \text{ veces}}$$

$$\approx 1 + N\mathcal{O}(\epsilon^2) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} 1 ,$$

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 ψ_0 .

3.1.5. 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 Δp el cambio de momento que ocurre al chocar la

partícula elásticamente contra la pared y sea Δt 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

$$W = \int_L^{2L} \bar{F} \cdot dL \tag{3.4}$$

Escribimos 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 (3.4), 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.

3.2. Estados ligados en potenciales unidimensionales.

Más allá de las consideraciones hechas en la sección 2.20, queremos entregar información adicional sobre los estados ligados a un potencial $V(x)$. Consideraremos sólo casos para los cuales $V(x) \xrightarrow{|x| \rightarrow \infty} 0$.

3.2.1. 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,

$$2\langle \mathbf{T} \rangle = \left\langle x \frac{\partial V(x)}{\partial x} \right\rangle .$$

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 se sigue que

$$a^{\alpha+2} = \frac{\hbar^2}{\alpha m W_0} ,$$

y

$$V(x) = \frac{\hbar^2}{\alpha m a^2} \left| \frac{x}{a} \right|^\alpha .$$

En el caso general, en que $V(x)$ tiene una forma arbitraria, siempre podemos escribir $V(x) = V_0 v(x/a)$, donde $v(\xi)$ es una función adimensional y V_0 contiene una magnitud típica del potencial. Definimos, en este caso, parámetros adimensionales ξ , λ y ν_0 a través de las relaciones

$$\xi = \frac{x}{a} ,$$

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\lambda}{a} \right)^2 < 0 ,$$

y

$$V_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\nu_0}{a} \right)^2 < 0 ,$$

donde hemos usado que buscamos estados ligados ($E < 0$), y que por tanto el potencial también es negativo. Con dichos 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 ν_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, ~ 10 [eV] para átomos livianos ($Z \sim 1$) y unos 100 [keV] para los estados más ligados de los átomos estables más pesados ($Z \sim 100$).

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, de masa $m_\mu \approx 205 m_e$. 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 $d + t \longrightarrow {}^4\text{He} + n$.

3.2.2. 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. En la subsección anterior utilizamos los resultados del análisis dimensional para $\alpha = -1 < 0$, pero mostraremos a continuación que, en principio, dicha

extrapolación no tiene sentido físico, siendo el potencial Coulombiano precisamente un caso en que lo tiene. Estudiemos entonces 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 de 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 Γ y Ω son constantes numéricas independientes de a . De acá se sigue para el valor esperado de la energía total

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \Gamma - \frac{W_0}{a^\beta} \Omega. \quad (3.5)$$

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.

Usando (3.5), el mínimo de $\langle E \rangle$ se obtiene de

$$0 = \frac{d\langle E \rangle}{da} = \frac{1}{a} \left(\langle \check{\mathbf{T}} \rangle + \frac{\beta}{2} \langle \check{\mathbf{V}} \rangle \right),$$

es decir,

$$\langle \check{\mathbf{T}} \rangle + \frac{\beta}{2} \langle \check{\mathbf{V}} \rangle = 0, \quad (3.6)$$

esto es, cuando se cumple el teorema del virial. Sin embargo, este punto representa realmente un mínimo si

$$0 < \frac{d^2\langle E \rangle}{da^2} = -\frac{\beta\langle \check{\mathbf{V}} \rangle}{a^2} (2 - \beta),$$

es decir, puesto que $\langle \check{\mathbf{V}} \rangle < 0$, el mínimo existe sólo si $\beta < 2$. En este caso, el mínimo ancho posible de la función de onda del estado fundamental es

$$a_{\min} = \left[\frac{\hbar^2}{2mW_0} \frac{\Gamma}{\Omega} \right]^{1/(2-\beta)}.$$

$\beta = 1$ corresponde al potencial de Coulomb, y este resultado nos permite entender por qué un electrón no cae al núcleo atómico: El ancho mínimo (que es del orden del radio de

Bohr) corresponde al estado de mínima energía del electrón. Si el tamaño de la función de onda continuara decreciendo, el término cinético en (3.5) aumentaría más de lo que disminuye el término de potencial, y la energía crecería. La condición (3.6) representa precisamente el estado de balance entre la energía cinética y potencial que se establece cuando el sistema está en su estado de mínima energía.

Si $\beta > 2$, en tanto, el extremo dado por (3.6) no es un mínimo, y la energía mínima es $\langle E \rangle_{\min} = -\infty$, que corresponde a $a = 0$, o sea, la función de onda colapsa concentrándose en el punto $x = 0$. Lo que está ocurriendo en este caso es que, para a pequeño, el término de potencial (negativo) domina sobre el término cinético (positivo), de modo que $\langle E \rangle$ disminuye sin límite a medida que a decrece. Si nos imaginamos que la función de onda parte de un cierto ancho inicial, y comienza a acomodar su ancho, buscando el valor que minimice su energía, el ancho continuaría disminuyendo hasta llegar a $a = 0$, $\langle E \rangle = -\infty$. Tales potenciales carecen de sentido físico, aunque existen fenómenos naturales reminiscentes de esta situación.

3.2.3. 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

$$\Psi_E^\pm(x) = \frac{1}{2} [\Psi_E(x) \pm \Psi_E(-x)] . \quad (3.7)$$

Por supuesto que estas funciones son autofunciones del Hamiltoniano

$$H \Psi_E^\pm(x) = E \Psi_E^\pm(x) ,$$

y cumplen con

$$\Psi_E^\pm(-x) = \pm \Psi_E^\pm(x) . \quad (3.8)$$

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 (3.7). 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.

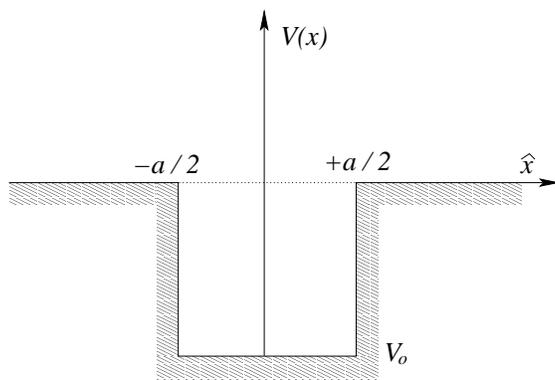


Figura 3.3: Gráfico del potencial usado en el ejemplo ilustrativo.

Notemos también que el presente resultado no son sino consecuencia del Teorema 2.4: Si un operador \check{U} deja invariante el Hamiltoniano, entonces existen autofunciones comunes a \check{H} y \check{U} . En este caso, el operador que deja invariante a \check{H} es el operador de paridad \check{P} (ver Problema 2-16), ya que el potencial es simétrico, y el laplaciano evidentemente también es invariante ante inversiones espaciales. Por lo tanto, existen autofunciones del Hamiltoniano que son también autofunciones del operador de paridad, esto es, como \check{P} tiene autovalores ± 1 , autofunciones que cumplen (3.8). En esta sección hemos encontrado explícitamente dichas funciones, en (3.7).

3.2.4. Ejemplo ilustrativo.

Para ilustrar algunos conceptos generales consideremos el potencial (ver figura 3.3)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| > a/2 \\ -V_0 & \text{si } |x| \leq a/2 \end{cases} .$$

Recurriendo a los conceptos ya desarrollados, pongamos

$$E = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \lambda^2 ,$$

y

$$V_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \nu_0^2 .$$

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

$$k^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2} (V_0 + E) = \nu_0^2 - \lambda^2 .$$

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 . Analíticamente, la condición de ensamble de la función de onda entre las dos regiones lleva a las relaciones

$$\tan\left(\frac{k}{2}\right) = \frac{\lambda}{k} = \frac{\sqrt{\nu_0^2 - k^2}}{k} , \quad \text{para las soluciones pares,} \quad (3.9)$$

y

$$\tan\left(\frac{k - \pi}{2}\right) = \frac{\lambda}{k} = \frac{\sqrt{\nu_0^2 - k^2}}{k} , \quad \text{para las soluciones impares.} \quad (3.10)$$

Estas ecuaciones se pueden resolver gráficamente (ver figura 3.4).

Se encuentra que siempre existe al menos una solución. Las soluciones k_0, k_1, \dots , etc., cumplen con

$$0 < k_0 < \pi < k_1 < 2\pi < \dots < k_N < \nu_0 < (N + 1)\pi . \quad (3.11)$$

El número total de estados ligados es $N + 1 = [\nu_0/\pi] + 1$, donde con el símbolo [...] se denota la parte entera. Usando la definición de ν_0 se obtiene

$$\text{N}^\circ \text{ total de estados ligados} = 1 + \left[\sqrt{\frac{2mV_0a^2}{\hbar^2\pi^2}} \right] . \quad (3.12)$$

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:

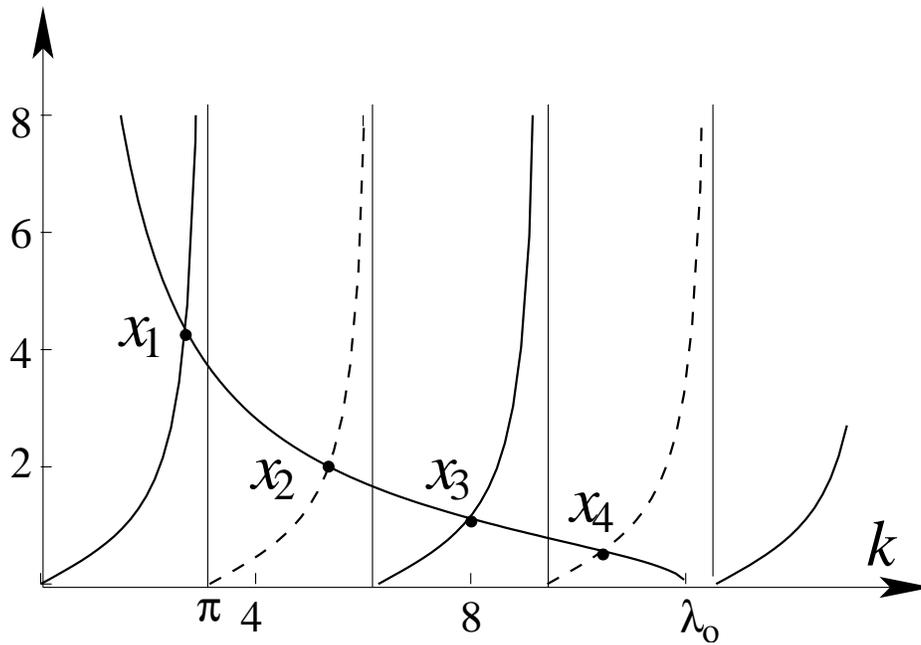


Figura 3.4: Solución gráfica de las ecuaciones (3.9) y (3.10). La línea monótonamente decreciente corresponde al lado derecho de las ecuaciones. Las demás líneas corresponden a los lados izquierdos, las líneas cortadas para las soluciones impares y las líneas llenas para las pares.

- (a) En este ejemplo el número de estados ligados es finito, y 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 (3.11) y comparando con las autoenergías E_n^∞ 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 Δx , 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) $V_0 \rightarrow 0$ debería corresponder a una partícula libre. Sin embargo, haciendo el límite en (3.12) se encuentra que 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 (3.12) establece un criterio intuitivo para establecer cuándo un potencial es “débil” o “fuerte”. Llamando

$$\Delta_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} ,$$

que es una especie de “energía del punto cero”, se tiene

$$\text{N}^\circ \text{ total de estados ligados} - 1 = \left[\sqrt{V_0/\Delta_0} \right] .$$

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.

3.2.5. 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. De hecho recuperaremos varios resultados anteriores, ahora para un potencial un poco más general.

Clásicamente, el momento de una partícula de energía E en el punto x viene dado por ¹

$$p_{\text{clas}}(x) = \sqrt{2m(E - V(x))} .$$

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 3.5 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 se sigue que

¹Esta expresión tiene sentido cuántico en la medida que podamos construir paquetes de ondas suficientemente estrechos en torno a x , y cuya dispersión de momentos sea despreciable en comparación al momento medio $\langle \tilde{\mathbf{p}} \rangle$, de modo que

$$T = \frac{\langle \tilde{\mathbf{p}}^2 \rangle}{2m} \approx \frac{\langle \tilde{\mathbf{p}} \rangle^2}{2m} = E - \langle \tilde{V}(x) \rangle \approx E - V(\bar{x}) ,$$

donde \bar{x} es la posición media del paquete.

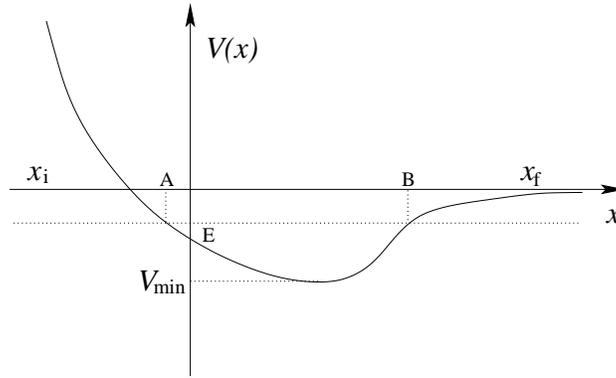


Figura 3.5: Potencial usado para discutir el comportamiento de las soluciones.

$$\int_A^B dx \sqrt{2m(E - V(x))} = nh . \quad (3.13)$$

Esta condición es similar a la regla de cuantización de Bohr-Sommerfeld. Las presentes consideraciones tienen validez para los niveles muy excitados y $m \rightarrow \infty$.

Consideremos lo que ocurre con el último nivel excitado que aún está ligado. Asumiremos 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

$$\frac{1}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \sqrt{2m(-V(x))} = N_{\text{tot}} = N^{\circ} \text{ total de niveles ligados} , \quad (3.14)$$

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 $\pm\infty$. Sin embargo, $V(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0$ no asegura que la integral sea finita. Además, debe decaer a cero suficientemente rápido. El caso crítico es $1/x^2$, en cuyo caso la divergencia en infinito es logarítmica. La expresión (3.14), por tanto, sugiere que un pozo posee un número finito de niveles ligados si $V(x)$ se anula más rápido que $1/x^2$. Es decir,

$$x^2 V(x) \xrightarrow{x \rightarrow \pm\infty} 0 \iff \text{Existe un número finito de estados ligados} . \quad (3.15)$$

Si V_0 es una profundidad característica del potencial y a un ancho característico, una grosera estimación de este número la tenemos al aproximar (3.14) por

$$\frac{1}{h} \sqrt{2mV_0} a = \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2 \pi^2}} = N_{\text{tot}} .$$

Esta expresión es muy similar a la relación encontrada en la subsección anterior.

Si el pozo no cumple con la relación (3.15), 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:

$$E_0 < E_1 < E_2 < \cdots < E_n ,$$

al nivel E_n le corresponden n nodos. Los puntos de retorno clásico para esta energía vienen dados por

$$x_R(E) = \pm \left(-\frac{W_0}{E} \right)^{1/\beta} . \quad (3.16)$$

Aproximemos (3.13) por su forma asintótica a partir de cierto punto x_0 :

$$\begin{aligned} n(E) &= \frac{2}{h} \int_{x_0}^{x_R} dx \sqrt{2mW_0 \left[\left(\frac{1}{x} \right)^\beta - \left(\frac{1}{x_R} \right)^\beta \right]} + (\text{constante}) \\ &= \frac{2}{h} \sqrt{\frac{2mW_0}{x_R^{\beta-2}}} \int_{x_0/x_R}^1 d\xi \sqrt{\xi^{-\beta} - 1} + (\text{constante}) . \end{aligned} \quad (3.17)$$

Cuando $x_0/x_R \rightarrow 0$ en la ecuación (3.17), y dado que $\beta < 2$, se tiene

$$\begin{aligned} n(E) &\approx \frac{2}{h} \sqrt{\frac{2mW_0}{x_R^{\beta-2}}} \int_0^1 d\xi \sqrt{\xi^{-\beta} - 1} + (\text{constante}) \\ &\approx \frac{2}{h} \sqrt{2mW_0 x_R^{(2-\beta)}} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{1}{\beta-\frac{1}{2}}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{\beta} + 1\right)} . \end{aligned}$$

Usando (3.16), 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.

3.2.6. 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

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(x) - E] \Psi(x) \equiv U(E, x) \Psi(x). \quad (3.18)$$

Como se mostró anteriormente, la función de onda $\Psi(x)$ se puede elegir siempre, y así lo supondremos aquí, real. De la relación (3.18) 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 3.5 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

$$\Phi(x + \Delta) = \Phi(x) + \Phi'(x)\Delta + U(x)\Phi(x) \frac{\Delta^2}{2}, \quad (3.19)$$

$$\Phi'(x + \Delta) = \Phi'(x) + U(x)\Phi(x) \Delta. \quad (3.20)$$

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

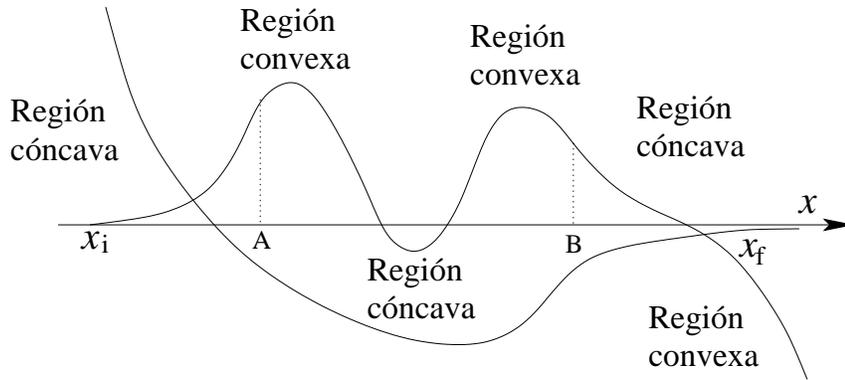


Figura 3.6: Comportamiento típico de una solución numérica de la ecuación de Schrödinger del potencial mostrado en la figura anterior.

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 (3.19) y (3.20), 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.

Trabajemos inicialmente a nivel conceptual y analicemos la solución que se obtiene mediante este proceso iterativo.

Para ello notemos que en la figura 3.5, 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 3.6 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 $\Phi(x = \infty) = 0$).

Las figuras 3.7 y 3.8 muestran 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 3.8; 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 Φ es nula en todas partes, pues 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:

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 $\Phi(E = \varepsilon_\nu, x_f) = 0$. En la figura 3.7 se muestran algunas de estas situaciones (las energías denotadas por ε_n , $n = 0, 1, 2, \dots$). La primera solución aceptable se obtiene para ε_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 ε_1 y ε_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 ν 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 ε_ν . 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

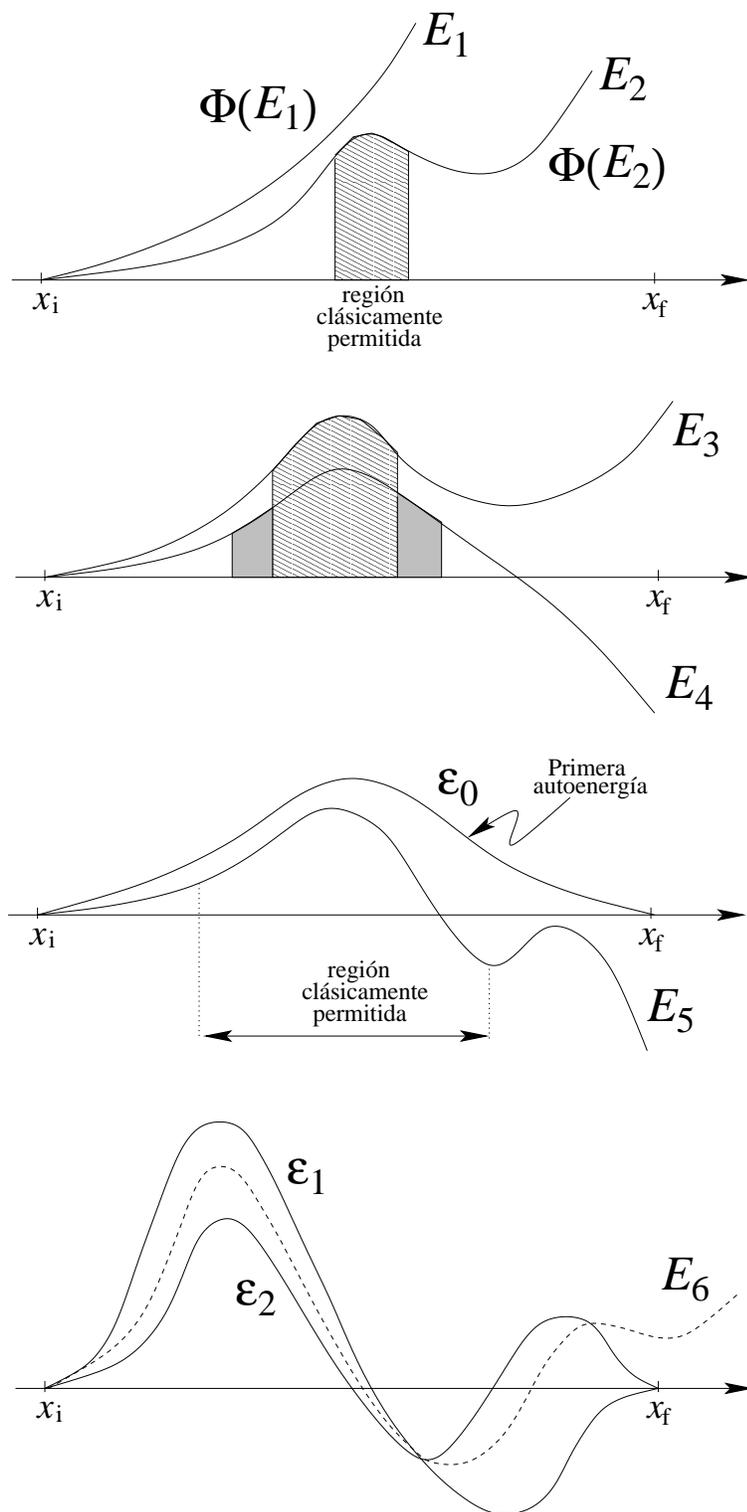


Figura 3.7: Comportamiento de la función de onda a medida que se aumenta la energía $E_1 < E_2 < E_3 < \dots$. Las energías de los autoestados se denotan con ϵ_n , $n = 0, 1, 2, \dots$

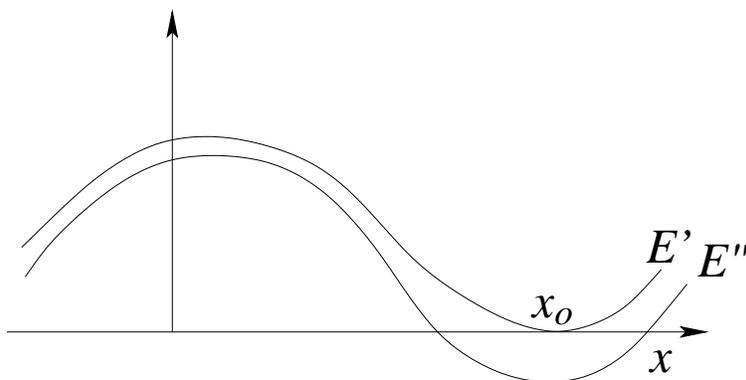


Figura 3.8: Gráfico usado para mostrar que no puede aparecer un cero doble en la función de onda.

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 de 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, o esquemas más elaborados de integración como Runge-Kutta. Para mayor detalle al respecto recomendamos las *Tablas Matemáticas* de Abramowitz-Stegun.

3.2.7. Resultados numéricos para algunos pozos.

En las figuras siguientes mostramos resultados numéricos para partículas de diversas masas ligadas a diversos potenciales.

En las figuras 3.9, se comparan las autoenergías para tres potenciales, los cuales se eligen de igual profundidad V_0 e igual “área” $\int_{-\infty}^{+\infty} dx V(x) = -V_0 a \sqrt{\pi}$. De este modo, nos aseguramos que sus “anchos” sean similares, y que difieran principalmente en la forma como se anulan hacia $\pm\infty$.

En las figuras 3.9 se usan: un potencial *Gaussiano*

$$V(x) = -V_0 \exp\left(-\frac{x^2}{a^2}\right) ,$$

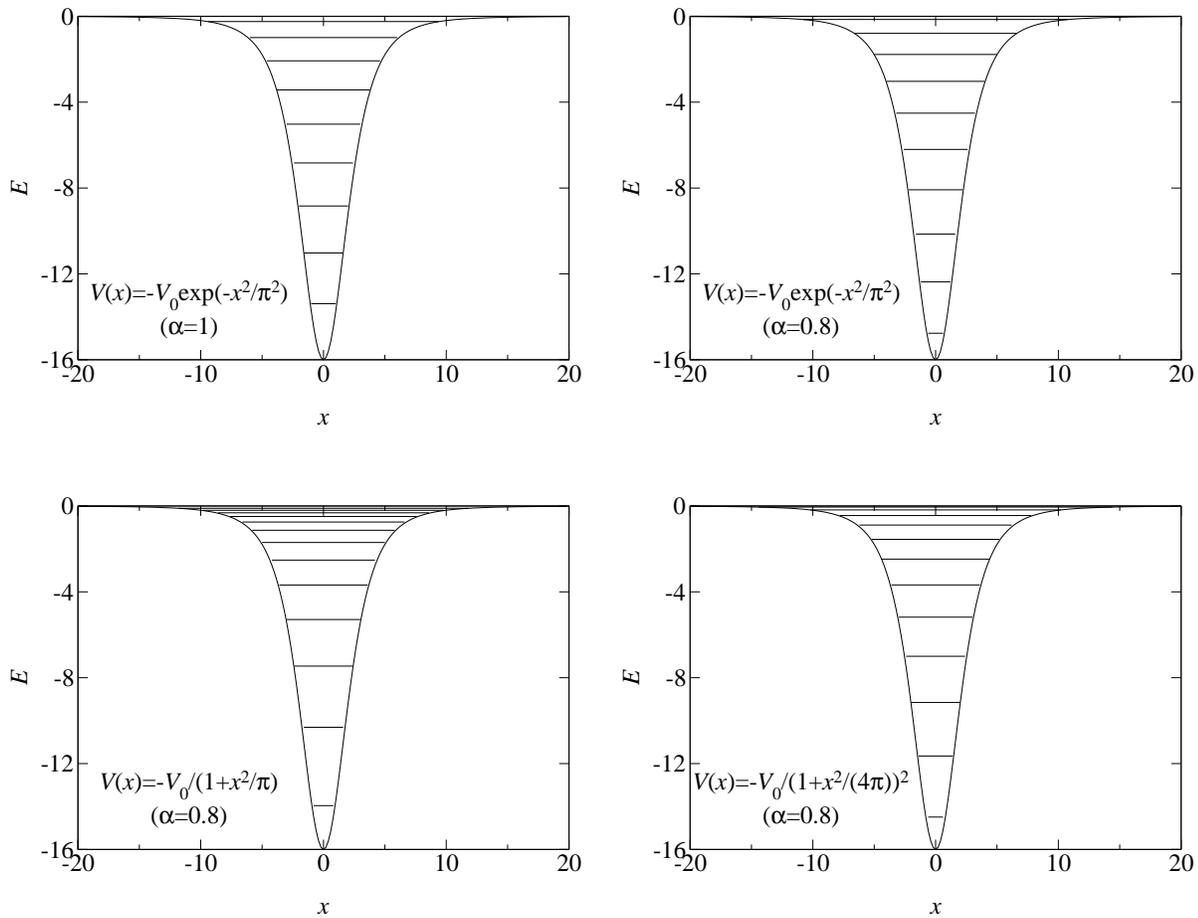


Figura 3.9: Niveles de energía para una partícula ligada a varios potenciales que decaen con distinta rapidez a cero para $|x| \rightarrow \infty$.

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

$$V(x) = -\frac{V_0}{(1 + \pi (x/(2a))^2)^2},$$

que se anula en $\pm\infty$ como $1/x^4$.

En los ejemplos, $V_0 = 20$, $a = \pi$, y la masa aparece a través de la constante $\alpha = 2m/\hbar$. Para un caso se consideran dos masas para la partícula, correspondientes a $\alpha = 1$ y $\alpha = 0,8$. 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 $\nu \rightarrow \infty$).

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.

Por el contrario, los potenciales de corto alcance tienen un número finito de estados ligados.

La figura 3.9 muestra claramente que la separación entre niveles decrece al aumentar la masa. En la figura 3.9 se puede apreciar que los niveles más bajos aparecen casi equiespaciados, cumpliendo aproximadamente la relación $\varepsilon_\nu = v_0 + \eta(\nu + 1/2)$. Como luego se verá, ello se debe a que estos primeros estados ven aproximadamente un potencial parabólico (oscilador armónico).

En la figura 3.10 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; este fenómeno es muy importante, dando lugar al “espectro de inversión” del amoníaco, entre otras situaciones físicas. Estos dobletes están formados por una solución par, $\{\Phi_{\nu+}, \varepsilon_{\nu+}\}$, 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: 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: 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 3.10. Interprete sus resultados analizando las autofunciones de cada

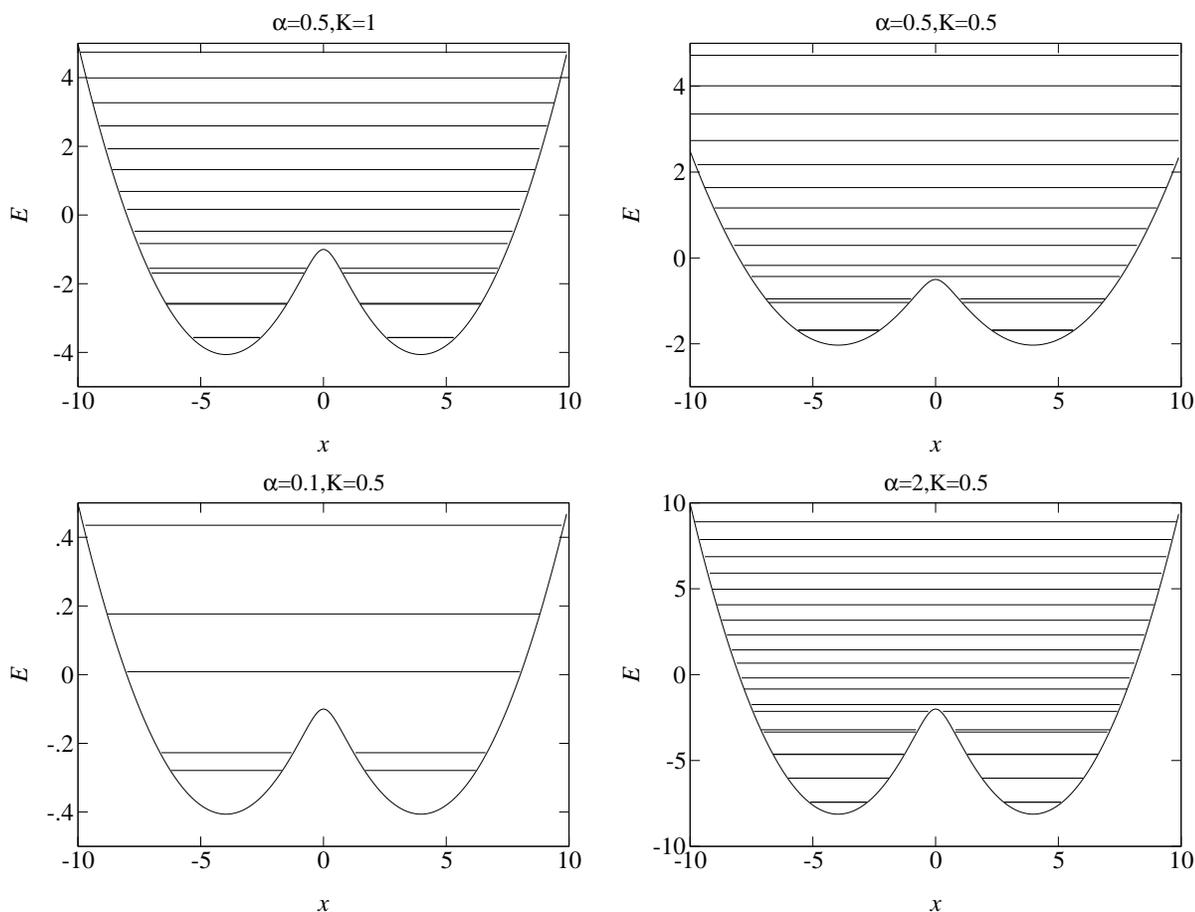


Figura 3.10: Niveles de energía para una partícula ligada a un potencial con un montículo al centro.

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.

3.3. Partícula ligada a un potencial delta.

Consideremos una partícula de masa m ligada a un potencial

$$V(x) = -V_0 \delta\left(\frac{x}{x_0}\right) \quad (\text{Potencial delta atractivo}).$$

3.3.1. 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, o sea, estados con energía negativa. Definamos κ 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 Ψ exige que $A = \bar{A}$. Podemos resumir entonces las dos ecuaciones anteriores escribiendo

$$\Psi(x) = A e^{-\kappa|x|} . \quad (3.21)$$

Note que Ψ es continua en $x = 0$, pero que su derivada Ψ' 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 (3.21) para la función de onda, se obtiene

$$-2\kappa A = -U_0 x_0 A .$$

De esta manera, se encuentra que κ 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

$$\Psi(x) = \frac{\sqrt{mV_0x_0}}{\hbar} \exp\left(-\frac{mV_0x_0}{\hbar^2}|x|\right) .$$

Observemos que esta función de onda no tiene nodos, como corresponde ya que es el estado fundamental de este sistema.

Ejercicio: 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.

3.3.2. 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

$$\left(\frac{p^2}{2m} - E\right) \Psi(p) = \frac{-1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int dp' \tilde{V}(p-p') \Psi(p') , \quad (3.22)$$

donde $\tilde{V}(p)$ es la transformada de Fourier de $V(x)$, es decir,

$$\tilde{V}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx V(x) e^{-ipx/\hbar} = \frac{-V_0x_0}{\sqrt{2\pi\hbar}} .$$

En este caso particular la transformada de Fourier del potencial resulta ser una constante. Reemplazando este valor en la ecuación de Schrödinger (3.22) se obtiene

$$\left(E - \frac{p^2}{2m}\right) \Psi(p) = -\frac{V_0x_0}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(p') dp' . \quad (3.23)$$

Definamos β y α por

$$E \equiv -\frac{\beta^2}{2m} < 0$$

y

$$\alpha \equiv \frac{mV_0x_0}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(p') dp' .$$

Con estas definiciones la ecuación (3.23) queda

$$(p^2 + \beta^2)\Psi(p) = \alpha ,$$

o sea,

$$\Psi(p) = \frac{\alpha}{p^2 + \beta^2} .$$

Reemplazando este resultado en la definición de α se obtiene la condición de autoconsistencia

$$\begin{aligned}\alpha &= \frac{mV_0x_0}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\alpha dp}{p^2 + \beta^2} \\ &= \frac{mV_0x_0\alpha}{\hbar\beta},\end{aligned}$$

o sea, se debe tener que

$$\beta = \frac{mV_0x_0}{\hbar}.$$

Conocido β se conoce la energía del único estado ligado del problema. Ésta resulta ser, como ya sabíamos,

$$E = - \left(\frac{mV_0x_0}{\hbar} \right)^2 \frac{1}{2m} = - \frac{mV_0^2x_0^2}{2\hbar^2}.$$

Para la función de onda (en el espacio de momento) se tiene la expresión

$$\Psi(p) = \langle p | \Psi \rangle = \frac{\alpha}{p^2 + \beta^2}.$$

El valor de α se obtiene normalizando la función de onda:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(p)|^2 dp = \alpha^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{(p^2 + \beta^2)^2} = \frac{\alpha^2\pi}{2\beta^3} = 1,$$

o sea,

$$\alpha = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \beta^{3/2}.$$

Así, concluimos que la función de onda del estado ligado de este problema, en la representación de momentos, viene dada por la Lorentziana

$$\Psi(p) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\left(\frac{mV_0x_0}{\hbar}\right)^{3/2}}{p^2 + \left(\frac{mV_0x_0}{\hbar}\right)^2}. \quad (3.24)$$

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 (3.24) p es una cantidad real, en contraposición a lo que erróneamente podría haberse pensado al considerar el operador $\check{\mathbf{p}} \rightarrow -i\hbar\partial/\partial x$ 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 $\operatorname{sgn}(x)$.

3.3.3. Cambio brusco de la intensidad V_0 .

Consideremos nuevamente la partícula ligada al potencial δ . Clásicamente, esperaríamos que hacer el potencial más profundo atrapara aún más la partícula. Sin embargo, esto no es cierto en el sistema cuántico. En efecto, un cambio en el potencial significa que si la partícula se encuentra inicialmente en un estado ligado del sistema, después del cambio ya no se encuentra en un autoestado, y por tanto su función de onda será alguna superposición de autoestados del nuevo sistema. En particular, si el nuevo sistema tiene un espectro continuo, es decir no ligado, es posible que si una partícula inicialmente está ligada a un potencial atractivo, al hacer el potencial aún más atractivo dicha partícula quede libre. Podemos entonces hacernos, por ejemplo, la siguiente pregunta: ¿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 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 β^- 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 un autoestado del nuevo sistema es $|\langle \Psi_0 | \bar{\Psi}_n \rangle|^2$. En principio, deberíamos calcular esto y sumar sobre todos los (infinitos y continuos) n posibles. Sin embargo, podemos proceder de un modo mucho más sencillo: el espectro completo del potencial con una delta está constituido por todo el espectro continuo, más un único estado ligado. Entonces basta con calcular la probabilidad P de que la partícula quede en el estado fundamental del nuevo sistema, y la probabilidad de que quede en el continuo será $1 - P$.

Ahora bien, la probabilidad de encontrar la partícula en el estado ligado del pozo δ 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 dado 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

$$P = \left| \sqrt{2} \frac{mV_0x_0}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{3mV_0x_0}{\hbar^2}|x|\right) dx \right|^2 = \left| \sqrt{2} \frac{mV_0x_0}{\hbar^2} \frac{2\hbar^2}{3mV_0x_0} \right|^2 = \frac{8}{9}.$$

Luego, la probabilidad de encontrar la partícula en el continuo después de la modificación $V_0 \rightarrow 2V_0$ es

$$\bar{P} = 1 - P = \frac{1}{9}.$$

Por cierto, lo más probable es que la partícula permanezca en el estado ligado, pero existe una probabilidad pequeña, mas distinta de cero, de que la partícula se deslocalice al hacer el pozo más profundo, en contraste con la intuición clásica.

3.3.4. 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

$$W_0 = -\frac{V_0 x_0 m}{\hbar^2} .$$

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

$$\Psi_k^{(\text{impar})}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin(kx)$$

y

$$\Psi_k^{(\text{par})}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{W_0}{\sqrt{k^2 + W_0^2}} \left(\sin(k|x|) + \frac{k}{W_0} \cos(k|x|) \right) .$$

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 par . (La operación $*$ no tiene ningún efecto ya que las funciones de onda son reales.)

Evaluemos

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} \Psi_k^{(\text{impar})}(x) \Psi_k^{(\text{impar})}(x') dk + \int_0^{\infty} \Psi_k^{(\text{par})}(x) \Psi_k^{(\text{par})}(x') dk \\ = \sum_{\mu} \int_0^{\infty} \Psi_k^{(\mu)}(x) \Psi_k^{(\mu)}(x') dk . \end{aligned} \quad (3.25)$$

Si el conjunto de funciones $\{\Psi_k^{(\mu)}(x)\}$ con μ par e impar y $k \geq 0$ es completo, el resultado de (3.25) debería ser $\delta(x - x')$.

Evaluemos separadamente las integrales con las funciones pares e impares. Se obtiene

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \Psi_k^{(\text{impar})}(x) \Psi_k^{(\text{impar})}(x') dk &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \sin(kx) \sin(kx') dk \\ &= \frac{1}{2} [\delta(x - x') - \delta(x + x')] , \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned} \int_0^\infty \Psi_k^{(\text{par})}(x) \Psi_k^{(\text{par})}(x') dk &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty \cos(k|x|) \cos(k|x'|) dk \\ &\quad - \frac{W_0^2}{\pi} \int_0^\infty \frac{dk}{k^2 + W_0^2} \cos(k(|x| + |x'|)) \\ &\quad + \frac{W_0}{\pi} \int_0^\infty \frac{k dk}{k^2 + W_0^2} \sin(k(|x| + |x'|)) . \end{aligned}$$

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:

- (1) Reemplazamos $\int_0^\infty \dots$ por $\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \dots dk$, ya que el integrando es par,
- (2) escribimos las funciones seno y coseno en términos de exponenciales y
- (3) 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

$$-\frac{1}{2} |W_0| e^{-|W_0|(|x|+|x'|)}$$

y

$$-\frac{1}{2} W_0 e^{-|W_0|(|x|+|x'|)} ,$$

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 (o sea, 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 (o sea, 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, $\{\Psi_k^{(\mu)}(x)\}_{\mu,k}$ 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 $\{\Psi_{E_i}^{(\text{ligados})}(x)\}_{E_i < 0}$ debe 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 $V_0 > 0$ (o sea, para el caso en que el problema tiene un pozo delta), el conjunto de todas las autofunciones de energía positiva del operador $\hat{\mathbf{H}}$ no forma 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 κ y por consiguiente la función de onda obtenida para el estado ligado coincide con la obtenida en las partes 1) y 2) de este problema.

3.3.5. Transformación de Galileo.

Consideremos una partícula de masa m ligada a un pozo potencial $V(x - a)$ que se encuentra centrado en el lugar $x = a$, con a fijo. La ecuación de Schrödinger tiempo dependiente que describe el problema es

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x - a) + i \frac{2m}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi_E(x - a) e^{-iEt/\hbar} = 0,$$

donde $\Psi_E(x - a)$ es solución de la ecuación de Schrödinger estacionaria

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + V(x - a) + \kappa^2 \right) \Psi_E(x - a) = 0.$$

Supongamos ahora que la delta se traslada uniformemente con velocidad v_0 , es decir, $a(t) = a_0 + v_0 t$. ¿Cómo deben modificarse las soluciones encontradas para el caso estacionario?

Como se espera que el módulo al cuadrado sea $|\Psi_E(x - a(t))|^2$, hacemos el siguiente Ansatz para la solución:

$$\Psi_E(x - a(t)) \exp[-iEt/\hbar + i\xi(x, t)] ,$$

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 ξ y Ψ_E son funciones reales, se deduce que

$$- \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 - \frac{2m}{\hbar} \frac{\partial \xi}{\partial t} = 0 . \quad (3.26)$$

$$\Psi'_E \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} - \frac{mv_0}{\hbar} \right) - \frac{1}{2} \Psi_E \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} = 0 .$$

Las funciones Ψ'_E y Ψ_E son linealmente independientes, luego la última ecuación se cumple sólo si

$$\frac{\partial \xi}{\partial x} - \frac{mv_0}{\hbar} = 0 \quad (3.27)$$

y

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} = 0 .$$

Integrando (3.27) se obtiene

$$\xi(x, t) = \frac{mv_0}{\hbar} x + f(t) , \quad (3.28)$$

donde $f(t)$ es una función arbitraria que se determina sustituyendo (3.28) en (3.26). 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

$$\xi(x, t) = \frac{1}{\hbar} \left(mv_0 x - \frac{1}{2} mv_0^2 t \right) .$$

Usemos 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:

$$\langle x | \Psi_0(t) \rangle = \frac{\sqrt{mV_0 x_0}}{\hbar} e^{-\frac{mV_0 x_0}{\hbar^2} |x - a(t)|} e^{\frac{i}{\hbar} x mv_0} e^{-\frac{i}{\hbar} (E_0 + \frac{1}{2} mv_0^2) t} . \quad (3.29)$$

Para el valor esperado del operador energía $i\hbar\partial/\partial t \check{\mathbf{I}}$ obtenemos

$$\langle \Psi_0(t) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \check{\mathbf{I}} | \Psi_0(t) \rangle = E_0 + \frac{1}{2}mv_0^2 ,$$

o sea, la energía es la energía intrínseca del estado E_0 más la energía de traslación $mv_0^2/2$.

Por otro lado, en forma análoga al operador de traslación espacial

$$\check{\mathbf{T}}_{x_0} = e^{\frac{i}{\hbar}\check{\mathbf{p}}x_0} ,$$

el operador

$$\check{\mathbf{T}}_{p_0} = e^{\frac{i}{\hbar}\check{x}p_0}$$

corresponde a un operador que traslada a la función de estado en *momento* 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 . Éste es precisamente el origen del término $\exp(ixmv_0/\hbar)$ en la función de onda.

Así, todos los factores en (3.29) tienen interpretación: la primera exponencial asegura que clásicamente la partícula se encuentre en $x - a(t)$; las siguientes dos exponenciales son efectos cuánticos: una traslación en momentum y una en energía.

3.3.6. Ionización tras una aceleración repentina.

Considere el sistema físico consistente en 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

$$a(t) = v_0 \Theta(t) t ,$$

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

$$\langle x | \Phi(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} e^{-\frac{|x|}{2\lambda}} e^{-i\frac{E_0 t}{\hbar}} ,$$

donde hemos introducido la abreviación

$$\lambda = \frac{\hbar^2}{2mV_0x_0} .$$

Para $t > 0$ las funciones de onda del estado ligado y los estados del continuo son

$$\langle x | \Psi_0(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{2\lambda}} e^{-\frac{|x-a(t)|}{2\lambda}} e^{i\frac{mv_0}{\hbar}x} e^{-i\frac{\bar{E}_0 t}{\hbar}},$$

$$\langle x | \Psi_k^{\text{impar}}(t) \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin[k(x-a(t))] e^{i\frac{mv_0}{\hbar}x} e^{-i\frac{\bar{E}_k t}{\hbar}}$$

y

$$\langle x | \Psi_k^{\text{par}}(t) \rangle = \frac{\cos[k|x-a(t)| + \delta_k]}{\sqrt{\pi}} e^{i\frac{mv_0}{\hbar}x} e^{-i\frac{\bar{E}_k t}{\hbar}},$$

donde

$$\bar{E}_0 = E_0 + \frac{1}{2}mv_0^2, \quad \bar{E}_k = \frac{(\hbar k)^2}{2m} + \frac{1}{2}mv_0^2, \quad \delta_k = \arctan\left(\frac{1}{2k\lambda}\right).$$

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:

$$A = \langle \Psi_0(0) | \Phi(0) \rangle = \frac{1}{2\lambda} \int_{-\infty}^\infty dx e^{-\frac{|x|}{\lambda}} e^{-i\frac{mv_0}{\hbar}x} = \frac{1}{1 + (mv_0\lambda/\hbar)^2}.$$

Análogamente, se encuentra que

$$B_k = \langle \Psi_k^{\text{impar}}(0) | \Phi(0) \rangle = i\sqrt{\frac{2\lambda}{\pi}} \left[\frac{1}{1 + \left(\frac{2mv_0\lambda}{\hbar} + 2k\lambda\right)^2} - \frac{1}{1 + \left(\frac{2mv_0\lambda}{\hbar} - 2k\lambda\right)^2} \right],$$

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 . Definamos

$$\epsilon \equiv \frac{E}{E_0}.$$

También introduzcamos un parámetro adimensional relacionado con la rapidez de la delta,

$$\Gamma \equiv \frac{\frac{1}{2}mv_0^2}{E_0}.$$

La probabilidad de encontrar la partícula para $t > 0$ en el continuo con una energía entre ϵ y $\epsilon + d\epsilon$ es

$$P(\epsilon) d\epsilon = (|B_k|^2 + |C_k|^2) dk,$$

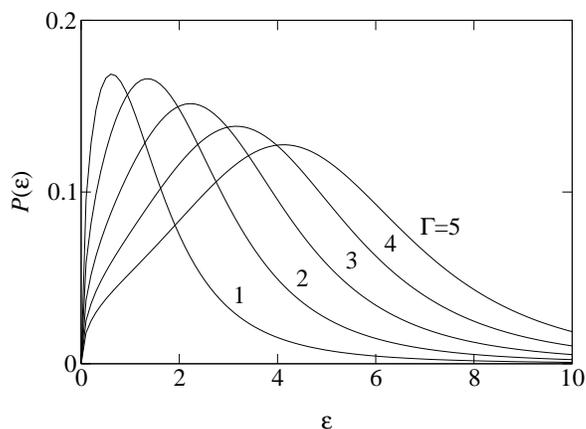


Figura 3.11: Distribución espectral de la densidad de probabilidad de encontrar la partícula, para $t > 0$, en el continuo con energía $\epsilon = E/E_0$.

o sea,

$$\begin{aligned} P(\epsilon) &= \left(\frac{dk}{d\epsilon} \right) (|B_k|^2 + |C_k|^2) \\ &= \frac{8}{\pi} \left(1 + \frac{\Gamma}{1 + \epsilon} \right) \frac{\Gamma \sqrt{\epsilon}}{[(1 + \epsilon + \Gamma)^2 - 4\Gamma\epsilon]^2} . \end{aligned}$$

La figura 3.11 muestra la distribución espectral de la densidad de probabilidad $P(\epsilon)$ para varios valores de Γ .

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 3.12 muestra P en función de Γ .

3.4. Resonancias y decaimiento exponencial.

Resolvamos el problema de una partícula de masa m moviéndose en el potencial (ver figura 3.13)

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ W_0 \delta(x - x_0) & x \geq 0 \end{cases} .$$

Este problema tiene relevancia para entender algunos fenómenos de la Física Nuclear, como el decaimiento α y los fenómenos de resonancia en experimentos de scattering.

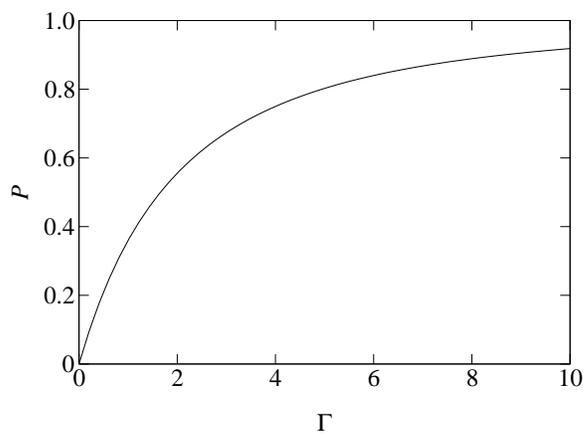


Figura 3.12: Probabilidad de ionización en función de Γ .

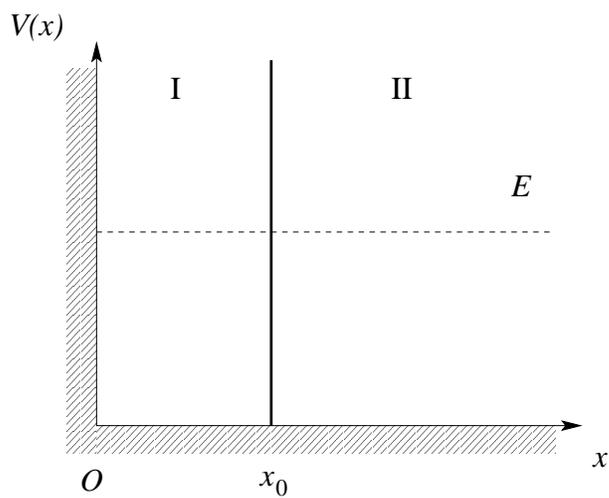


Figura 3.13: Potencial correspondiente a una pared dura con un barrera delta enfrente.

3.4.1. 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

$$\Psi_k^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(kx) = \frac{i}{\sqrt{2\pi}} (e^{-ikx} - e^{+ikx}) , \quad (3.30)$$

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 (3.30) representa una onda incidente (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

$$\Psi_k(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{i\delta_k} \cdot \begin{cases} A_k \sin(kx) & 0 \leq x \leq x_0 \\ \sin(kx + \delta_k) & x_0 \leq x \end{cases} , \quad (3.31)$$

donde δ_k y A_k vienen dados por

$$\delta_k = -kx_0 + \arctan \left[\frac{\tan(kx_0)}{1 + \frac{\alpha}{kx_0} \tan(kx_0)} \right] \quad (3.32)$$

y

$$A_k = \left\{ \sin^2(kx_0) + \left(\cos(kx_0) + \frac{\alpha}{kx_0} \sin(kx_0) \right)^2 \right\}^{-1/2} . \quad (3.33)$$

En las ecuaciones anteriores se introdujo el parámetro adimensional

$$\alpha = \frac{2\mu x_0 W_0}{\hbar^2} .$$

Notemos que δ_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, α está relacionado con la “penetrabilidad” de la barrera delta. Para $\alpha = 0$ la barrera

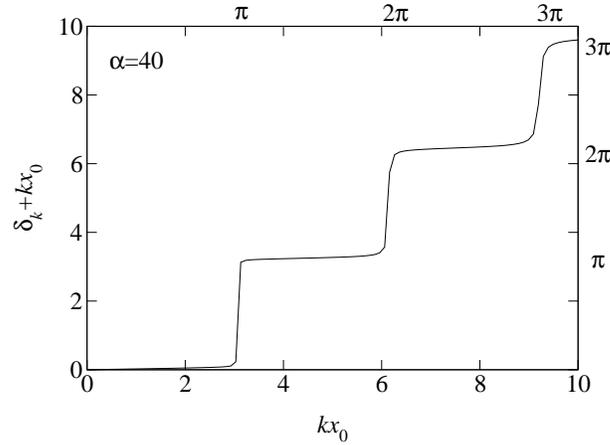


Figura 3.14: Corrimiento de fase δ_k en función del momento de la partícula incidente.

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 3.14 se muestra el corrimiento de fase δ_k en función de kx_0 para $\alpha = 40$. En la vecindad de $kx_0 = n\pi$, con $n \in \mathbb{N}$, la fase δ_k aumenta rápidamente en π . Ésta es una característica típica de *resonancias*.

Lo anterior es claro cuando calculamos 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

$$R = A_k^2 \left(1 - \frac{\sin(2kx_0)}{2kx_0} \right).$$

En la figura 3.15 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 3.16). Si $\alpha = \infty$, entonces en el pozo (entre $x = 0$ y $x = x_0$) existen estados estacionarios sólo si $kx_0 = n\pi$ (ver primer problema de este capítulo). Si α 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 Γ_n .

3.4.2. La fórmula de Breit-Wigner.

Para $x > x_0$, la función de onda $\Psi_k(x)$ se puede escribir de la forma

$$\Psi_k(x) = i \sqrt{\frac{2}{\pi}} \left(e^{-ikx} - e^{2i\delta_k} e^{ikx} \right). \quad (3.34)$$

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

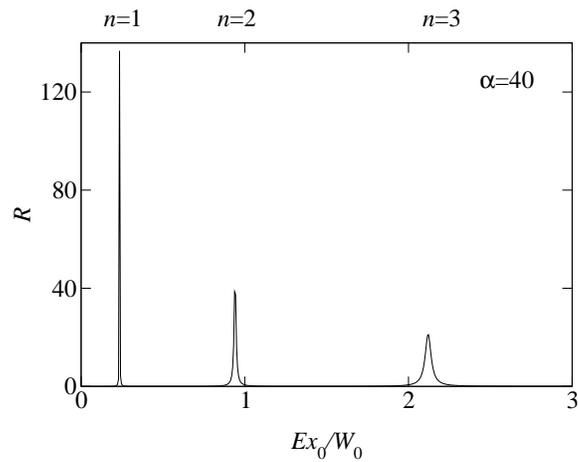


Figura 3.15: Probabilidad relativa de encontrar la partícula al interior del “pozo” en función de la energía incidente.

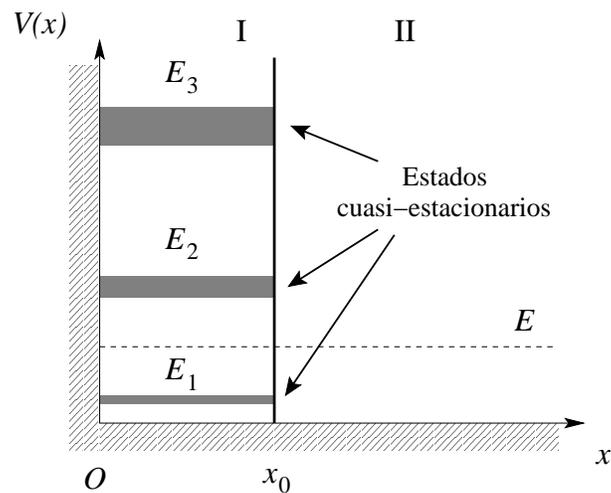


Figura 3.16: Estados cuasiestacionarios. El ancho de cada nivel se muestra con una banda achurada.

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

$$S = S^{(0)} \exp \left[2i \arctan \left(\frac{1}{2\beta} \right) \right] = S^{(0)} \frac{2\beta + i}{2\beta - i} = S^{(0)} \left(1 + i \frac{1}{\beta - \frac{i}{2}} \right) ,$$

donde $S^{(0)}$ (que es una función que varía suavemente con k) y β vienen, respectivamente, dados por

$$S^{(0)} = e^{-2ikx_0}$$

y

$$\beta = \frac{1 + \frac{\alpha}{kx_0} \tan(kx_0)}{2 \tan(kx_0)} . \quad (3.35)$$

Evaluemos β 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

$$\tan(kx_0) \approx \tan(\bar{k}_n x_0) + x_0(k - \bar{k}_n) = -\frac{\bar{k}_n x_0}{\alpha} + x_0 \Delta k . \quad (3.36)$$

Sustituyendo este resultado en la ecuación que define β y reteniendo sólo los términos de menor orden en $\Delta k = k - \bar{k}_n$, se encuentra que

$$\beta \approx -\frac{\alpha(\alpha + 1)\Delta k}{2\bar{k}_n^2 x_0} \approx -\frac{\alpha(\alpha + 1)\mu(E - \bar{E}_n)}{2\hbar^2 x_0 \bar{k}_n^3} = -\frac{E - \bar{E}_n}{\Gamma_n} , \quad (3.37)$$

donde Γ_n está definido por

$$\Gamma_n = \frac{2\hbar^2 \bar{k}_n^3 x_0}{\mu\alpha(\alpha + 1)} \stackrel{\alpha \gg 1}{\approx} \frac{2\hbar^2 \pi^3 n^3}{x_0^2 \mu \alpha^2} . \quad (3.38)$$

En el proceso de obtener la ecuación (3.37) se tuvo que suponer que $\alpha \cdot \Delta k \ll \bar{k} \ll \bar{k}_n$. Sustituyendo (3.37) en la expresión para la matriz S se obtiene la así llamada *fórmula de Breit-Wigner* para una resonancia aislada:

$$S = S^{(0)} \left(1 - i \frac{\Gamma_n}{(E - \bar{E}_n) + \frac{i}{2}\Gamma_n} \right) .$$

El significado de Γ_n ahora es claro: es el ancho de la resonancia situada en $E = \bar{E}_n = \hbar^2 \bar{k}_n^2 / (2\mu)$.

En la figura 3.17 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.

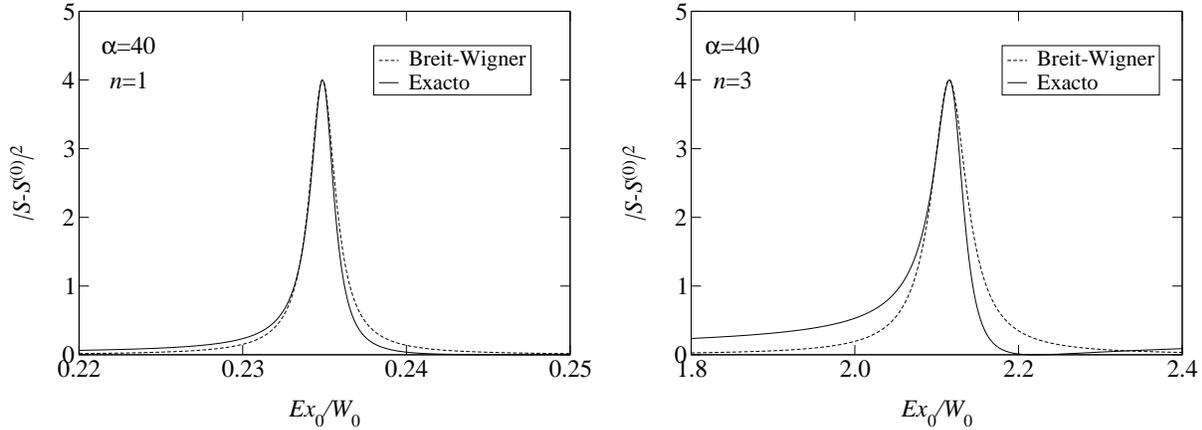


Figura 3.17: Forma de la primera y tercera resonancia. Comparación entre el resultado exacto, y el obtenido con la fórmula de Breit-Wigner.

3.4.3. 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:

$$W_0(t) = \begin{cases} \infty & t < 0 \\ W_0 \ (0 < W_0 < \infty) & t \geq 0 \end{cases} .$$

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

$$\phi_n(x, t) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{x_0}} \sin\left(\frac{n\pi}{x_0} x\right) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} & 0 \leq x \leq x_0 \\ 0 & x < 0, \ x > x_0 \end{cases} .$$

Asumamos que para $t < 0$ el sistema se encuentra en un particular estado (ligado) n . Por supuesto que en tal caso uno tiene una probabilidad 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 α 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

$$\left\{ \tilde{\Psi}_k(x) \right\}_{k>0} = \left\{ e^{-i\delta_k} \Psi_k(x) \right\}_{k>0}$$

[donde $\Psi_k(x)$ viene dado por la ecuación (3.34)], 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

$$\tilde{\Psi}_k(x) = A_k \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \sin(kx) \quad , \quad 0 \leq x \leq x_0 \quad .$$

Expandiendo $\phi_n(x, 0)$ en términos de este conjunto completo se obtiene

$$\phi_n(x, 0) = \int_0^\infty \gamma_k \tilde{\Psi}_k(x) dk \quad ,$$

donde los coeficientes de expansión son

$$\begin{aligned} \gamma_k &= \int_0^{x_0} \phi_n(x, 0) \tilde{\Psi}_k(x) dx \\ &= \frac{2A_k}{\sqrt{\pi x_0}} \int_0^{x_0} \sin\left(\frac{n\pi}{x_0}x\right) \sin(kx) dx \quad . \end{aligned} \quad (3.39)$$

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 (3.39) 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 γ_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 (3.39) vale esencialmente $x_0/2$, luego

$$\gamma_x \stackrel{k \text{ en vecindad de } k_n}{\approx} \sqrt{\frac{x_0}{\pi}} A_k \quad .$$

Conociendo γ_k podemos ahora obtener la evolución temporal de ϕ_n :

$$\phi_n(x, t) = \int_0^\infty \gamma_k \tilde{\Psi}_k(x) e^{i\frac{\hbar k^2}{2\mu}t} dk \quad .$$

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:

$$\begin{aligned}
 P(t) &= \int_0^{x_0} dx |\phi_n(x, t)|^2 \\
 &= \int_0^{x_0} dx \left| \int_0^\infty \gamma_k \tilde{\Psi}_k(x) e^{i\frac{\hbar k^2}{2\mu} t} dk \right|^2 \\
 &\approx \int_0^{x_0} dx \left| \int_{k \approx k_n} \sqrt{\frac{x_0}{\pi}} A_k \left(A_k \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(kx) \right) e^{i\frac{\hbar k^2}{2\mu} t} dk \right|^2 \\
 &\approx \frac{2x_0}{\pi^2} \int_0^{x_0} dx \sin^2(k_n x) \left| \int_{k \approx k_n} A_k^2 e^{i\frac{\hbar k^2}{2\mu} t} dk \right|^2 \\
 &\approx \left(\frac{x_0}{\pi} \right)^2 \left| \int_{k \approx k_n} A_k^2 e^{i\frac{\hbar k^2}{2\mu} t} dk \right|^2 .
 \end{aligned}$$

La amplitud A_k y el corrimiento de fase δ_k están estrechamente ligados a través de la continuidad de la función de onda en $x = x_0$. De la ecuación (3.31) se encuentra que

$$A_k = \frac{\sin(kx_0 + \delta_k)}{\sin(kx_0)} .$$

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 (3.32) y (3.35) se encuentra que

$$\sin(kx_0 + \delta_k) = \sin\left(\arctan \frac{2}{\beta}\right) = \left(1 + \frac{\beta^2}{4}\right)^{-1/4} .$$

También [en analogía con la ecuación (3.36)]

$$\sin(kx_0) \approx -\frac{\bar{k}x_0}{\alpha} + x_0\Delta k \stackrel{\alpha\Delta k \ll k_n}{\approx} -\frac{\bar{k}_n x_0}{\alpha} \approx -\frac{n\pi}{\alpha} .$$

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 ξ viene dado por

$$\xi = \left(\frac{\alpha}{n\pi}\right)^2 .$$

Con estos resultados se encuentra para la probabilidad $P(t)$ la expresión

$$\begin{aligned}
 P(t) &\approx \left(\frac{x_0}{\pi} \right)^2 \left| \int_{k \approx \bar{k}_n} \frac{\xi}{1 + \xi^2 x_0^2 (k - \bar{k}_n)^2} e^{i\frac{\hbar k^2}{2\mu} t} dk \right|^2 \\
 &\approx \left(\frac{x_0}{\pi} \xi \right)^2 \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\frac{\hbar k^2}{2\mu} t}}{1 + \xi^2 x_0^2 (k - \bar{k}_n)^2} dk \right|^2 \\
 &= e^{-t/\tau_n} ,
 \end{aligned} \tag{3.40}$$

donde

$$\tau_n = \frac{\mu x_0^2 \alpha^2}{2 n^3 \pi^3 \hbar} . \quad (3.41)$$

De la ecuación (3.40) se deduce que la probabilidad de encontrar la partícula en la región I decae exponencialmente con una vida media τ_n . Esto es por supuesto consistente con la observación experimental de que el número de átomos radiactivos decae exponencialmente. Comparando (3.41) con (3.38) se obtiene una relación entre la vida media τ_n y el ancho de la resonancia Γ_n :

$$\tau_n = \frac{\hbar}{\Gamma_n} . \quad (3.42)$$

Este último resultado es consistente con el principio de incerteza. En efecto, un estado resonante tiene asociada una incerteza en energía $\Delta E \sim \Gamma_n$, mientras que el tiempo que el sistema permanece en dicha resonancia (el tiempo que tarda en dejar la región I, es decir en “decaer”) es $\Delta t \sim \tau_n$. Así, de (3.42), $\Delta t \Delta E \sim \hbar$.

3.4.4. Energías complejas.

Deseamos nuevamente describir, procediendo de una manera distinta, el decaimiento de un estado 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.

Hacemos 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

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dx^2} + W_0 \delta(x - x_0) - k^2 \right) \Psi_E(x, t) = 0 .$$

Busquemos soluciones que en las regiones I y II tengan la forma:

$$\begin{cases} \Psi_I &= A \sin kx \\ \Psi_{II} &= B e^{ik(x-x_0)} \end{cases} . \quad (3.43)$$

Ψ_I se anula en el origen y Ψ_{II} corresponde a una onda que se traslada hacia la derecha. La continuidad de la onda en $x = x_0$ implica que

$$A \sin(kx_0) = B .$$

En $x = x_0$ la derivada de la función de onda debe cumplir

$$\Psi'_{\text{II}}(x_0^+) - \Psi'_{\text{I}}(x_0^-) = \frac{2\mu}{\hbar^2} W_0 \Psi(x_0) .$$

Esta condición nos da la relación

$$ik \sin(kx_0) - k \cos(kx_0) = \frac{2\mu}{\hbar^2} W_0 \sin(kx_0) .$$

Introduciendo nuevamente el parámetro adimensional α , la última ecuación queda

$$ikx_0 \sin(kx_0) - kx_0 \cos(kx_0) = \alpha \sin(kx_0) . \quad (3.44)$$

La ecuación anterior (3.44) es compleja, y por tanto su solución serán k complejos. Por lo tanto, las energías también serán complejas. Esto en principio es inaceptable, pues sabemos que las energías son los autovalores de un operador autohermítico (el Hamiltoniano). El problema es que hemos impuesto, en (3.43), que la solución en la región I sea la solución estacionaria (real) de un pozo infinito, mientras en II sea una onda plana (imaginaria). Esta contradicción sólo puede resolverse si k es imaginario. Veremos, sin embargo, que es posible interpretar adecuadamente estas energías complejas.

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

$$\sin(kx_0) \approx \epsilon .$$

Con estas aproximaciones la ecuación (3.44) queda

$$i(n\pi + \epsilon)\epsilon - (n\pi + \epsilon) = \alpha\epsilon .$$

Despreciando ϵ 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

$$kx_0 = n\pi - i \left(\frac{n\pi}{\alpha} \right)^2$$

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:

$$\begin{aligned}\rho_I(x, t) &\approx (\Psi_I(x)e^{-iEt/\hbar})^* (\Psi_I(x)e^{-iEt/\hbar}) \\ &= (\Psi_I^*(x)e^{+iE^*t/\hbar}) (\Psi_I(x)e^{-iEt/\hbar}) \\ &= |\Psi_I(x)|^2 e^{2\text{Im}(E)t/\hbar} .\end{aligned}\tag{3.45}$$

Vemos que la probabilidad de encontrar la partícula en la región I decae exponencialmente con una vida media τ dada por

$$\begin{aligned}\tau &= -\frac{\hbar}{2\text{Im}(E)} \\ &= \frac{\mu x_0^2 \alpha^2}{2n^3 \pi^3 \hbar} ,\end{aligned}$$

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 $\check{\mathbf{H}}^\dagger = \check{\mathbf{H}}$.

Notemos también que en el Problema 2-17, un potencial imaginario permite representar fuentes o sumideros de probabilidad, y que ondas planas son absorbidas con una tasa relacionada con la parte imaginaria del potencial. Esto es análogo al resultado (3.45). En este caso, la energía adquirió una parte imaginaria no porque el potencial la tenga, sino por efecto de introducir una solución estacionaria en un problema no estacionario.

3.4.5. Consideraciones semiclásicas.

En ocasiones, recurriendo a argumentos semiclásicos, es posible obtener, en forma sencilla, resultados que al menos cualitativamente son correctos. Para mostrarlo resolveremos por tercera vez el problema del decaimiento de las soluciones de la pared infinita con una delta enfrente (Fig. 3.13), esta vez pensando en términos de partículas y colisiones.

Consideremos una partícula clásica de masa μ y energía $E_n = \hbar^2 k_n^2 / 2\mu$, 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

$$T = \frac{2x_0}{v_n} = \frac{2x_0}{\left(\frac{\hbar k_n}{\mu}\right)} .\tag{3.46}$$

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

$$P = \frac{1}{1 + \left(\frac{\alpha}{2k_n x_0}\right)^2} \xrightarrow{\alpha \gg n\pi} \left(\frac{2k_n x_0}{\alpha}\right)^2 .\tag{3.47}$$

El tiempo medio τ 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

$$N = \frac{1}{P}. \quad (3.48)$$

Multiplicando (3.48) por T , notando que $\tau_n = NT$ y usando las ecuaciones (3.46) y (3.47) en el límite $P \ll 1$, se obtiene para τ_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.

3.5. Scattering sobre barreras.

3.5.1. La matriz de transferencia.

Consideremos una barrera centrada en el origen, descrita por un potencial $V(x)$, con $V(x) = 0$ si $|x| > \Delta$.

La solución general con energía positiva $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$ para este problema es de la forma

$$\Phi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{si } x < -\Delta \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx} & \text{si } x > \Delta \end{cases}, \quad (3.49)$$

es decir, ondas planas propagándose hacia la izquierda y la derecha, a ambos lados de la barrera. Sin embargo, nos interesa modelar la situación física en que una partícula incide desde la izquierda desde la barrera. En ese caso, es claro que $D = 0$, pues no tendría sentido una onda plana propagándose desde $+\infty$. Notemos que podemos interpretar el término $\Phi_i(x) = Ae^{ikx}$ como la onda “incidente”, $\Phi_r(x) = Be^{-ikx}$ como la onda “reflejada”, y $\Phi_t(x) = Ce^{ikx}$ como la onda “transmitida”. (A pesar de la cercana analogía con el problema análogo de incidencia sobre una interfase en Óptica, los términos “incidente”, “reflejada” y “transmitida” deben ser usados con precaución, puesto que tienen una connotación temporal —*primero* existe la onda incidente, que *después* de chocar con la barrera se convierte en una onda reflejada y transmitida— que no existe en el problema cuántico, ya que estamos resolviendo la ecuación de Schrödinger tiempo independiente.)

Los coeficientes A , B , y C , en tanto, se deberían obtener a partir de resolver la ecuación de Schrödinger, más la condición de normalización de la función de onda. Equivalentemente, en vez de normalizar la función de onda, y puesto que un factor global en Φ no afecta la descripción física, pongamos $A = 1$.

En este caso, la solución queda de la forma

$$\Phi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + r_{\rightarrow}e^{-ikx} & \text{si } x < -\Delta \\ t_{\rightarrow}e^{ikx} & \text{si } x > +\Delta \end{cases} . \quad (3.50)$$

(3.50) corresponde, entonces, a una onda monocromática de energía $E = \hbar^2 k^2 / (2m)$, y amplitud 1, que incide sobre la barrera por la izquierda. Acá los números complejos r_{\rightarrow} y t_{\rightarrow} son las *amplitudes* o *coeficientes de reflexión y transmisión* de la barrera para una onda que incide por la izquierda.

Observemos que, siendo el potencial real, la corriente de probabilidad debe conservarse a ambos lados de la barrera, $j|_{x<-\Delta} = j|_{x>\Delta}$, lo cual, puesto que $\Phi|_{x<-\Delta} = \Phi_i + \Phi_r$, se reescribe, usando (2.70),

$$j_i + j_r = j_t , \quad (3.51)$$

con

$$j_p = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \left(\Phi_p^*(x) \frac{d\Phi_p(x)}{dx} \right) , \quad p = i, r, t , \quad (3.52)$$

y, en este caso,

$$|r_{\rightarrow}|^2 + |t_{\rightarrow}|^2 = 1 . \quad (3.53)$$

Como hemos indicado, conocido el potencial $V(x)$ se pueden, en principio, evaluar explícitamente las amplitudes r_{\rightarrow} y t_{\rightarrow} . En lo que sigue supondremos conocida esta parte del problema, y obtendremos resultados que son válidos para scattering sobre cualquier potencial de soporte finito.

Generalicemos un poco el desarrollo anterior. 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 notemos primeramente que si Φ , dado por (3.50), es solución de la ecuación de Schrödinger, entonces Φ^* 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:

$$\xi\Phi + \eta\Phi^* = \begin{cases} (\xi + \eta r_{\rightarrow}^*)e^{ikx} + (\xi r_{\rightarrow} + \eta)e^{-ikx} & \text{si } x < -\Delta \\ \xi t_{\rightarrow}e^{ikx} + \eta t_{\rightarrow}^*e^{-ikx} & \text{si } x > \Delta \end{cases} . \quad (3.54)$$

Identificando

$$\begin{aligned} u_1 &= \xi + \eta r_{\rightarrow}^* , \\ u_2 &= \xi r_{\rightarrow} + \eta , \end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}v_1 &= \xi t_{\rightarrow} , \\v_2 &= \eta t_{\rightarrow}^* ,\end{aligned}$$

se deduce que

$$u_1 = \frac{1}{t_{\rightarrow}} v_1 + \frac{r_{\rightarrow}^*}{t_{\rightarrow}^*} v_2$$

y

$$u_2 = \frac{r_{\rightarrow}}{t_{\rightarrow}} v_1 + \frac{1}{t_{\rightarrow}^*} v_2 .$$

El resultado anterior lo podemos resumir en forma matricial escribiendo

$$\begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \mathcal{M} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} , \quad (3.55)$$

con

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} 1/t_{\rightarrow} & r_{\rightarrow}^*/t_{\rightarrow}^* \\ r_{\rightarrow}/t_{\rightarrow} & 1/t_{\rightarrow}^* \end{pmatrix} . \quad (3.56)$$

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 (3.55) y (3.56) se tiene

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 0 \\ t_{\leftarrow} \end{pmatrix} &= \mathcal{M} \begin{pmatrix} r_{\leftarrow} \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1/t_{\rightarrow} & r_{\rightarrow}^*/t_{\rightarrow}^* \\ r_{\rightarrow}/t_{\rightarrow} & 1/t_{\rightarrow}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_{\leftarrow} \\ 1 \end{pmatrix} , \end{aligned}$$

o sea,

$$\frac{r_{\leftarrow}}{t_{\rightarrow}} + \frac{r_{\rightarrow}^*}{t_{\rightarrow}^*} = 0$$

y

$$r_{\leftarrow} \frac{r_{\rightarrow}}{t_{\rightarrow}} + \frac{1}{t_{\rightarrow}^*} = t_{\leftarrow} .$$

De aquí se encuentran las relaciones buscadas

$$t_{\leftarrow} = t_{\rightarrow} \quad (3.57)$$

y

$$r_{\leftarrow} = -r_{\rightarrow}^* \frac{t_{\rightarrow}}{t_{\rightarrow}^*} . \quad (3.58)$$

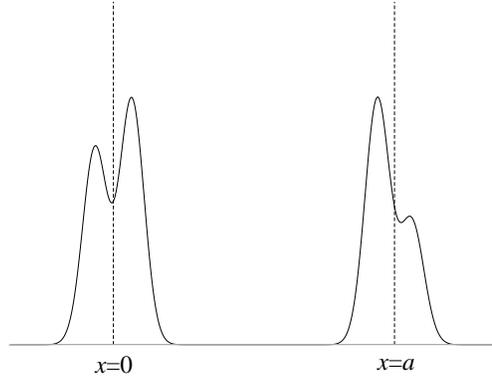


Figura 3.18: Dos barreras, una centrada en $x = 0$ y la otra en $x = a$.

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:

$$r_{\rightarrow} \longrightarrow r_{\rightarrow} e^{2ika} \quad .$$

3.5.2. 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, o sea, no hay traslape entre $V_1(x)$ y $V_2(x)$ (ver figura 3.18). La matriz de transferencia de cada una de las barreras será

$$\mathcal{M}_1 = \begin{pmatrix} 1/t_{\rightarrow}^{(1)} & r_{\rightarrow}^{(1)*}/t_{\rightarrow}^{(1)*} \\ r_{\rightarrow}^{(1)}/t_{\rightarrow}^{(1)} & 1/t_{\rightarrow}^{(1)*} \end{pmatrix} \quad (3.59)$$

y

$$\mathcal{M}_2 = \begin{pmatrix} 1/t_{\rightarrow}^{(2)} & e^{-2ika} r_{\rightarrow}^{(2)*}/t_{\rightarrow}^{(2)*} \\ e^{2ika} r_{\rightarrow}^{(2)}/t_{\rightarrow}^{(2)} & 1/t_{\rightarrow}^{(2)*} \end{pmatrix} \quad (3.60)$$

Podemos considerar ahora las dos barreras como una única barrera de estructura más complicada y asociarle a ella una matriz de transferencia

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} 1/t_{\rightarrow} & r_{\rightarrow}^*/t_{\rightarrow}^* \\ r_{\rightarrow}/t_{\rightarrow} & 1/t_{\rightarrow}^* \end{pmatrix} \quad .$$

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 (3.57) y (3.58), se pueden reescribir de la manera siguiente:

$$t_{\rightarrow} = \frac{t_{\rightarrow}^{(1)} t_{\rightarrow}^{(2)}}{1 - e^{2ika} r_{\rightarrow}^{(2)} r_{\leftarrow}^{(1)}} \quad (3.61)$$

y

$$r_{\rightarrow} = r_{\rightarrow}^{(1)} + \frac{t_{\rightarrow}^{(1)} r_{\rightarrow}^{(2)} t_{\leftarrow}^{(1)} e^{2ika}}{1 - e^{2ika} r_{\rightarrow}^{(2)} r_{\leftarrow}^{(1)}} . \quad (3.62)$$

Expandiendo estas expresiones en serie podemos identificar cada uno de los términos con un cierto proceso virtual. En efecto,

$$t_{\rightarrow} = t_{\rightarrow}^{(1)} t_{\rightarrow}^{(2)} + e^{2ika} t_{\rightarrow}^{(1)} r_{\rightarrow}^{(2)} r_{\leftarrow}^{(1)} t_{\rightarrow}^{(2)} + e^{4ika} t_{\rightarrow}^{(1)} (r_{\rightarrow}^{(2)} r_{\leftarrow}^{(1)})^2 t_{\rightarrow}^{(2)} + \dots . \quad (3.63)$$

La figura 3.19 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, mientras que el número y la dirección de las reflexiones y transmisiones en cada término de (3.63) coincide con el observado en la figura 3.19. Por ejemplo, consideremos el segundo término de (3.63), $e^{2ika} t_{\rightarrow}^{(1)} r_{\rightarrow}^{(2)} r_{\leftarrow}^{(1)} t_{\rightarrow}^{(2)}$. 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 $2a$. Por lo tanto, este término corresponde a un “proceso virtual” correspondiente a un doble rebote entre las dos barreras, después de lo cual la partícula emerge a la derecha.

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 3.20 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:

$$T_j = |t_{\rightarrow}^{(j)}|^2 , \quad R_j = |r_{\rightarrow}^{(j)}|^2 , \quad j = 1, 2.$$

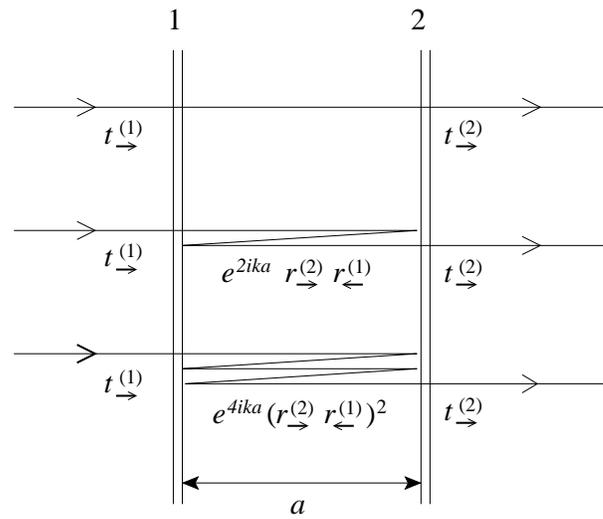


Figura 3.19: Representación gráfica de los procesos de transmisión con 0, 2, y 4 rebotes virtuales entre ambas barreras.

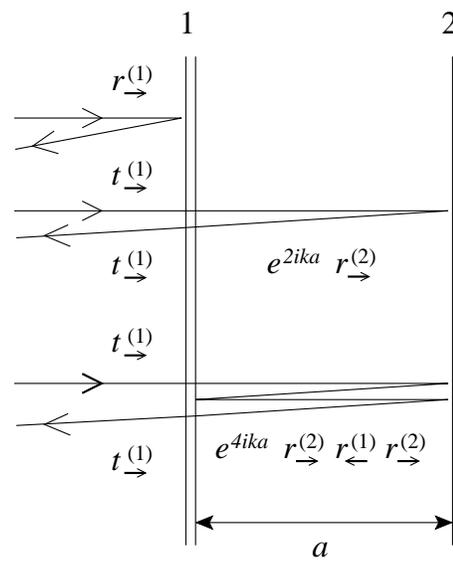


Figura 3.20: Representación de los procesos de reflexión con 0, 1 y 3 rebotes virtuales entre ambas barreras.

Para las probabilidades de transmisión y reflexión (a través de la barrera doble) se obtiene

$$T = \frac{T_1 T_2}{|1 + \sqrt{R_1 R_2} e^{-i\theta}|^2}, \quad (3.64)$$

$$R = \left| \frac{\sqrt{R_1} + \sqrt{R_2} e^{i\theta}}{1 + \sqrt{R_1 R_2} e^{-i\theta}} \right|^2, \quad (3.65)$$

donde

$$\theta = \theta_0 + 2ka, \quad ,$$

con θ_0 una fase constante. Es fácil verificar que

$$T + R = 1. \quad (3.66)$$

Observemos que esto es equivalente a (3.51), definiendo

$$T = \frac{j_t}{j_i}, \quad R = \frac{j_r}{j_i}. \quad (3.67)$$

(Esta precisión es importante. Aparentemente, (3.53) dice que podríamos, equivalentemente, haber definido $T = |t_{\rightarrow}|^2$, $R = |r_{\rightarrow}|^2$. Sin embargo, de (3.52) se sigue que $j_r = \hbar k |r_{\rightarrow}|^2/m$, $j_t = \hbar k |t_{\rightarrow}|^2/m$, $j_i = \hbar k/m$, y por lo tanto (3.53) sólo es correcta si a ambos lados de la barrera k es el mismo, que corresponde al caso que estamos estudiando. Sin embargo, con la definición (3.67), (3.66) siempre es correcta.)

Al aleatorizar la fase correspondiente a la distancia a obtenemos el resultado clásico

$$\langle T \rangle_{\text{promedio}} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{T_1 T_2}{|1 + \sqrt{R_1 R_2} e^{-i\theta}|^2} = \frac{T_1 T_2}{(1 - R_1 R_2)} = T_{\text{clásico}}.$$

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 3.5.2, se obtiene

$$\begin{aligned} T_{\text{clásico}} &= T_1 T_2 + T_1 R_2 R_1 T_2 + T_1 R_2 R_1 R_2 R_1 T_2 + \dots \\ &= T_1 (1 + R_2 R_1 + R_2 R_1 R_2 R_1 + R_2 R_1 R_2 R_1 R_2 R_1 + \dots) T_2 \\ &= \frac{T_1 T_2}{(1 - R_1 R_2)}. \end{aligned}$$

Análogamente, para el coeficiente de reflexión se obtiene

$$R_{\text{clásico}} = R_1 + \frac{(T_1)^2 R_2}{1 - R_1 R_2}.$$

Notemos que $T_{\text{clásico}} < T_1$ y $T_{\text{clásico}} < T_2$, 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

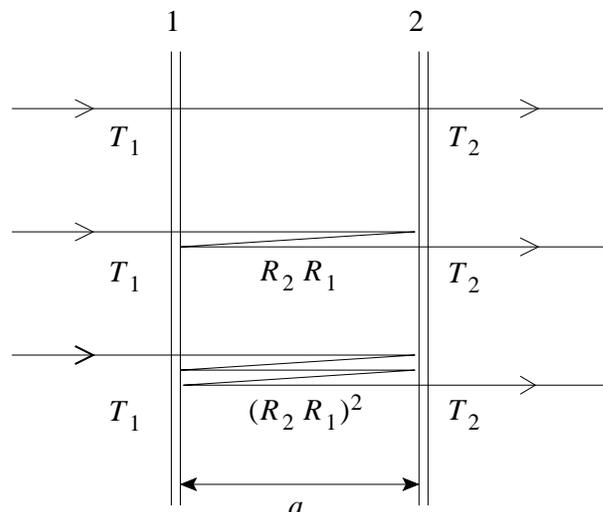


Figura 3.21: Representación de los procesos de transmisión con 0, 2, y 4 rebotes reales entre ambas barreras.

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* (ver siguiente sección).

3.5.3. 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 de 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.

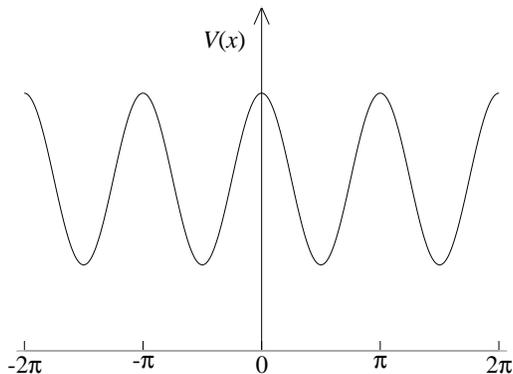


Figura 3.22: Potencial periódico.

3.6. 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 3.22.)

3.6.1. Teorema de Bloch.

Consideremos una partícula de masa m en un potencial periódico unidimensional (la generalización a potenciales periódicos en dos o más dimensiones no presenta mayor dificultad).

En primer lugar, notemos que

$$\mathbf{H}(\check{\mathbf{x}} + a\check{\mathbf{1}}, \check{\mathbf{p}}) = \mathbf{H}(\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}}) ,$$

o sea, el Hamiltoniano $\check{\mathbf{H}}$ es invariante frente a una traslación $x \rightarrow x + a$. Se tiene, por lo tanto, que

$$\check{\mathbf{U}}_a^{-1} \mathbf{H}(\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}}) \check{\mathbf{U}}_a = \mathbf{H}(\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}}) ,$$

es decir, $\check{\mathbf{H}}$ conmuta con el operador de traslaciones $\check{\mathbf{U}}_a = \exp(-ia\check{\mathbf{p}}/\hbar)$. Lo anterior nos permite elegir las autofunciones del problema de manera que sean autofunciones simultáneamente de $\check{\mathbf{H}}$ y $\check{\mathbf{U}}_a$. Todo esto es muy natural, por cierto: si el Hamiltoniano es invariante ante traslaciones, se pueden encontrar autofunciones simultáneas de $\check{\mathbf{H}}$ y del operador de traslaciones (continuas); en este caso, el Hamiltoniano es invariante ante traslaciones en a , y las autofunciones lo serán del operador de traslaciones discretas $\check{\mathbf{U}}_a$.

¿Cuáles son las autofunciones de $\check{\mathbf{U}}_{-a}$? Sea $|\Psi\rangle$ una autofunción de $\check{\mathbf{U}}_{-a}$ con autovalor λ , es decir

$$\check{\mathbf{U}}_{-a} |\Psi\rangle = \lambda |\Psi\rangle .$$

Dado que \check{U}_{-a} es un operador unitario, sus autovalores poseen módulo 1, siendo del tipo

$$\lambda \equiv e^{ika} , \quad k \in \mathbb{R} ,$$

o sea,

$$\check{U}_{-a}|\Psi\rangle = e^{ika}|\Psi\rangle .$$

Esta última relación, en la representación de coordenadas, queda

$$\langle x | \check{U}_{-a} | \Psi \rangle = \langle x + a | \Psi \rangle = e^{ika} \langle x | \Psi \rangle$$

o

$$\Psi(x + a) = e^{ika} \Psi(x) . \quad (3.68)$$

Definamos $u_k(x)$ por

$$u_k(x) \equiv e^{-ikx} \Psi(x) . \quad (3.69)$$

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. Notemos además que k no es la energía, pues no está relacionado con los autovalores del Hamiltoniano, sino con los autovalores del operador de traslaciones discretas \check{U}_a .

De los resultados anteriores concluimos:

Teorema: 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), lo cual es muy natural, ya que el potencial es periódico, y cualquier región de ancho a es equivalente a todas las otras.

Observemos, además, que todos los vectores de onda $k + 2\pi n/a$, 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

$$-\frac{\pi}{a} < k \leq \frac{\pi}{a} \quad (3.70)$$

generan todos los autovalores posibles de \check{U}_a .

Los resultados que hemos obtenido no son sólo de interés académico. Un cristal puede ser modelado como un arreglo periódico de iones fijos, determinando así la red cristalina. Dichos iones generan un potencial (eléctrico) periódico, al cual están sujetos los electrones. El problema de encontrar las energías de un electrón en una red cristalina es precisamente el que hemos considerado en esta sección, y por tanto sus funciones de onda serán de la forma descrita por el Teorema de Bloch. Para encontrar los valores de k , en tanto, basta considerar la zona (3.70), que, en el contexto de Física del Sólido, se denomina la *primera zona de Brillouin*.

3.6.2. Modelo de Kroning-Penney.

Existe un caso de un potencial periódico unidimensional que es relativamente fácil de tratar: 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 (3.69). El problema se reduce a calcular las funciones periódicas $u_k(x)$ y encontrar la relación entre k y la energía E . Más aún, basta resolver el problema en $0 < x < a$, ya que fuera de ese intervalo las soluciones se pueden encontrar usando (3.68).

Pues bien, 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:

$$u_k(x) = Ae^{i(q-k)x} + Be^{i(q+k)x} . \quad (3.71)$$

Para determinar los coeficientes de expansión A, B , imponemos las dos condiciones de borde usuales:

1. La función de onda $\Psi(x)$ debe ser continua en $x = na$, $n \in \mathbb{Z}$. 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 recordemos que sólo tenemos la función de onda para $0 < x < a$, dada por (3.71), entonces, en principio, no conocemos $u_k(-\epsilon)$. Sin embargo, usando la periodicidad de la onda de Bloch,

$$u_k(-\epsilon) = u_k(a - \epsilon)$$

de modo que la condición de continuidad queda

$$u_k(\epsilon) - u_k(a - \epsilon) \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0 ,$$

y u_k es evaluada sólo en puntos en el intervalo $(0, a)$. Usando la ecuación (3.71), la condición de continuidad queda finalmente

$$A + B = Ae^{i(q-k)a} + Be^{-i(q+k)a} . \quad (3.72)$$

2. 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

$$E \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \Psi(x) dx + \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d\Psi(x)}{dx} \Big|_{x=\epsilon} - \frac{d\Psi(x)}{dx} \Big|_{x=-\epsilon} \right] = W_0 \Psi(0) . \quad (3.73)$$

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 $u_k(x)$, para poder emplear (3.72),

$$\begin{aligned} \frac{d\Psi}{dx} \Big|_{x=-\epsilon} &= \frac{d}{dx} (u_k(x)e^{ikx}) \Big|_{x=-\epsilon} \\ &= \frac{d}{d(x-a)} (u_k(x-a)e^{ik(x-a)}) \Big|_{x=a-\epsilon} \\ &= \frac{d}{dx} (u_k(x)e^{ikx}e^{-ika}) \Big|_{x=a-\epsilon} \\ &= e^{-ika} \left(\frac{d\Psi(x)}{dx} \right)_{x=a-\epsilon} \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} e^{-ika} iq (Ae^{iqa} - Be^{-iqa}) . \end{aligned}$$

Además

$$E \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \Psi(x) dx \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} 0$$

y

$$\Psi(0) = A + B ,$$

luego (3.73) queda:

$$\frac{\hbar^2}{2m} iq (A - B - Ae^{i(q-k)a} + Be^{-i(q+k)a}) = W_0(A + B) . \quad (3.74)$$

Las condiciones de borde anteriores nos dan un sistema homogéneo de dos ecuaciones para los coeficientes A y B . De (3.72) se deduce que

$$B = A \frac{1 - e^{i(q-k)a}}{e^{-i(q+k)a} - 1} ,$$

y reemplazando este resultado en (3.74) se obtiene

$$\frac{A\hbar^2}{2m} iq \left[1 + \frac{1 - e^{i(q-k)a}}{1 - e^{-i(q+k)a}} - e^{i(q-k)a} - \frac{e^{-i(q+k)a} (1 - e^{i(q-k)a})}{1 - e^{-i(q+k)a}} \right] = W_0 A \left[1 - \frac{1 - e^{i(q-k)a}}{1 - e^{-i(q+k)a}} \right] ,$$

de donde

$$A (e^{ika} - e^{-iqa} - e^{iqa} + e^{-ika}) = A \frac{mW_0}{\hbar^2 qi} (e^{iqa} - e^{-iqa}) ,$$

o sea

$$\left(\cos ka - \cos qa - \frac{mW_0}{\hbar^2 q} \sin qa \right) A = 0 .$$

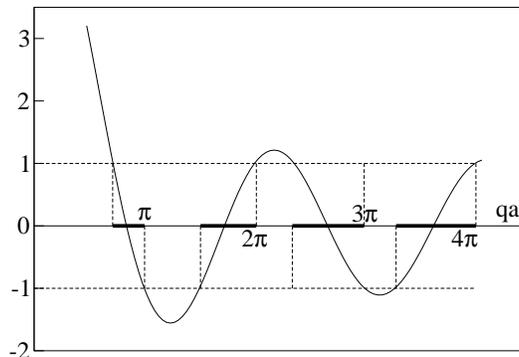


Figura 3.23: Gráfico de la ecuación (3.62) para $mW_0a/\hbar^2 = 3\pi/2$.

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:

$$\cos ka = \cos qa + \frac{mW_0a}{\hbar^2} \frac{\sin qa}{qa}. \quad (3.75)$$

Esta ecuación puede ser resuelta gráficamente. La figura 3.23 muestra el resultado que se obtiene para

$$\frac{mW_0a}{\hbar^2} = \frac{3\pi}{2}.$$

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). Ya hemos visto que, cuando tenemos una partícula con energía sobre el máximo de un potencial, el espectro es continuo. Para estados ligados, el espectro es discreto. Ahora encontramos que cuando el potencial es periódico, el espectro es continuo, pero existen zonas permitidas (“bandas”), con zonas prohibidas (“brechas” —gaps) entre ellas.

Utilizando que $E = \hbar^2 q^2/2m$ podemos graficar E en función de k en la zona “reducida” $-\pi/a < k \leq \pi/a$. La figura 3.24 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. Ésta 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.

3.7. Efecto Aharonov-Bohm.

En esta sección analizaremos un problema que está relacionado con el efecto de Aharonov-Bohm.

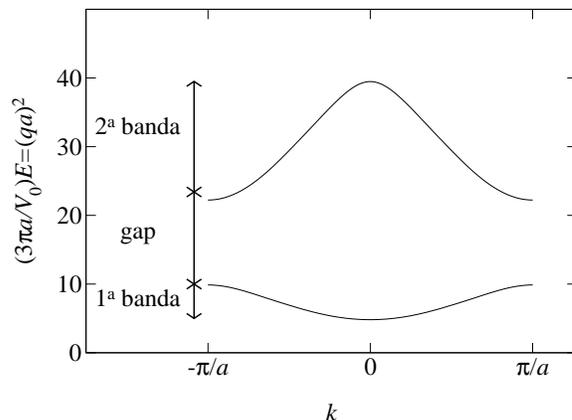


Figura 3.24: Bandas de energía del modelo de Kroning-Penney.

3.7.1. Partícula en movimiento circular.

Consideremos una partícula de masa μ y carga q que está constreñida a moverse en el plano x - y sobre una órbita circular de radio ρ_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:

$$\Psi^\pm(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar} \rho_0 \phi} ,$$

soluciones que están normalizadas de acuerdo a

$$\int_0^{2\pi} |\Psi^\pm(\phi)|^2 d\phi = 1 .$$

La condición de que la función $\Psi(\phi)$ no sea multivaluada da la cuantización de la energía:

$$\Psi(\phi + 2\pi) = \Psi(\phi) \implies \frac{\sqrt{2\mu E} \rho_0}{\hbar} = n \in \mathbb{Z} ,$$

o sea, el espectro de energías y autofunciones es

$$E_n = \frac{\hbar^2 n^2}{2\mu \rho_0^2}$$

y

$$\Psi_n^\pm(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i n \phi} .$$

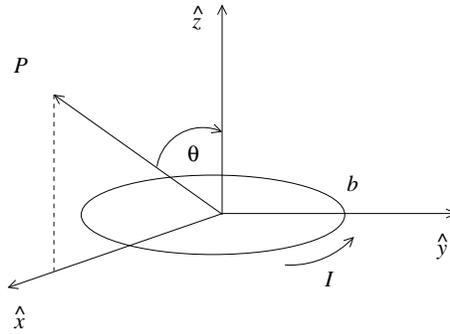


Figura 3.25: Espira circular de radio b por la cual circula una corriente I .

3.7.2. Potencial vectorial magnético.

Introduzcamos ahora un campo magnético representado por el potencial vectorial:

$$\vec{A} = \frac{\Phi \hat{z} \times \vec{r}}{2\pi(\hat{z} \times \vec{r})^2} \quad (3.76)$$

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 Φ , 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 $P = (r, \theta, \phi)$, producido por una espira de radio b , por la cual circula una corriente I , para $r \gg b$, es (ver figura 3.25)

$$\vec{A} = \vec{A}(r, \theta) = A_\phi(r, \theta) \hat{\phi} ,$$

con

$$A_\phi(r, \theta) = \frac{I\pi b^2}{c} \frac{r \sin \theta}{(b^2 + r^2 + 2br \sin \theta)^{3/2}} .$$

A partir de este resultado, para un solenoide que tiene n vueltas por unidad de longitud (ver figura 3.26), 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 Φ se encuentra el resultado:

$$\Phi = \pi b^2 B = \frac{4\pi^2 b^2 n}{c} ,$$

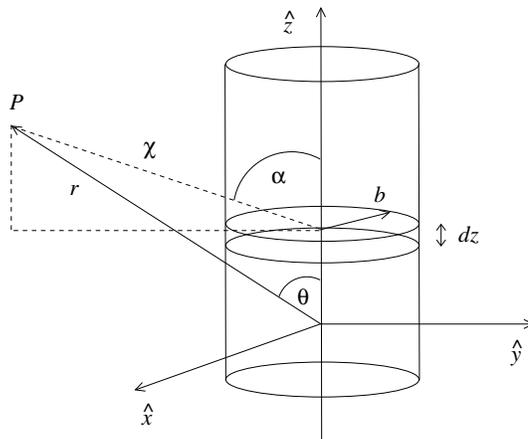


Figura 3.26: Solenoide (de longitud infinita) con n vueltas por unidad de longitud, por el cual circula una corriente I . Notar que $r \sin \theta = \chi \sin \alpha$.

o sea,

$$\frac{I\pi b^2 n}{c} = \frac{\Phi}{4\pi} .$$

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

$$\begin{aligned} A_\phi(r, \theta) &= \frac{\Phi r \sin \theta}{4\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{(r^2 + z^2 - 2rz \cos \theta)^{3/2}} \\ &= \frac{\Phi r \sin \theta}{4\pi} \frac{2}{r^2 \sin^2 \theta} , \end{aligned}$$

o sea,

$$\vec{A} = \frac{\Phi}{2\pi} \frac{\hat{z} \times \vec{r}}{(\hat{z} \times \vec{r})^2} .$$

Así, hemos demostrado que el potencial magnético dado por la ecuación (3.76) da origen a un campo magnético que es nulo en todas partes, excepto sobre el eje \hat{z} .

3.7.3. Partícula cargada moviéndose en un campo potencial magnético.

Volvamos al problema de la primera subsección, es decir, consideremos nuevamente el movimiento de una partícula de masa μ , restringida a moverse sobre un círculo de radio ρ_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 Φ asume 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 ρ_0 del origen, el potencial magnético es

$$A_\phi = \frac{\Phi}{2\pi\rho_0} ,$$

luego la ecuación de Schrödinger queda

$$\frac{1}{2\mu} \left(-i\hbar\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial}{\partial\phi} + \frac{q\Phi}{2\pi\rho_0c} \right)^2 \Psi(\phi) = E\Psi(\phi) ,$$

o sea,

$$\left[\frac{1}{2\mu} \left(-\frac{\hbar^2}{\rho_0^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} - i\hbar\frac{q\Phi}{\pi\rho_0^2c}\frac{\partial}{\partial\phi} + \frac{q^2\Phi^2}{4\pi^2\rho_0^2c^2} \right) - E \right] \Psi(\phi) = 0 .$$

Esta ecuación la reescribimos de la forma

$$\alpha\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2} + \beta\frac{\partial\Psi}{\partial\phi} + \gamma\Psi = 0 , \quad (3.77)$$

con

$$\alpha = -\frac{\hbar^2}{2\mu\rho_0^2} ,$$

$$\beta = -\frac{i\hbar q\Phi}{2\pi\mu\rho_0^2c}$$

y

$$\gamma = \frac{q^2\Phi^2}{8\pi^2\rho_0^2c^2\mu} - E .$$

Busquemos soluciones del tipo

$$\Psi(\phi) = e^{\Gamma\phi} .$$

Reemplazando este Ansatz en (3.77) se obtiene la relación que debe satisfacer Γ :

$$\alpha\Gamma^2 + \beta\Gamma + \gamma = 0 \quad .$$

Resolviendo la ecuación cuadrática se obtienen dos valores para Γ :

$$\Gamma = -\frac{i}{\hbar} \left(\frac{q\Phi}{2\pi c} \mp \rho_0 \sqrt{2\mu E} \right) \quad .$$

La función de onda para el problema es, por lo tanto,

$$\Psi^\pm(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \left(\frac{q\Phi}{2\pi c} \pm \rho_0 \sqrt{2\mu E} \right) \phi \right] \quad .$$

La condición de que Ψ sea monovaluada (*i.e.*, $\Psi^\pm(\phi + 2\pi) = \Psi^\pm(\phi)$) nos da ahora la cuantización de la energía:

$$\frac{q\Phi}{2\pi\hbar c} \mp \rho_0 \sqrt{\frac{2\mu E_m}{\hbar^2}} = m \quad , \quad \text{con } m \text{ entero} \quad ,$$

es decir,

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2\mu\rho_0^2} \left(m - \frac{q\Phi}{2\pi\hbar c} \right)^2 \quad , \quad m \in \mathbb{Z} \quad .$$

La función de onda correspondiente viene dada por

$$\Psi_m(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\phi} \quad .$$

Si

$$\frac{q\Phi}{2\pi\hbar c} = \delta \in \mathbb{Z} \quad ,$$

entonces el espectro coincide con el que se obtuvo en la primera parte para $\Phi = 0$.

Caractericemos el flujo Φ con el parámetro de intensidad δ , es decir, escribamos

$$\Phi = \Phi_\delta = \frac{2\pi\hbar c\delta}{q} \quad .$$

El espectro tiene degeneración doble si δ es semientero. Con δ entero el espectro también es doblemente degenerado, con la excepción del estado fundamental (ver figura 3.7.3). 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 Aharonov-Bohm).

Una referencia útil sobre la verificación experimental del efecto de Aharonov-Bohm se puede encontrar en el artículo “*Quantum Interference and the Aharonov-Bohm Effect*”, publicado en *Scientific American*, Abril 1989.

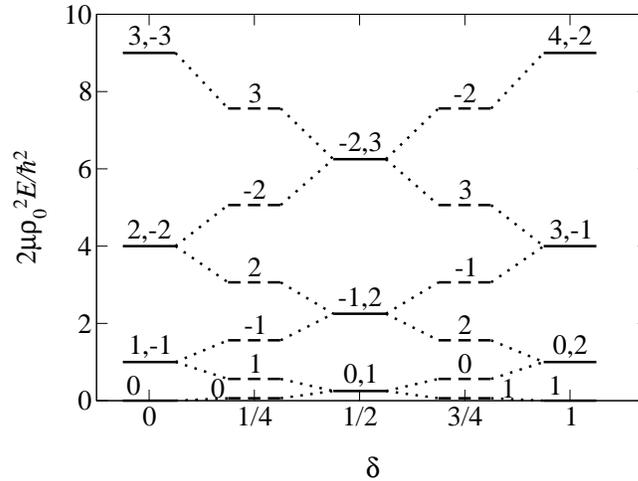


Figura 3.27: Espectro de energía para diversas intensidades del flujo magnético.

3.8. Problemas

3-1) Verifique la siguiente expresión numéricamente

$$\sum_{\substack{n>0 \\ n \text{ impar}}} \frac{1}{(n^2 - 4)^2} = \frac{\pi^2}{64}.$$

3-2) Considere el estado $\Psi = (\phi_0 + \phi_1)/\sqrt{2}$ en $t = 0$. Encuentre cómo evoluciona Ψ 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: $\psi_0 + e^{i\alpha}\psi_1 \neq \psi_0 + \psi_1$. Ello, a pesar de que un factor global de fase es irrelevante: Ψ y $e^{i\beta}\Psi$ describen al mismo estado.

3-3) Repita el análisis realizado para el potencial coulombiano en la subsección 3.2.1 para el oscilador armónico.

3-4) 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

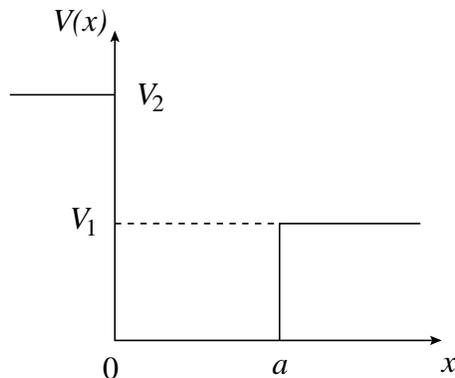
$$\tau_\nu = \frac{\hbar\pi}{E_{\nu-} - E_{\nu+}}.$$

3-5) Analice el potencial

$$V(x) = \begin{cases} \infty & |x| > a/2 \\ W_0\delta(x) & |x| < a/2 \end{cases}.$$

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 3.10. Interprete sus resultados analizando las autofunciones de cada doblete $\Phi_{\nu\pm}(x)$.

- 3-6) Reproducir los resultados para el potencial delta atractivo usando la solución del pozo cuadrado con $a \rightarrow \infty$, $V_0 \rightarrow \infty$, con $aV_0 = \text{constante}$. Muestre que sólo aparece una solución y que esta es par.
- 3-7) Una partícula (en dos dimensiones) está encerrada en una caja rectangular de lados a y b , cuyas paredes son impenetrables, y 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?
- 3-8) Encuentre las autofunciones y los autovalores del operador de Hamilton para el siguiente potencial:



- 3-9) 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, $V(x) = -Vx_0\delta(x)$.

- 3-10) 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 4

El oscilador armónico.

versión 21 junio 2007

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 tanto en Mecánica Clásica como también en 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:

$$\check{H} = \check{H}(\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}}) = \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\check{\mathbf{x}}^2 . \quad (4.1)$$

4.1. Resultados aproximados.

Antes de resolver el problema de manera formal, obtendremos un par de resultados menos rigurosos.

4.1.1. 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

$$(\Delta x)^2 = \langle \check{\mathbf{x}}^2 \rangle - \langle \check{\mathbf{x}} \rangle^2 = \langle \check{\mathbf{x}}^2 \rangle \quad (4.2)$$

y

$$(\Delta p)^2 = \langle \check{\mathbf{p}}^2 \rangle - \langle \check{\mathbf{p}} \rangle^2 = \langle \check{\mathbf{p}}^2 \rangle , \quad (4.3)$$

pues, por simetría, $\langle \check{\mathbf{x}} \rangle = \langle \check{\mathbf{p}} \rangle = 0$.

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

$$\langle \tilde{\mathbf{x}}^2 \rangle \langle \tilde{\mathbf{p}}^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4} . \quad (4.4)$$

Evaluemos el valor esperado de la energía. A partir de (4.1), se obtiene

$$\langle E \rangle = \langle \tilde{\mathbf{H}} \rangle = \frac{1}{2m} \langle \tilde{\mathbf{p}}^2 \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle \tilde{\mathbf{x}}^2 \rangle .$$

Luego, usando (4.4) se obtiene

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar^2}{8m \langle \tilde{\mathbf{x}}^2 \rangle} + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle \tilde{\mathbf{x}}^2 \rangle .$$

Minimizamos $\langle E \rangle$ con respecto a $\langle \tilde{\mathbf{x}}^2 \rangle$:

$$\frac{d\langle E \rangle}{d\langle \tilde{\mathbf{x}}^2 \rangle} = -\frac{\hbar^2}{8m \langle \tilde{\mathbf{x}}^2 \rangle^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 = 0 .$$

El valor de $\langle \tilde{\mathbf{x}}^2 \rangle$ que minimiza $\langle E \rangle$ es, por lo tanto,

$$\langle \tilde{\mathbf{x}}^2 \rangle_{\min}^2 = \frac{\hbar^2}{4m^2 \omega^2} .$$

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*. Como vimos en el Capítulo anterior, esta energía mínima aparece porque, en el estado fundamental, hay un compromiso entre la energía potencial y la cinética. Disminuir $\langle \tilde{\mathbf{x}}^2 \rangle$ es conveniente porque disminuye la energía; lo mismo ocurre al disminuir $\langle \tilde{\mathbf{p}}^2 \rangle$. Sin embargo, no pueden ambos decrecer arbitrariamente, pues debe satisfacerse el principio de incerteza. De este modo, disminuir $\langle \tilde{\mathbf{x}}^2 \rangle$ aumenta el momentum, es decir la energía cinética, y finalmente el sistema se encuentra en un estado, el estado fundamental, de energía no nula.

4.1.2. Regla de Cuantización de Bohr-Sommerfeld.

El resultado anterior nos permite estimar la energía mínima. Para encontrar el espectro de energía, en tanto, podemos emplear la *Regla de Cuantización de Bohr-Sommerfeld*. Ésta exige que

$$\oint p(x) dx = nh \quad , \quad n \in \mathbb{N} . \quad (4.5)$$

Para el momento p , en función de la coordenada x , se tiene la expresión

$$p(x) = \pm \sqrt{2mE - m^2\omega^2x^2} .$$

Luego

$$\oint p(x) dx = 2 \int_{-x_0}^{x_0} \sqrt{2mE - m^2\omega^2x^2} dx ,$$

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 (4.5) queda

$$\frac{2\pi E_n}{\omega} = n2\pi\hbar ,$$

o sea,

$$E_n = n\hbar\omega , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (4.6)$$

Este resultado, por cierto, está de acuerdo con las observaciones experimentales, que indican que para explicar fenómenos como la radiación del cuerpo negro o el efecto fotoeléctrico, es necesario considerar que la energía de un campo electromagnético oscilatorio es un múltiplo entero de $\hbar\omega$. La regla de Bohr-Sommerfeld da cuenta de dicho resultado. De hecho, da (como veremos en la siguiente sección) el correcto espaciamiento de los niveles del oscilador armónico, pero erróneamente la energía del punto cero.

4.2. Los operadores \check{a} , \check{a}^\dagger y \check{n} .

En principio, para resolver el oscilador armónico cuántico podemos proceder como en el Capítulo anterior: escribimos la ecuación de autovalores del Hamiltoniano, que en representación de coordenadas será cierta ecuación diferencial. El problema se reduce entonces a resolver una ecuación diferencial. Esto se puede hacer por cierto, pero no procederemos así. Haremos un desarrollo puramente formal, en el espacio de Hilbert, independiente de cualquier representación particular. El proceso será menos directo que resolver la ecuación diferencial directamente, pero aprenderemos mucho acerca de las soluciones, e introduciremos conceptos que son comunes a otros ámbitos de la Física (Teoría Cuántica de Campos, en particular).

Comenzamos el tratamiento formal del oscilador armónico introduciendo variables adimensionales. Definimos los operadores $\check{\xi}$, $\check{\pi}$ y el escalar σ por

$$\check{\xi} \equiv \frac{\check{x}}{\sqrt{\hbar/m\omega}} ,$$

$$\check{\pi} \equiv \frac{\check{\mathbf{p}}}{\sqrt{m\omega\hbar}} ,$$

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

$$[\check{\xi}, \check{\pi}] = \left[\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \check{\mathbf{x}}, \frac{1}{\sqrt{m\omega\hbar}} \check{\mathbf{p}} \right] = \frac{1}{\hbar} [\check{\mathbf{x}}, \check{\mathbf{p}}] = \frac{i\hbar}{\hbar} = i .$$

Con estas definiciones el Hamiltoniano para el oscilador armónico queda expresado por

$$\check{\mathbf{H}}(\check{\xi}, \check{\pi}) = \frac{1}{2}\hbar\omega (\check{\pi}^2 + \check{\xi}^2) ,$$

mientras que la ecuación de Schrödinger tiempo independiente, $\check{\mathbf{H}}|\Psi_E\rangle = E|\Psi_E\rangle$, queda

$$\frac{1}{2} (\check{\pi}^2 + \check{\xi}^2) |\Psi_\sigma\rangle = \left(\sigma + \frac{1}{2} \right) |\Psi_\sigma\rangle .$$

Introduzcamos el operador $\check{\mathbf{a}}$ definido por

$$\check{\mathbf{a}} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\check{\xi} + i\check{\pi}) . \quad (4.7)$$

Su hermítico conjugado es

$$\check{\mathbf{a}}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\check{\xi} + i\check{\pi})^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\check{\xi}^\dagger - i\check{\pi}^\dagger) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\check{\xi} - i\check{\pi}) , \quad (4.8)$$

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:

$$\check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} = \frac{1}{2} (\check{\pi}^2 + \check{\xi}^2 + i[\check{\xi}, \check{\pi}]) ,$$

de modo que

$$\frac{1}{2} (\check{\pi}^2 + \check{\xi}^2) = \check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} + \frac{1}{2} .$$

Vemos entonces que el Hamiltoniano se puede escribir de un modo más sencillo usando los operadores $\check{\mathbf{a}}$ y $\check{\mathbf{a}}^\dagger$. Observemos, incidentalmente, que hasta el momento siempre nos han interesado dos tipos de operadores en particular: los autohermíticos, pues corresponden a observables físicos, y los unitarios, que están asociados a cambios de base. Pero aquí hemos definido un operador $\check{\mathbf{a}}$ que no es autohermítico ni unitario (si fuera unitario, $\check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} = 1$, en cuyo

caso el Hamiltoniano sería sólo un número, lo cual no es cierto), y sin embargo muestra cierta utilidad. De hecho, veremos más adelante que es un operador particularmente interesante, a pesar de no corresponder a un observable.

Conviene ahora definir el operador \check{n} por

$$\check{n} = \check{a}^\dagger \check{a} .$$

Este sí es un operador autohermítico (dado un operador \check{A} arbitrario, el producto $\check{A}^\dagger \check{A}$ es siempre autohermítico). Con esta definición el Hamiltoniano toma la forma

$$\check{H} = \hbar\omega \left(\check{n} + \frac{1}{2} \right) .$$

Ahora podemos ver con claridad una de las ventajas de definir los operadores \check{a} : con ellos, es posible definir un operador adicional, \check{n} , que tiene precisamente la forma que tiene la energía de acuerdo a lo visto en la sección 4.1. [Excepto, por supuesto, que aquí \check{n} es un operador, y en (4.6) es un número entero.]

Por completitud, escribamos también las relaciones inversas de (4.7) y (4.8) (o sea, $\check{\xi}$ y $\check{\pi}$ en términos de los operadores \check{a} y \check{a}^\dagger):

$$\check{\xi} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\check{a} + \check{a}^\dagger)$$

y

$$\check{\pi} = \frac{1}{i\sqrt{2}} (\check{a} - \check{a}^\dagger) .$$

Usando el operador \check{n} y la definición de σ , la ecuación de Schrödinger queda de la forma sencilla:

$$\check{n}|\Psi_\sigma\rangle = \sigma|\Psi_\sigma\rangle .$$

Para lo que sigue necesitamos evaluar el conmutador $[\check{a}, \check{a}^\dagger]$:

$$\begin{aligned} [\check{a}, \check{a}^\dagger] &= \frac{1}{2} [\check{\xi} + i\check{\pi}, \check{\xi} - i\check{\pi}] \\ &= \frac{1}{2} [\check{\xi}, -i\check{\pi}] + \frac{1}{2} [i\check{\pi}, \check{\xi}] \\ &= -i [\check{\xi}, \check{\pi}] = 1 . \end{aligned}$$

Podemos demostrar ahora la siguiente interesante propiedad:

Proposición 4.1

$$\check{a}|\Psi_\sigma\rangle \propto |\Psi_{\sigma-1}\rangle \quad (4.9)$$

y

$$\check{a}^\dagger|\Psi_\sigma\rangle \propto |\Psi_{\sigma+1}\rangle . \quad (4.10)$$

Es decir, el operador \check{a} nos permite descender en el espectro, y \check{a}^\dagger ascender. Debido a esta propiedad, en el lenguaje técnico se dice que \check{a} es el operador de *bajada* y \check{a}^\dagger es el operador de *subida*.

Demostración

$$\begin{aligned}
\hat{n}(\check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle) &= \check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} \check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle = (\check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{a}}^\dagger - \check{\mathbf{1}})\check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle \\
&= \check{\mathbf{a}}(\check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}})|\Psi_\sigma\rangle - \check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle = \check{\mathbf{a}}(\hat{n} - \check{\mathbf{1}})|\Psi_\sigma\rangle \\
&= \check{\mathbf{a}}(\sigma - 1)|\Psi_\sigma\rangle ,
\end{aligned}$$

es decir,

$$\hat{n}(\check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle) = (\sigma - 1)(\check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle) .$$

Luego $\check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle$ es proporcional a $|\Psi_{\sigma-1}\rangle$, pues, para el oscilador armónico, el espectro es *no* degenerado (lo sabemos por la forma asintótica del potencial en $\pm\infty$, ver Sec. 2.20). Esta última relación enseña que, si σ es autovalor de \hat{n} , en general $\sigma - 1$ también será autovalor de \hat{n} , a menos que $\check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle = 0$.

q.e.d.

En forma análoga se demuestra que

$$\check{\mathbf{a}}^\dagger|\Psi_\sigma\rangle \propto |\Psi_{\sigma+1}\rangle .$$

Hasta el momento sólo sabemos que σ es autovalor de \hat{n} , y que los operadores de subida y bajada nos permiten movernos a estados $\sigma \pm 1$, $\sigma \pm 2$, $\sigma \pm 3$, etc. Esto en principio sugiere que los autovalores de \hat{n} pueden ser arbitrariamente grandes o pequeños. Sin embargo, dichos autovalores tienen una cota inferior:

Proposición 4.2 $\sigma \geq 0$.

Demostración $0 \leq (\langle\Psi_\sigma|\check{\mathbf{a}}^\dagger)(\check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle) = \langle\Psi_\sigma|\hat{n}|\Psi_\sigma\rangle = \sigma$.

q.e.d.

Notar que el resultado anterior implica que $E \geq \frac{1}{2}\hbar\omega$, lo que concuerda con el resultado estimado en Sec. 4.1.1. Este resultado también significa que existe un estado fundamental—un autoestado con energía mínima. Ahora bien, como los autovalores σ deben ser positivos, y por otro lado (4.9) debe ser siempre cierto, el único modo de compatibilizar ambos hechos es el siguiente corolario:

Corolario Sea $|\Psi_\sigma\rangle$ un autoestado para el oscilador armónico, entonces la serie $|\Psi_\sigma\rangle, \check{\mathbf{a}}|\Psi_\sigma\rangle, \check{\mathbf{a}}^2|\Psi_\sigma\rangle, \dots$ debe terminar, o sea, existe un $\sigma_0 > 0$ tal que

$$\check{\mathbf{a}}|\Psi_{\sigma_0}\rangle = 0 .$$

Por ende, σ_0 es el menor autovalor posible, y entonces $|\Psi_{\sigma_0}\rangle$ corresponde al estado fundamental, que se obtiene a partir de sucesivas aplicaciones del operador de bajada (ver figura 4.1). Ahora debemos encontrar σ_0 . Una vez determinado σ_0 , sabemos (al aplicar $\check{\mathbf{a}}^\dagger$) que el espectro de \hat{n} será $\sigma_0, \sigma_0 + 1, \sigma_0 + 2, \dots$. Otro autovalor de \hat{n} llevaría a la violación del carácter positivo de \hat{n} , como se ve al aplicar reiteradamente el operador de bajada $\check{\mathbf{a}}$.

La siguiente proposición nos dice cuál es este valor mínimo de σ .

Proposición 4.3 $\sigma_0 = 0$.

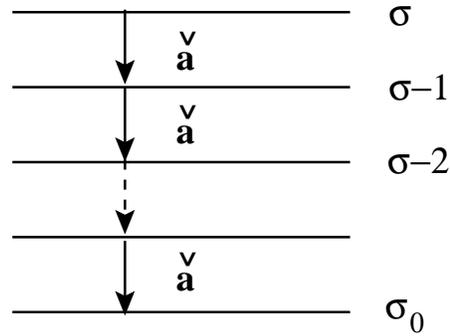


Figura 4.1: Una aplicación sucesiva de \check{a} a un estado lleva al estado fundamental.

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 $\sigma_0 = 0$.

q.e.d.

Con todos estos resultados, podemos finalmente escribir el espectro de energías de oscilador armónico:

Corolario El autovalor σ de la ecuación $\check{n}|\Psi_\sigma\rangle = \sigma|\Psi_\sigma\rangle$, es un entero no negativo, o sea,

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) , \quad \text{con } n = 0, 1, 2, \dots . \quad (4.11)$$

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 σ , 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 en una forma particularmente sencilla:

$$\check{n}|n\rangle = n|n\rangle .$$

Hemos encontrado el espectro de energía del oscilador armónico. Nos falta encontrar las autofunciones. Para ello, observamos que 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

$$\langle n|\check{n}|n\rangle = \langle n|n|n\rangle = n\langle n|n\rangle = n .$$

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

$$\check{\mathbf{a}}|n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle . \quad (4.12)$$

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

$$\check{\mathbf{a}}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle . \quad (4.13)$$

Otra manera de obtener este último resultado es notar que (4.12) permite escribir $\check{\mathbf{a}}$ como matriz. Entonces, la matriz que representa a $\check{\mathbf{a}}^\dagger$ se obtiene trasponiendo y conjugando la matriz de $\check{\mathbf{a}}$, y así sería posible determinar la imagen de los vectores de la base bajo $\check{\mathbf{a}}^\dagger$. Implementemos dicho procedimiento.

Sabemos que [ver ecuación (4.12)]

$$(\check{\mathbf{a}})_{mn} \equiv \langle m|\check{\mathbf{a}}|n\rangle = \delta_{m,n-1} \sqrt{n} .$$

Esta relación implica que

$$(\check{\mathbf{a}}^\dagger)_{m,n} = (\check{\mathbf{a}})_{n,m}^* = \delta_{n,m-1} \sqrt{m} = \delta_{m,n+1} \sqrt{n+1} ,$$

o sea,

$$\check{\mathbf{a}}^\dagger|n\rangle = \sum_m (\check{\mathbf{a}}^\dagger)_{m,n} |m\rangle = \sum_m \delta_{m,n+1} \sqrt{n+1} |m\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle .$$

El Hamiltoniano en términos de \check{n} se puede escribir, entonces, en la forma

$$\check{H} = \hbar\omega \left(\check{a}^\dagger \check{a} + \frac{1}{2} \right) = \left(\check{n} + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega .$$

Notemos que el operador \check{n} tiene como autovalor un número entero, que es precisamente igual al número del nivel de energía correspondiente (0 para el estado fundamental, 1 para el primer estado excitado, etc.). Debido a ello, \check{n} se denomina el *operador de número* (o de cantidad).

En una Teoría Cuántica de Campos, los operadores \check{n} , \check{a} y \check{a}^\dagger se pueden reinterpretar de otro modo. En efecto, al cuantizar un campo (electromagnético, por ejemplo), sus oscilaciones (las ondas electromagnéticas) se tratan cuánticamente, lo que lleva naturalmente a que el problema sea análogo al de un oscilador armónico. En este contexto, el operador de número \check{n} cuenta el número de cuantos de energía $\hbar\omega$ en el estado $|n\rangle$ [ver (4.11)], es decir, cuenta el *número de fotones* en un determinado modo de oscilación. En particular, se dice que el estado fundamental $|0\rangle$ es el “vacío” de excitaciones. Siguiendo la analogía, el operador \check{a} convierte un estado con n fotones en uno con $n - 1$ fotones, es decir \check{a} aniquila un fotón, y se le denomina *operador de aniquilación* o de *destrucción*. Por su parte, \check{a}^\dagger convierte un estado con n fotones en uno con $n + 1$ fotones, esto es, \check{a} crea un fotón, y se le denomina *operador de creación*. Así, pues, estos operadores tienen gran importancia en teorías físicas más elaboradas, que modelan cuánticamente las interacciones entre partículas.

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 (4.13) permite obtener las funciones de estado en función del estado base $|0\rangle$. En efecto, aplicando en forma consecutiva \check{a}^\dagger sobre el estado fundamental se encuentra

$$\begin{aligned} (\check{a}^\dagger)^n |0\rangle &= (\check{a}^\dagger)^{n-1} \sqrt{1} |1\rangle \\ &= (\check{a}^\dagger)^{n-2} \sqrt{1} \sqrt{2} |2\rangle \\ &= (\check{a}^\dagger)^{n-3} \sqrt{1 \cdot 2 \cdot 3} |3\rangle \\ &\vdots \\ &= \sqrt{n!} |n\rangle , \end{aligned}$$

o sea,

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\check{a}^\dagger)^n |0\rangle . \quad (4.14)$$

4.3. 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. Luego, usando (4.14), podremos encontrar las funciones de onda para los estados excitados.

De momento, lo único que sabemos del estado fundamental es que satisface:

$$\check{a}|0\rangle = 0 \quad .$$

Proyectando esta relación en representación de coordenadas:

$$\begin{aligned} \langle \xi|\check{a}|0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \xi|(\check{\xi} + i\check{\pi})|0\rangle \\ &= \frac{\xi}{\sqrt{2}} \langle \xi|0\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} \langle \xi|\check{\pi}|0\rangle \\ &= \frac{\xi}{\sqrt{2}} \langle \xi|0\rangle + \frac{i}{\sqrt{2}} \left(-i \frac{d}{d\xi} \langle \xi|0\rangle \right) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \Psi_0(\xi) \quad . \end{aligned}$$

De las expresiones anteriores se deduce que la función de onda $\Psi_0(\xi)$ satisface la ecuación diferencial

$$\left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \Psi_0(\xi) = 0 \quad .$$

Es inmediato ver que la solución de esta ecuación es la gaussiana

$$\Psi_0(\xi) = A e^{-\xi^2/2} \quad .$$

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

$$\Psi_0(x) = \sqrt[4]{\frac{m\omega}{\hbar\pi}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) = \langle x|0\rangle \quad .$$

Un gráfico de la función de onda del estado fundamental se muestra en la figura 4.2.

Evaluemos el ancho $(\Delta\check{\xi})^2$ para el estado fundamental:

$$\begin{aligned} (\Delta\check{\xi})^2 &= \langle \check{\xi}^2 \rangle - \langle \check{\xi} \rangle^2 = \langle \check{\xi}^2 \rangle \\ &= \langle 0|\check{\xi}^2|0\rangle = \frac{1}{2} \langle 0|(\check{a} + \check{a}^\dagger)^2|0\rangle \\ &= \frac{1}{2} [\langle 0|\check{a}^2|0\rangle + \langle 0|\check{a}\check{a}^\dagger|0\rangle + \langle 0|\check{a}^\dagger\check{a}|0\rangle + \langle 0|\check{a}^{\dagger 2}|0\rangle] \\ &= \frac{1}{2} \langle 0|\check{a}\check{a}^\dagger|0\rangle = \frac{1}{2} \quad . \end{aligned}$$

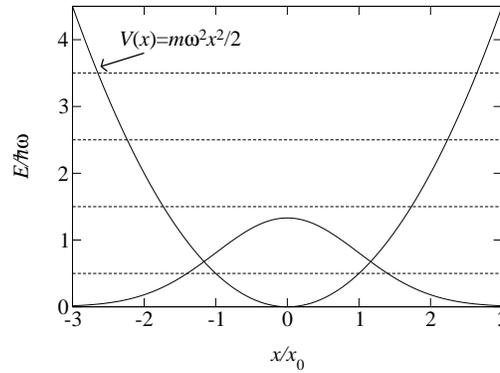


Figura 4.2: Estado fundamental del oscilador armónico.

o

$$(\Delta \tilde{x})^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} .$$

Análogamente, se puede mostrar que $(\Delta \tilde{p})^2 = \hbar m\omega / 2$, es decir

$$(\Delta \tilde{p})^2 = \frac{1}{2} \hbar m\omega .$$

Se sigue entonces que el estado fundamental del oscilador armónico satisface $\Delta x \Delta p = \hbar/2$, es decir, satisface la igualdad del principio de incerteza. Esto era de esperar, por cierto, pues la función de onda es una Gaussiana. Recordemos, además, que en la Sec. 4.1.1 estimamos la energía del estado fundamental usando el principio de incerteza, y que obtuvimos el resultado exacto dado por (4.11). Ahora nos damos cuenta de que esto no es ninguna sorpresa, ya que el estado fundamental del oscilador armónico es una Gaussiana, precisamente la función de onda para la cual el principio de incerteza es una igualdad.

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. Esto contrasta con la partícula libre, en que un paquete de ondas inicialmente Gaussiano sigue siendo Gaussiano, pero con una dispersión creciente con el tiempo.

4.4. Estados excitados.

Ya conocida la función de onda del estado fundamental podemos, utilizando el operador de subida, obtener todos los estados excitados.

Comenzamos evaluando explícitamente la función de onda del primer estado excitado ($n = 1$) en la representación de posición. Se tiene:

$$\langle \xi | 1 \rangle = \Psi_1(\xi) = \langle \xi | \tilde{\mathbf{a}}^\dagger | 0 \rangle ,$$

o sea,

$$\begin{aligned} \Psi_1(\xi) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \xi | \tilde{\xi} - i\tilde{\pi} | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - i \left(-i \frac{d}{d\xi} \right) \right) \langle \xi | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right) \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\xi^2/2} \\ &= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt[4]{\pi}} \xi e^{-\xi^2/2} . \end{aligned}$$

En general, para el n -ésimo estado excitado, se obtiene:

$$\begin{aligned} \Psi_n(\xi) &= \langle \xi | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \langle \xi | \tilde{\mathbf{a}}^{\dagger n} | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \frac{1}{2^{n/2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n \langle \xi | 0 \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!} \sqrt[4]{\pi} 2^{n/2}} \left(\xi - \frac{d}{d\xi} \right)^n e^{-\xi^2/2} . \end{aligned}$$

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

$$\Psi_n(\xi) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} e^{\xi^2/2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2/2} \cdot e^{-\xi^2/2} .$$

Definición.

$$H_n(\xi) \equiv (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} . \quad (4.15)$$

Breves 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

$$\Psi_n(\xi) = \frac{e^{-\xi^2/2}}{\sqrt{2^n n!} \sqrt{\pi}} H_n(\xi) = \langle \xi | n \rangle . \quad (4.16)$$

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 4.3 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. Con el fin de comparar, se muestra también la densidad de probabilidad clásica de encontrar la partícula en el lugar ξ al oscilar ésta con una energía igual a la del n -ésimo estado cuántico. Ésta viene dada por

$$\rho_{cl}(\xi) = \frac{1}{\pi \sqrt{\xi_n^2 - \xi^2}} ,$$

donde

$$\xi_n = \sqrt{2n + 1}$$

es la amplitud clásica del oscilador.

Los aspectos de la figura 4.3 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. (Ya hemos visto que ésta es una propiedad general.)
- Las funciones de onda tienen una paridad bien definida, siendo ésta $(-1)^n$. (Esto se debe a que el Hamiltoniano conmuta con el operador de inversiones espaciales.)
- La distribución clásica diverge en los puntos de retroceso $\xi = \xi_n$. Esto se debe a que el oscilador clásico pasa más tiempo en los extremos de la trayectoria. 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.

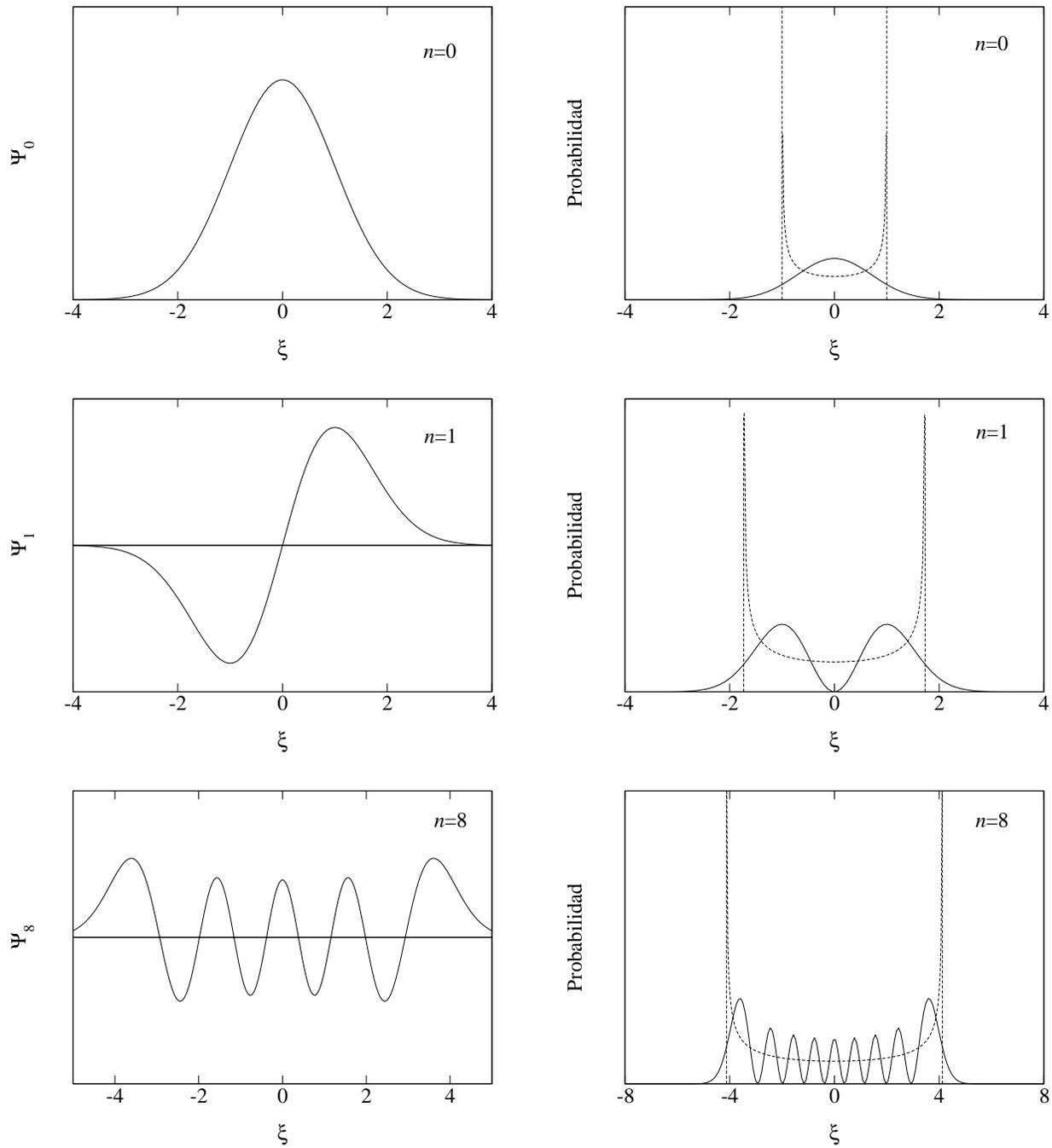


Figura 4.3: Función de onda y distribuciones de probabilidad clásica (línea punteada) y cuántica (línea llena) para varios estados del oscilador armónico.

- 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. Esto es justamente lo que esperamos, que el resultado clásico se obtenga como el límite del cuántico para energías grandes.

4.5. 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:

$$\begin{aligned}
 H_n(\xi) &= (-1)^n \left(e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \right) \\
 &= (-1)^n e^{\xi^2} \left. \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} e^{-(\xi-s)^2} \right|_{s=0} \\
 &= (-1)^n e^{\xi^2} \left. \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{-(\xi-s)^2} \right|_{s=0} (-1)^n \\
 &= \left. \frac{\partial^n}{\partial s^n} e^{\xi^2 - (\xi-s)^2} \right|_{s=0} .
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

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

$$F(s, \xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\partial^n}{\partial s^n} F(s, \xi) \right) \Big|_{s=0} s^n .$$

Pero los términos

$$\left(\frac{\partial^n}{\partial s^n} F(s, \xi) \right) \Big|_{s=0}$$

son precisamente los polinomios de Hermite (ver ecuación (4.17)), luego

$$F(s, \xi) = e^{-s^2 + 2s\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) s^n . \tag{4.18}$$

Ejercicio:

Demuestre que

$$\bar{F}(s, \xi) \equiv \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\xi^2/2 + \sqrt{2}s\xi - s^2/2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Psi_n(\xi)}{n!} s^n .$$

($\bar{F}(s, \xi)$ 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:

$$\frac{\partial F}{\partial \xi} = 2sF \quad .$$

Usando el desarrollo en serie de F dado por la ecuación (4.18), esta relación queda

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H'_n(\xi)s^n}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2H_n(\xi)s^{n+1}}{n!} \quad .$$

Igualando los términos de la misma potencia s^n , se encuentra la relación de recurrencia

$$H'_n(\xi) = 2nH_{n-1}(\xi) \quad .$$

(Equivalentemente, podemos obtener la relación de recurrencia aplicando el operador de bajada a $|n\rangle$, escribiendo (4.12) en representación de coordenadas.)

Del mismo modo, se obtiene que

$$\frac{\partial F}{\partial s} = (-2s + 2\xi)F \quad .$$

Luego, (usando (4.18))

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)ns^{n-1}}{n!} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)(-2)s^{n+1}}{n!} + 2\xi \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(\xi)s^n}{n!} \quad ,$$

de donde, igualando términos de la misma potencia s^n , se encuentra la relación de recurrencia

$$2\xi H_n(\xi) = 2nH_{n-1}(\xi) + H_{n+1}(\xi) \quad .$$

También se tiene que

$$\frac{\partial F}{\partial s} = \left(2\xi - \frac{d}{d\xi}\right) F \quad .$$

Procediendo en forma análoga a los casos anteriores, se encuentra la relación

$$\left(2\xi - \frac{d}{d\xi}\right) H_n(\xi) = H_{n-1}(\xi) \quad .$$

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

$$\begin{aligned}\langle n|m\rangle &= \delta_{nm} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \langle n|\xi\rangle \langle \xi|m\rangle \\ &= \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\xi^2} H_n(\xi) H_m(\xi) ,\end{aligned}$$

o sea,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\xi H_n(\xi) H_m(\xi) e^{-\xi^2} = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm}.$$

4.6. Función de Green.

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 (2.93)]

$$G(\xi, \eta, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-iE_n t/\hbar) \phi_n^*(\xi) \phi_n(\eta) .$$

Usando (4.16) y (4.20), se encuentra

$$\begin{aligned}G(\xi, \eta, t) &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{-i\omega(n+1/2)t} \frac{1}{2^n n! \sqrt{\pi}} e^{-(\xi^2+\eta^2)/2} H_n(\xi) H_n(\eta) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-i\omega t/2} e^{-(\xi^2+\eta^2)/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{e^{-i\omega t}}{2}\right)^n H_n(\xi) H_n(\eta) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-i\omega t/2} e^{-(\xi^2+\eta^2)/2} F(\xi, \eta, e^{-i\omega t}) ,\end{aligned}\tag{4.19}$$

donde

$$F(\xi, \eta, \alpha) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^n H_n(\xi) H_n(\eta) .\tag{4.20}$$

Ahora bien, de la definición de los polinomios de Hermite (4.15) y de la igualdad

$$e^{-\xi^2} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \exp(-t^2 \pm 2i\xi t)$$

se sigue que

$$H_n(\xi) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt (\mp 2it)^n \exp(\xi^2 - t^2 \pm 2i\xi t) .\tag{4.21}$$

Al usar (4.21),

$$\begin{aligned}F(\xi, \eta, \alpha) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\alpha}{2}\right)^n H_n(\eta) \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt (2it)^n \exp(\xi^2 - t^2 - 2i\xi t) \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} (i\alpha t)^n H_n(\eta) \right] \exp(\xi^2 - t^2 - 2i\xi t) .\end{aligned}$$

Usando ahora la función generatriz (4.18) 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

$$F(\xi, \eta, \alpha) = \frac{1}{\sqrt{1-\alpha^2}} \exp \left[\frac{-1}{1-\alpha^2} (\alpha^2(\xi^2 + \eta^2) - 2\alpha\xi\eta) \right] . \quad (4.22)$$

Ahora usamos (4.22) en (4.19), obteniéndose la función de Green para el oscilador armónico,

$$\begin{aligned} G(\xi, \eta, t) &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{e^{-i\omega t/2} e^{-(\xi^2 + \eta^2)/2}}{\sqrt{1 - \exp(-2i\omega t)}} . \\ &\exp \left[-\frac{(\exp(-2i\omega t) (\xi^2 + \eta^2) - 2 \exp(-2i\omega t)\xi\eta)}{1 - \exp(-2i\omega t)} \right] \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi i \sin(\omega t)}} \exp \left[\frac{i}{\sin(\omega t)} \left(\frac{1}{2}(\xi^2 + \eta^2) \cos(\omega t) - \xi\eta \right) \right] . \end{aligned} \quad (4.23)$$

Notemos que para tiempos pequeños, la función de Green debe corresponder a una delta de Dirac (para tiempos pequeños, el sistema no evoluciona, de modo que el propagador debe ser la identidad). En efecto, si $2\omega t = \epsilon \rightarrow 0$, entonces,

$$G(\xi, \eta, 0^+) = \frac{1}{\sqrt{\pi i \epsilon}} \exp \left(\frac{i}{\epsilon} (\xi - \eta)^2 \right) = \delta(\xi - \eta) .$$

De esta última relación, a su vez, se sigue que

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(\xi) H_n(\eta) = \delta(\xi - \eta) ,$$

la cual es una especie de relación de clausura [ver (1.4)] para los polinomios de Hermite.

4.7. Representación matricial de los operadores.

Consideremos la base ortonormal del espacio vectorial \mathcal{H} , formada por los autovectores del operador \hat{n} . Evaluemos los elementos de matriz y escribamos la representación matricial de los operadores \hat{a}^\dagger , \hat{a} , $\hat{\pi}$, $\hat{\xi}$, \hat{n} y \hat{H} , en esta base.

$$1. (\hat{a})_{nm} = \langle n | \hat{a} | m \rangle = \sqrt{m} \delta_{n, m-1}$$

$$(\hat{a}) = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & \\ \vdots & & & & & \ddots \end{pmatrix} .$$

Para el operador hermítico conjugado se tiene

$$(\check{\mathbf{a}}^\dagger) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} .$$

2. $\check{\xi} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\check{\mathbf{a}} + \check{\mathbf{a}}^\dagger)$, luego

$$(\check{\xi})_{n,m} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sqrt{n} \delta_{m,n-1} + \sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} \right) .$$

$$(\check{\xi}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} & \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{4} & 0 & \\ \vdots & & & & & \ddots \end{pmatrix} .$$

3. $\check{\pi} = \frac{1}{i\sqrt{2}}(\check{\mathbf{a}} - \check{\mathbf{a}}^\dagger)$, luego

$$(\check{\pi}) = \frac{1}{i\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ -\sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & -\sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ 0 & 0 & -\sqrt{3} & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} .$$

4. $(\check{\mathbf{n}})_{nm} = \langle n | \check{\mathbf{n}} | m \rangle = m \delta_{nm}$, luego

$$(\check{\mathbf{n}}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 2 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 3 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} .$$

5. $\check{\mathbf{H}} = \hbar\omega \left(\check{\mathbf{n}} + \frac{1}{2} \right)$, luego

$$(\check{\mathbf{H}}) = \hbar\omega \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 3/2 & 0 & 0 & \\ 0 & 0 & 5/2 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 7/2 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} .$$

6. $\check{\xi}^2 = \check{\xi} \cdot \check{\xi}$.

$$(\check{\xi}^2) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{1 \cdot 2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{2 \cdot 3} & 0 & \\ \sqrt{1 \cdot 2} & 0 & 5 & 0 & \sqrt{3 \cdot 4} & \\ 0 & \sqrt{2 \cdot 3} & 0 & 7 & 0 & \\ \vdots & & & & & \ddots \end{pmatrix} .$$

4.8. Evolución clásica

En esta sección mostraremos explícitamente que la ecuación del oscilador armónico clásica se satisface al tomar promedios en la solución cuántica.

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 clásica. 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

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \check{\xi}(t) \rangle + \omega^2 \langle \check{\xi}(t) \rangle = 0 ,$$

o sea, 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 las ecuaciones (2.76) y (2.78), se tiene:

$$m \frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{p}} \rangle = \langle \check{\mathbf{F}} \rangle = -m\omega^2 \langle \check{\mathbf{x}} \rangle$$

y

$$\frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{r}} \rangle = \frac{\langle \check{\mathbf{p}} \rangle}{m} .$$

Combinando estas ecuaciones y escribiéndolas en términos de las variables adimensionales, se encuentra

$$m \frac{d^2}{dt^2} \langle \check{\xi} \rangle = -\omega^2 \langle \check{\xi} \rangle .$$

4.9. El oscilador armónico en el cuadro de Heisenberg.

Cuando introdujimos el cuadro de Heisenberg (Sec. 2.14), observamos que la analogía clásica es más directa que en el cuadro de Schrödinger, pues los operadores mismos satisfacen una ecuación de evolución clásica. Esto será particularmente evidente en el caso del oscilador armónico.

Recordamos primero 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:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \check{\mathbf{A}}_H = [\check{\mathbf{A}}_H, \check{\mathbf{H}}] .$$

4.9.1. Ecuaciones de movimiento.

Escribamos la ecuación de evolución temporal para los operadores de posición y momento en el cuadro de Heisenberg. Se tiene:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \check{\xi}_H = [\check{\xi}_H, \check{\mathbf{H}}] .$$

El Hamiltoniano para el oscilador armónico es

$$\check{\mathbf{H}} = \frac{1}{2} \hbar \omega (\check{\xi}_H^2 + \check{\pi}_H^2) .$$

Para el conmutador entre $\check{\xi}_H$ y $\check{\mathbf{H}}$ se tiene:

$$\begin{aligned} [\check{\xi}_H, \check{\mathbf{H}}] &= \frac{1}{2}\hbar\omega [\check{\xi}_H, \check{\pi}_H^2] \\ &= i\hbar\omega\check{\pi}_H, \end{aligned}$$

luego,

$$\frac{d}{dt}\check{\xi}_H = \omega\check{\pi}_H.$$

Análogamente, se deduce que

$$\frac{d}{dt}\check{\pi}_H = -\omega\check{\xi}_H.$$

Derivando respecto al tiempo las dos últimas ecuaciones se obtiene

$$\frac{d^2\check{\xi}_H}{dt^2} + \omega^2\check{\xi}_H = 0$$

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

$$\begin{aligned} \check{\xi}_H(t) &= \check{\xi}_H(0)\cos(\omega t) + \check{\pi}_H(0)\sin(\omega t) \\ &= \check{\xi}_S\cos(\omega t) + \check{\pi}_S\sin(\omega t) \end{aligned} \quad (4.24)$$

y

$$\check{\pi}_H(t) = \check{\pi}_S\cos(\omega t) - \check{\xi}_S\sin(\omega t). \quad (4.25)$$

De acuerdo a (4.24) y (4.25), los valores esperados de los operadores de posición y momento vienen dados por

$$\langle \check{\xi}_H(t) \rangle = \langle \check{\xi}_S \rangle \cos(\omega t) + \langle \check{\pi}_S \rangle \sin(\omega t) \quad (4.26)$$

y

$$\langle \check{\pi}_H(t) \rangle = \langle \check{\pi}_S \rangle \cos(\omega t) - \langle \check{\xi}_S \rangle \sin(\omega t).$$

Nuevamente, 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, el sistema mantiene las peculiaridades propias 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:

$$i\hbar\frac{d\check{\mathbf{a}}_H}{dt} = [\check{\mathbf{a}}_H, \check{\mathbf{H}}] = \hbar\omega \left[\check{\mathbf{a}}_H, \check{\mathbf{a}}_H^\dagger\check{\mathbf{a}}_H + \frac{1}{2} \right] = \hbar\omega\check{\mathbf{a}}_H,$$

o sea,

$$\frac{d\check{\mathbf{a}}_H}{dt} = -i\omega\check{\mathbf{a}}_H.$$

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

$$\check{\mathbf{a}}_H(t) = \check{\mathbf{a}}_S e^{-i\omega t}$$

y

$$\check{\mathbf{a}}_H^\dagger(t) = \check{\mathbf{a}}_S^\dagger e^{+i\omega t} .$$

Hacemos notar que estas relaciones se pueden obtener directamente usando la definición de $\check{\mathbf{a}}_H$ y la ecuación (1.17). 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

$$\check{\mathbf{a}}_H^\dagger(t) = \check{\mathbf{a}}_S^\dagger e^{+i\omega t} .$$

Un tercer modo de obtener el mismo resultado es tomar las definiciones de los operadores de subida y bajada (4.7) y (4.8), escribirlas en el cuadro de Heisenberg, y reemplazar las dependencias temporales de $\check{\xi}$ y $\check{\pi}$ (4.24) y (4.25).

Como sea, nos damos cuenta de un hecho interesante. Ahora, en el cuadro de Heisenberg, es claro que definir $\check{\mathbf{a}}$ y $\check{\mathbf{a}}^\dagger$ es equivalente a reemplazar funciones trigonométricas reales por exponenciales complejas. Desde ese punto de vista, es completamente esperable que $\check{\mathbf{a}}$ y $\check{\mathbf{a}}^\dagger$ permitan resolver elegantemente el problema de un oscilador armónico, como vimos en la Sec. 4.2.

4.9.2. Interpretación del cuadro de Heisenberg.

En el cuadro de Heisenberg no evoluciona la función de onda, sino los operadores. Pero dicha evolución depende de la función de onda inicial.

Veamos qué sucede 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 (4.26) 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,

$$\langle \check{\xi}_H(t) \rangle = \langle \check{\pi}_H(t) \rangle = 0 \quad \forall t .$$

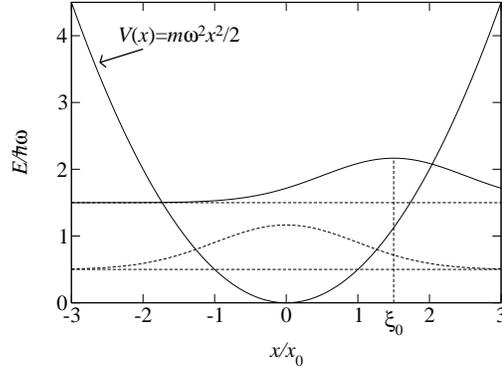


Figura 4.4: Función de estado correspondiente a la función de onda del estado fundamental desplazado.

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 ξ_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 figura 4.4):

$$\Psi_H(\xi) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp\left(-\frac{(\xi - \xi_0)^2}{2}\right) .$$

En este caso se tiene:

$$\begin{aligned} \langle \check{\xi}_H(t=0) \rangle &= \langle \Psi_H | \check{\xi}_S | \Psi_H \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \xi \exp(-(\xi - \xi_0)^2) = \xi_0 . \end{aligned}$$

También se demuestra que

$$\langle \check{\pi}_H(t=0) \rangle = 0 .$$

Ambos resultados concuerdan con la situación clásica: inicialmente tenemos un oscilador en reposo, desplazado en ξ_0 respecto al origen.

Luego, la evolución temporal de los valores esperados de los operadores posición y momento viene dada por:

$$\langle \check{\xi}_H(t) \rangle = \xi_0 \cos(\omega t)$$

y

$$\langle \check{\pi}_H(t) \rangle = -\xi_0 \sin(\omega t) ,$$

ecuaciones que por supuesto son idénticas a las correspondientes ecuaciones clásicas.

Hemos resuelto el problema en el cuadro de Heisenberg. ¿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 (resultado que obtuvimos en el cuadro de Heisenberg,

pero los promedios no cambian al cambiar de cuadro). Pero ¿el paquete de ondas cambiará su forma a medida que oscila? Analicemos este problema en detalle. Se tiene:

$$\Psi_S(\xi, t) = e^{-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar} \Psi_H(\xi) .$$

Para la función de onda de Heisenberg (que no depende del tiempo) estamos tomando el estado fundamental desplazado en ξ_0 , el cual podemos escribir, usando el operador de traslación, de la forma siguiente:

$$\begin{aligned} \Psi_H(\xi) &= \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} \exp\left(\frac{1}{2}(\xi - \xi_0)^2\right) \\ &= e^{-i\xi_0\check{\pi}_S} \Psi_0(\xi) , \end{aligned}$$

donde $\Psi_0(\xi)$ es la solución de la ecuación de Schrödinger tiempo independiente correspondiente al estado fundamental del oscilador armónico. Luego, se obtiene:

$$\begin{aligned} \Psi_S(\xi, t) &= e^{-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar} e^{-i\xi_0\check{\pi}_S} \Psi_0(\xi) \\ &= e^{-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar} e^{-i\xi_0\check{\pi}_S} e^{+i\check{\mathbf{H}}t/\hbar} e^{-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar} \Psi_0(\xi) \\ &= e^{-i\xi_0\check{\pi}_H(-t)} e^{-i\check{\mathbf{H}}t/\hbar} \Psi_0(\xi) \\ &= e^{-i\xi_0\check{\pi}_H(-t)} e^{-i\omega t/2} \Psi_0(\xi) . \end{aligned}$$

Usando (4.26), se tiene que

$$\begin{aligned} e^{-i\xi_0\check{\pi}_H(-t)} &= e^{-i\xi_0(\check{\xi}_S \sin(\omega t) + \check{\pi}_S \cos(\omega t))} \\ &= e^{-i\xi_0\check{\xi}_S \sin(\omega t)} e^{-i\xi_0\check{\pi}_S \cos(\omega t)} e^{-(-i\xi_0)^2[\check{\xi}_S, \check{\pi}_S] \sin(\omega t) \cos(\omega t)/2} \\ &= e^{-i\xi_0\check{\xi}_S \sin(\omega t)} e^{-i\xi_0 \cos(\omega t) \check{\pi}_S} e^{i\xi_0^2 \sin(2\omega t)/4} . \end{aligned}$$

Observando que la segunda exponencial es el operador de desplazamiento en $\xi_0 \cos(\omega t)$, se obtiene, para la función de onda,

$$\begin{aligned} \Psi_S(\xi, t) &= e^{-i\omega t/2} e^{i\xi_0^2 \sin(2\omega t)/4} e^{-i\xi_0\check{\xi}_S \sin(\omega t)} e^{-i\xi_0 \cos(\omega t) \check{\pi}_S} \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\xi^2/2} \\ &= e^{-i\omega t/2} e^{i\xi_0^2 \sin(2\omega t)/4} e^{-i\xi_0\check{\xi}_S \sin(\omega t)} \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-(\xi - \xi_0 \cos(\omega t))^2/2} \\ &= e^{-i(\omega t/2 - \xi_0^2 \sin(2\omega t)/4 + \xi_0 \xi \sin(\omega t))} \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-(\xi - \xi_0 \cos(\omega t))^2/2} , \end{aligned} \quad (4.27)$$

y para la densidad de probabilidad se encuentra:

$$|\Psi_S(\xi, t)|^2 = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-(\xi - \xi_0 \cos(\omega t))^2} .$$

O sea, la densidad de probabilidad en todo instante es Gaussiana y oscila entre $-\xi_0$ y $+\xi_0$, sin cambiar su forma.

Tanto en el cuadro de Heisenberg como en el de Schrödinger, se verifica que este estado, correspondiente al estado fundamental desplazado, es el que presenta la mayor analogía con el oscilador clásico: una Gaussiana inicialmente desplazada respecto al origen, en reposo, y que oscila armónicamente respecto al origen sin deformarse.

4.9.3. Descomposición de $\Psi_H(\xi)$ en autoestados del oscilador armónico.

Anteriormente obtuvimos que, en el estado fundamental, $\langle \check{\xi} \rangle = \langle \check{\pi} \rangle = 0$, lo que significa que, en el estado de mínima energía, el oscilador permanece en “reposo” en el origen (en realidad, su energía cinética es distinta de cero, y es un estado con un ancho finito, pero en promedio su momentum y su posición son cero). Tal estado no evoluciona, pues es un autoestado del Hamiltoniano, y dichos promedios no cambian en el tiempo. La razón por la cual la Gaussiana desplazada de la subsección anterior evoluciona es porque $\Psi_H(\xi)$ no es un autoestado. Veamos qué podemos aprender de expandir $\Psi_H(\xi)$ en autoestados del Hamiltoniano.

Escribamos la función de onda del estado fundamental desplazado,

$$\langle \xi | \Psi_H \rangle = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-(\xi - \xi_0)^2/2} = \langle \xi | e^{-i\xi_0 \check{\pi}} | 0 \rangle ,$$

en términos de las autofunciones del oscilador armónico $\{|n\rangle\}$,

$$|\Psi_H\rangle = \sum_n c_n |n\rangle , \quad (4.28)$$

y evaluemos los coeficientes de expansión. Para ello expresamos el operador de traslación como sigue:

$$\begin{aligned} e^{-i\xi_0 \check{\pi}} &= \exp\left(-i\xi_0 \frac{1}{i\sqrt{2}}(\check{\mathbf{a}} - \check{\mathbf{a}}^\dagger)\right) \\ &= \exp\left(\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\check{\mathbf{a}}^\dagger\right) \exp\left(-\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\check{\mathbf{a}}\right) \exp\left(\frac{1}{2}\left(\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\right)^2 [\check{\mathbf{a}}^\dagger, \check{\mathbf{a}}]\right) \\ &= \exp\left(-\frac{\xi_0^2}{4}\right) \exp\left(\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\check{\mathbf{a}}^\dagger\right) \exp\left(-\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\check{\mathbf{a}}\right) , \end{aligned}$$

luego,

$$\begin{aligned} e^{-i\xi_0 \check{\pi}} |0\rangle &= \exp\left(-\frac{\xi_0^2}{4}\right) \exp\left(\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\check{\mathbf{a}}^\dagger\right) \left(1 - \frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\check{\mathbf{a}} + \frac{\xi_0^2}{4}\check{\mathbf{a}}^2 - \dots\right) |0\rangle \\ &= \exp\left(-\frac{\xi_0^2}{4}\right) \exp\left(\frac{\xi_0}{\sqrt{2}}\check{\mathbf{a}}^\dagger\right) |0\rangle . \end{aligned}$$

Expandiendo la exponencial en series de Taylor, y usando

$$\frac{(\check{\mathbf{a}}^\dagger)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle = |n\rangle ,$$

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

$$c_n = \frac{\xi_0^n}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\xi_0^2/4} . \quad (4.29)$$

Al realizar una medición de energía, la probabilidad de encontrar el oscilador con energía $(n + 1/2) \hbar\omega$ es

$$|c_n|^2 = \frac{1}{n!} \left(\frac{\xi_0^2}{2} \right)^n e^{-\xi_0^2/2} . \quad (4.30)$$

Esta distribución es una *Distribución de Poisson*.

Reemplazando (4.29) en (4.28) se encuentra que el estado fundamental desplazado en ξ_0 queda expresado por

$$|\Psi_H\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\xi_0^n}{\sqrt{2^n n!}} e^{-\xi_0^2/4} |n\rangle . \quad (4.31)$$

Así, al hacer una medición de energía sobre la Gaussiana desplazada todos los valores $\hbar\omega(n + 1/2)$ son posibles.

¿Pero cuál es la energía más probable? Para saberlo, basta con maximizar la distribución de probabilidades (4.30). La presencia de $n!$ complica un tanto la tarea, pero ésta se simplifica en el caso de un oscilador con amplitud grande (es decir, $\xi_0 \gg 1$). Eso equivale a darle gran cantidad de energía inicial al oscilador, y por tanto se espera que la probabilidad máxima ocurra para n grande, de modo que 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 $n_0 = \xi_0^2/2$. El valor más probable de la energía es, por lo tanto,

$$E = (n_0 + 1/2)\hbar\omega \approx n_0\hbar\omega = \frac{\xi_0^2}{2}\hbar\omega = \frac{1}{2}m\omega^2 x_0^2 ,$$

o sea, 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 $x_0 \gg \sqrt{\hbar/m\omega}$).

4.10. Estados coherentes.

El hecho de que una combinación lineal infinita de autoestados (el estado fundamental desplazado) evolucione de una manera tan sencilla, es decir, manteniendo su forma y dispersión, oscilando armónicamente, es sin duda altamente no trivial. En esta sección mostraremos, no obstante, que éste no es el único estado que presenta este comportamiento, sino que es común a una familia de estados llamados *coherentes*.

4.10.1. Definición.

Definimos el espacio coherente por el conjunto $\{|\alpha\rangle\}_{\alpha\in\mathbb{C}}$ de autoestados del operador de bajada:

$$\tilde{\mathbf{a}}|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle . \quad (4.32)$$

Sean $\{|n\rangle\}$ los autoestados del operador $\tilde{\mathbf{n}}$. Supongamos que existen estos estados coherentes. 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

$$\langle n|\alpha\rangle = \langle 0|\frac{\tilde{\mathbf{a}}^n}{\sqrt{n!}}|\alpha\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\langle 0|\alpha\rangle .$$

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

$$\langle 0|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} ,$$

o sea, los estados coherentes normalizados se escriben de la forma

$$|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle . \quad (4.33)$$

Note que esta expresión, con $\alpha = \xi_0/\sqrt{2}$ es idéntica a la ecuación (4.31), o sea, el estado fundamental desplazado es un caso particular de estado coherente.

Observemos también que el estado fundamental del oscilador armónico $|0\rangle$ es tanto un autoestado del Hamiltoniano (con autovalor $\hbar\omega/2$) como un autoestado de $\tilde{\mathbf{a}}$ (con autovalor 0), y por tanto el estado fundamental es también un estado coherente.

4.10.2. 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

$$\begin{aligned}\langle\check{\mathbf{H}}^2\rangle_{\alpha} &= \langle\alpha|\check{\mathbf{H}}^2|\alpha\rangle = \langle\alpha|\hbar^2\omega^2\left(\check{\mathbf{n}} + \frac{1}{2}\right)^2|\alpha\rangle \\ &= \hbar^2\omega^2\langle\alpha|\left(\check{\mathbf{a}}^{\dagger}\check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{a}}^{\dagger}\check{\mathbf{a}} + \check{\mathbf{a}}^{\dagger}\check{\mathbf{a}} + \frac{1}{4}\right)|\alpha\rangle \\ &= \hbar^2\omega^2\left\{|\alpha|^2\langle\alpha|\check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{a}}^{\dagger}|\alpha\rangle + |\alpha|^2 + \frac{1}{4}\right\} \\ &= \hbar^2\omega^2\left\{|\alpha|^4 + 2|\alpha|^2 + \frac{1}{4}\right\} .\end{aligned}$$

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:

$$\Delta n_{\alpha} = (\langle\check{\mathbf{n}}^2\rangle_{\alpha} - \langle\check{\mathbf{n}}\rangle_{\alpha}^2)^{1/2} = |\alpha| .$$

También se tiene

$$\frac{\Delta n_{\alpha}}{\langle\check{\mathbf{n}}\rangle_{\alpha}} = \frac{1}{|\alpha|} ,$$

o sea, 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.

Un estado coherente es una superposición de infinitos autoestados del Hamiltoniano, de modo que no tiene una energía definida; a lo sumo, al medir la energía, se obtendrá un

determinado valor promedio con alguna incerteza. La energía promedio está dada por $|\alpha|^2$, de modo que, en promedio, un estado coherente se encuentra en el nivel $n = \sqrt{\alpha}$. Hay, sin embargo, una incerteza en el nivel ocupado dada por Δn (o ΔH). El resultado que hemos obtenido es que dicha incerteza es cada vez menor mientras mayor sea α , es decir, mientras mayor sea la energía (promedio) del estado coherente, dicha energía se observa con una incerteza (relativa) cada vez menor. Esto sugiere una interesante analogía con la experiencia clásica, ya que un oscilador clásico tiene una energía grande comparada con $\hbar\omega$ y, por otro lado, clásicamente la energía se puede medir con precisión infinita. Esta analogía entre el oscilador clásico y los estados coherentes se manifiesta de muchos otros aspectos, como veremos.

Note que el valor esperado de la energía también se puede escribir de la forma

$$\langle \check{H} \rangle_\alpha = \hbar\omega \left(\langle \check{n} \rangle_\alpha + \frac{1}{2} \right) .$$

Encontremos también los promedios de la posición y del momento para un estado coherente. Tenemos

$$\langle \alpha | \check{a} | \alpha \rangle = \alpha$$

y

$$\langle \alpha | \check{a}^\dagger | \alpha \rangle = \alpha^* ,$$

luego

$$\langle \alpha | \check{\xi} | \alpha \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \alpha | (\check{a} + \check{a}^\dagger) | \alpha \rangle = \sqrt{2} \operatorname{Re}(\alpha) .$$

Para los valores esperados del momento se encuentra

$$\langle \alpha | \check{\pi} | \alpha \rangle = \sqrt{2} \operatorname{Im}(\alpha) .$$

Esto es interesante, porque sugiere una interpretación para α : Si representamos la evolución del oscilador en un espacio de fase de dimensión 2 o, equivalentemente, en el plano complejo, con abscisas (la parte real) representando la posición ξ y las ordenadas (la parte imaginaria) representando el momentum π , α es el vector en el plano complejo que corresponde al estado (ξ, π) . Hecho que no debería ser sorprendente, dada la definición (4.7).

4.10.3. Forma explícita para $|\alpha\rangle$.

Determinemos la forma de los estados coherentes en representación de coordenadas. De (4.32),

$$\begin{aligned} \langle \xi | \check{a} | \alpha \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \langle \xi | \alpha \rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \Phi_\alpha(\xi) = \alpha \Phi_\alpha(\xi) . \end{aligned}$$

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

$$\Phi_\alpha(\xi) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}} e^{-\text{Im}(\alpha)^2} \exp\left(-\frac{1}{2}(\xi - \sqrt{2}\alpha)^2\right) . \quad (4.34)$$

Nuevamente es claro que con $\alpha = \xi_0/\sqrt{2}$ se tiene el estado fundamental del oscilador armónico, desplazado en ξ_0 respecto al origen.

Proposición:

$$|\alpha\rangle = e^{\alpha\check{\mathbf{a}}^\dagger - \alpha^*\check{\mathbf{a}}} |0\rangle \equiv \check{\mathbf{A}}|0\rangle . \quad (4.35)$$

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.

Se deja como ejercicio (ver Problemas 4-1 y 4-2) demostrar una serie de propiedades del operador $\check{\mathbf{A}}$.

4.10.4. Evolución temporal.

Analicemos brevemente la evolución temporal de un estado coherente $|\alpha\rangle$:

$$|\Psi_\alpha(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\tilde{\mathbf{H}}t}|\alpha\rangle .$$

(Note que $|\Psi_\alpha(0)\rangle = |\alpha\rangle$.) Se tiene

$$\begin{aligned} |\Psi_\alpha(t)\rangle &= e^{-\frac{i}{\hbar}\tilde{\mathbf{H}}t}|\alpha\rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\tilde{\mathbf{H}}t} \exp[\alpha\check{\mathbf{a}}_S^\dagger - \alpha^*\check{\mathbf{a}}_S]|0\rangle \\ &= e^{-\frac{i}{\hbar}\tilde{\mathbf{H}}t} \exp[\alpha\check{\mathbf{a}}_S^\dagger - \alpha^*\check{\mathbf{a}}_S] e^{+\frac{i}{\hbar}\tilde{\mathbf{H}}t} e^{-\frac{i}{\hbar}\tilde{\mathbf{H}}t} |0\rangle \\ &= e^{-i\omega t/2} \exp[\alpha\check{\mathbf{a}}_H^\dagger(t) - \alpha^*\check{\mathbf{a}}_H(t)] |0\rangle . \end{aligned}$$

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

$$\alpha(t) \equiv \alpha e^{-i\omega t} . \quad (4.36)$$

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. De todos modos, es claro que la evolución de un estado coherente es, aparte de un factor de fase global, el mismo estado coherente, pero con α variando armónicamente, de acuerdo a (4.36). Ya lo habíamos observado para el estado fundamental desplazado, y ahora verificamos que todos los autoestados del operador de bajada se comportan del mismo modo, evolucionando indeformados.

Por su parte, todos los promedios temporales siguen de los promedios en el instante $t = 0$ al remplazar α por $\alpha(t) = \alpha \exp(-i\omega t)$. En particular se tiene

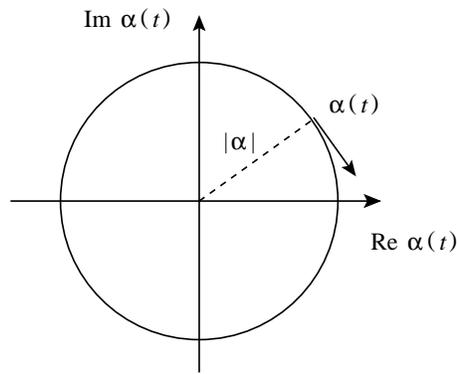
$$\langle \check{\xi} \rangle_{\alpha(t)} = \sqrt{2} \operatorname{Re}(\alpha(t))$$

y

$$\langle \check{\pi} \rangle_{\alpha(t)} = \sqrt{2} \operatorname{Im}(\alpha(t)) .$$

El gráfico 4.5 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. Al evolucionar, el punto $\alpha(t)$ rota con frecuencia angular ω sobre la circunferencia de radio $|\alpha|$, con ω la frecuencia angular del oscilador clásico. Nuevamente advertimos que esta particular combinación lineal de autoestados, los estados coherentes, se comporta clásicamente, describiendo en el espacio de fase una trayectoria igual a la de un oscilador clásico.

Es posible mostrar que un estado coherente no sólo satisface la igualdad en el Principio de Incertidumbre, sino que al evolucionar no se dispersa y sigue satisfaciendo dicha igualdad (Ejercicio 4-3).

Figura 4.5: Evolución temporal del oscilador en el espacio α .

4.10.5. 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 α , por lo tanto, no necesariamente es real. En efecto, aun si en $t = 0$ es real, al transcurrir el tiempo α evoluciona de acuerdo a la ecuación (4.36), siendo en general un número complejo.
- El conjunto de vectores $\{|\alpha\rangle\}$ no tiene por qué ser ortogonal. De hecho, no lo es:

$$\begin{aligned} \langle\alpha|\beta\rangle &= e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2 - \frac{1}{2}|\beta|^2} \sum_{m,n} \frac{(\alpha^*)^m \beta^n}{\sqrt{m!n!}} \langle m|n\rangle \\ &= e^{-\frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2)} \sum_n \frac{(\alpha^* \beta)^n}{n!} \\ &= e^{\alpha^* \beta - \frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2)} , \end{aligned}$$

o sea,

$$|\langle\alpha|\beta\rangle|^2 = e^{-|\alpha - \beta|^2} .$$

Deducimos que la distancia entre los puntos α y β 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, se puede mostrar que

$$\check{Q} \equiv \frac{1}{\pi} \int |\alpha\rangle \langle\alpha| d(\text{Re}(\alpha)) d(\text{Im}(\alpha)) = \check{I} . \quad (4.37)$$

Para ello, usemos la ecuación (4.33) e introduzcamos coordenadas polares en el plano

complejo α :

$$\begin{aligned}
 \check{\mathbf{Q}} &= \frac{1}{\pi} \int e^{-|\alpha|^2} \sum_{m,n} \frac{\alpha^m \alpha^{*n}}{\sqrt{n!m!}} |m\rangle \langle n| d(\text{Re}(\alpha)) d(\text{Im}(\alpha)) \\
 &= \sum_{m,n} \frac{|m\rangle \langle n|}{\sqrt{m!n!}} \frac{1}{\pi} \int_0^\infty e^{-r^2} r^{m+n} r dr \underbrace{\int_0^{2\pi} d\theta e^{i(m-n)\theta}}_{2\pi\delta_{nm}} \\
 &= \sum_m |m\rangle \langle m| \frac{1}{m!} \int_0^\infty \underbrace{dr^2 e^{-r^2} r^{2m}}_{m!} \\
 &= \sum_m |m\rangle \langle m| = \check{\mathbf{1}} .
 \end{aligned}$$

Usando (4.37), cualquier vector de estado del oscilador armónico se puede expresar en términos de estados coherentes. En efecto:

$$|\Psi\rangle = \check{\mathbf{1}} |\Psi\rangle = \frac{1}{\pi} \int |\alpha\rangle \langle \alpha| \Psi\rangle d^2\alpha .$$

- En realidad, el conjunto de estados coherentes es sobrecompleto. En efecto, como α puede tomar cualquier valor complejo, hay \aleph (infinito no numerable) estados coherentes. Pero las autofunciones del Hamiltoniano del oscilador armónico están rotuladas por un índice entero, de modo que 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. En lugar de ser “gaussianas” son proporcionales a $e^{\xi^2/2}$, y por ende divergen y no son normalizables.

Hemos visto que los estados coherentes recuerdan, en muchos aspectos, al oscilador clásico. Sabemos que, en general, el comportamiento clásico se debería recuperar al hacer $\hbar \rightarrow 0$ (principio de correspondencia), o al aumentar en energía (Fig. 4.3). Sabemos, en general, que un estado clásico será la superposición de posiblemente infinitos autotestados de energía. Pues bien, hemos encontrado estos “estados coherentes”, que son justamente superposición de infinitos autoestados, y que evolucionan precisamente de acuerdo a las ecuaciones clásicas. Es en este punto que radica la importancia de los estados coherentes: corresponden a 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 $|n\rangle$. Podremos apreciar esto a través del siguiente par de ejemplos.

4.10.6. Ilustración 1: fuerza externa constante.

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 4.6):

$$F(t) = F_0 \Theta(-t) .$$

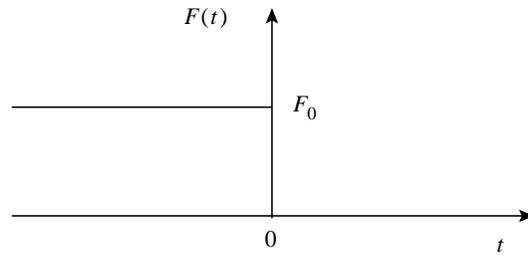


Figura 4.6: Fuerza externa que actúa sobre el oscilador analizado en el texto.

Para $t < 0$ sobre el oscilador actúa una fuerza constante F_0 que desaparece bruscamente en $t = 0$. Esta fuerza, clásicamente, da origen a un potencial tiempo dependiente $V(x, t) = -F(t)x$. Cuánticamente éste queda representado por

$$\check{V} = -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} F(t)(\check{a} + \check{a}^\dagger) .$$

El Hamiltoniano para el problema es, por lo tanto,

$$\check{H} = \hbar\omega \left(\check{a}^\dagger \check{a} + \frac{1}{2} \right) - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} F(t)(\check{a} + \check{a}^\dagger) . \quad (4.38)$$

Denotemos por $|\bar{0}\rangle, |\bar{1}\rangle, \dots, |\bar{n}\rangle, \dots$ a los autoestados de \check{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 (4.38) de manera de expresarlo, para $t < 0$, explícitamente como un operador desplazado. Se tiene

$$\begin{aligned} \check{H} &= \hbar\omega \left(\check{a}^\dagger \check{a} + \frac{1}{2} \right) - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} F(t)(\check{a} + \check{a}^\dagger) \\ &= \hbar\omega \left[\left(\check{a}^\dagger \check{a} + \frac{1}{2} \right) - \frac{\xi_0}{\sqrt{2}} (\check{a} + \check{a}^\dagger) \right] , \end{aligned}$$

donde ξ_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 $\check{\mathbf{a}} = \check{a} - \xi_0/\sqrt{2}$, el Hamiltoniano se puede reescribir de la forma

$$\check{H} = \hbar\omega \left(\check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega \frac{\xi_0^2}{4} .$$

Consideremos el operador $\check{\mathbf{A}}(\alpha)$, definido en la ecuación (4.35), con $\alpha = \xi_0/\sqrt{2}$:

$$\check{\mathbf{A}}(\alpha) = e^{-i\pi \xi_0} .$$

De acuerdo al Problema 4-1, 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

$$\check{H} = e^{-i\pi\xi_0} \hbar\omega \left(\check{\mathbf{a}}^\dagger \check{\mathbf{a}} + \frac{1}{2} \right) e^{+i\pi\xi_0} ,$$

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

$$|\bar{0}\rangle = e^{-i\pi\xi_0} |0\rangle = \left| \frac{\xi_0}{\sqrt{2}} \right\rangle ,$$

o sea, un estado coherente.

En el instante $t = 0^+$ el valor de α es $\xi_0/\sqrt{2}$, donde ξ_0 es la amplitud de la oscilación que tendría el análogo clásico. Esto era esperable: el problema planteado es equivalente, por ejemplo, a una masa ligada a un resorte. Si la masa tiene carga y el sistema está inicialmente en un campo eléctrico constante, el estado de mínima energía está desplazado respecto al estado de mínima energía en ausencia de campo eléctrico. Al “apagar” el campo eléctrico, el sistema se encuentra súbitamente en un estado “excitado”, y comienza a oscilar. Su amplitud de oscilación es precisamente igual al desplazamiento del estado de mínima energía inicial respecto al estado de mínima energía final.

La expansión de $|\bar{0}\rangle$ en términos de los estados del oscilador armónico es

$$|\bar{0}\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle ,$$

de modo que la probabilidad de encontrar, para $t > 0$, al sistema en el estado $|n\rangle$ viene dada por la distribución de Poisson:

$$P_n = \frac{1}{n!} \left(\frac{m\omega}{2\hbar} x_0^2 \right)^n \exp \left(-\frac{m\omega}{2\hbar} x_0^2 \right) .$$

4.10.7. Ilustración 2: láser.

Los conceptos desarrollados en las subsecciones anteriores pueden ser verificados experimentales.

Consideremos la luz de un láser. Este produce un onda electromagnética coherente, siendo los campos eléctrico y magnético de la forma

$$\langle \vec{E} \rangle = \vec{E}_0 \cos(\omega t)$$

y

$$\langle \vec{B} \rangle = \vec{B}_0 \cos(\omega t) ,$$

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 (4.30). Al observar el resultado de este experimento en un multicanal se encuentra una distribución de Poisson.

La figura 4.7 muestra esquemáticamente el experimento y resultado que finalmente se observa en un multicanal para la distribución de fotones de una onda electromagnética clásica, resultado que está de acuerdo con la predicción cuántica.

4.11. El oscilador armónico en tres dimensiones.

(Solución en coordenadas cartesianas.)

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

$$\check{H}_i = \frac{\check{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \check{x}_i^2 , \quad i = x, y, z ,$$

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 independientes¹. 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

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 r^2 - E \right] \psi_x(x) \psi_y(y) \psi_z(z) = 0 .$$

¹Sea \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 $\{\check{A}_1 \otimes \check{I}, \check{I} \otimes \check{A}_2\}$. En la representación de coordenadas estos autoestados son representados por un producto ordinario de funciones.

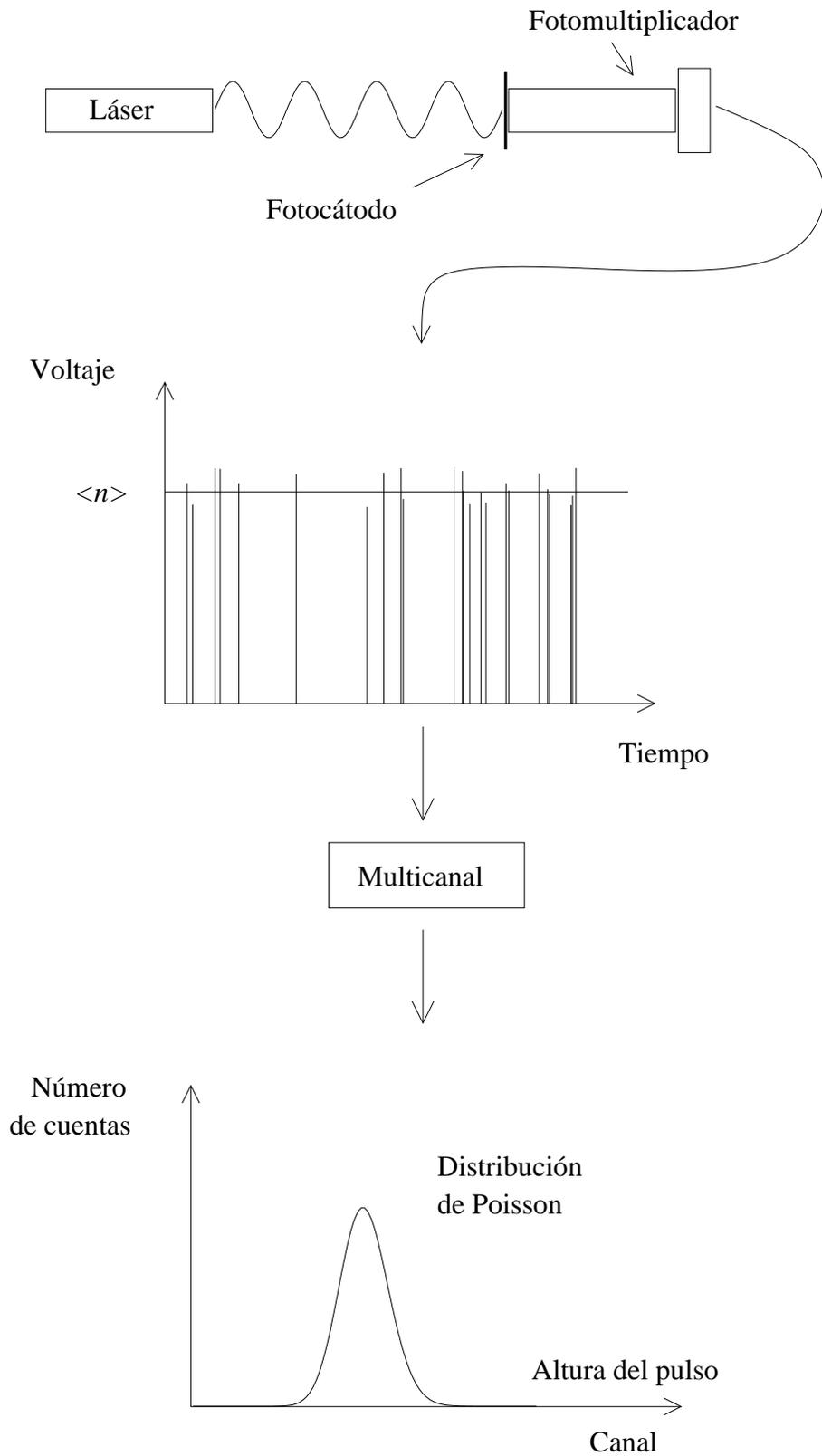


Figura 4.7: Luz coherente incidiendo sobre un fotocátodo. Se muestra esquemáticamente la disposición experimental y el resultado que finalmente se observa en un multicanal.

Dividiendo por la función de onda se obtiene

$$\underbrace{\frac{1}{\psi_x} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right] \psi_x}_{\text{sólo depende de } x} + \underbrace{\frac{1}{\psi_y} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 y^2 \right] \psi_y}_{\text{sólo depende de } y} + \underbrace{\frac{1}{\psi_z} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 z^2 \right] \psi_z}_{\text{sólo depende de } z} - E = 0 .$$

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:

$$E = \hbar\omega \sum_{j=x,y,z} \left(n_j + \frac{1}{2} \right) = \hbar\omega \left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2} \right) .$$

La energía del punto cero (o sea la energía del estado fundamental) es $E = \frac{3}{2} \hbar\omega$. La tabla 4.1 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, o sea, los niveles del oscilador armónico tridimensional son degenerados (ver también figura 4.8).

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 $(-1)^N$. Finalmente, la degeneración del nivel E_N es $(N + 1)(N + 2)/2$ (Problema 4-4).

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.

Cuadro 4.1: Oscilador armónico tridimensional en coordenadas cartesianas.

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		-	

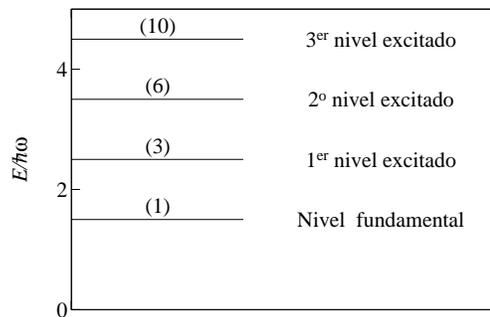


Figura 4.8: Espectro de energía de un oscilador tridimensional.

4.12. Problemas

4-1) Demuestre que el operador $\check{\mathbf{A}}$ 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) $\check{\mathbf{A}}(-\alpha)\check{\mathbf{A}}(\alpha) = \check{\mathbf{A}}^\dagger(\alpha)\check{\mathbf{A}}^\dagger(-\alpha) = \check{\mathbf{1}}$

Esta propiedad es bastante esperable, recordando que el estado fundamental desplazado es un estado coherente. $\check{\mathbf{A}}(\alpha)$ corresponde a desplazar el estado fundamental en α , y $\check{\mathbf{A}}(-\alpha)$ en $-\alpha$, de modo que naturalmente, al aplicar $\check{\mathbf{A}}(\alpha)$ y $\check{\mathbf{A}}(-\alpha)$ el estado original queda inalterado.

- d) $\check{\mathbf{A}}^\dagger(\alpha)\check{\mathbf{a}}\check{\mathbf{A}}(\alpha) = \check{\mathbf{a}} + \alpha\check{\mathbf{1}}$
- e) $\check{\mathbf{A}}^\dagger(\alpha)\check{\mathbf{a}}^\dagger\check{\mathbf{A}}(\alpha) = \check{\mathbf{a}}^\dagger + \alpha^*\check{\mathbf{1}}$

4-2) Demuestre que el operador $\check{\mathbf{Q}} = \alpha\check{\mathbf{a}}^\dagger - \alpha^*\check{\mathbf{a}}$ es *antihermítico*². Por consiguiente, el operador $\check{\mathbf{A}} = e^{\check{\mathbf{Q}}}$ es unitario.

4-3) Demuestre las siguientes relaciones, para un estado coherente $|\alpha\rangle$:

- (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

$$\Delta\xi \Delta\pi = 1/2 .$$

4-4) Demuestre que la degeneración del nivel E_N del oscilador tridimensional isotrópico viene dada por $(N+1)(N+2)/2$.

4-5) Considere un oscilador bidimensional (isotrópico). Encuentre el espectro y la degeneración de cada estado estacionario.

²Un operador $\check{\mathbf{Q}}$ se dice que es antihermítico si $\check{\mathbf{Q}}^\dagger = -\check{\mathbf{Q}}$.

Capítulo 5

Momento angular.

versión 3 julio 2007

Hasta el momento, hemos aplicado el formalismo de la Mecánica Cuántica a problemas en una dimensión, o a problemas, como el oscilador tridimensional, que se pueden reducir a problemas unidimensionales. Aun cuando hemos ganado una gran cantidad de intuición física en el proceso, es un hecho que los sistemas físicos normalmente viven en tres dimensiones. Un hecho distintivo de un espacio de tres dimensiones versus un espacio unidimensional, es la posibilidad de realizar rotaciones en dicho espacio. Tal posibilidad tiene consecuencias físicas. En particular, es posible definir un observable adicional, el momento angular, asociado a las rotaciones. En este capítulo estudiaremos las rotaciones en el espacio de Hilbert, definiremos el operador cuántico de momento angular, y encontraremos, de un modo completamente general, su espectro de autofunciones y autovalores. Esta información nos permitirá resolver problemas físicos en más de una dimensión, como veremos en el capítulo siguiente.

5.1. 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 5.1); el sentido de la misma se obtiene con la “regla de la mano derecha” (de modo que $\vec{\phi}$ es un pseudovector).

Sea $\{|\vec{r}_0\rangle\}_{\vec{r}_0 \in R^3}$ la base de autoestados del operador $\check{\vec{r}}$, es decir,

$$\check{\vec{r}} |\vec{r}_0\rangle = \vec{r}_0 |\vec{r}_0\rangle .$$

Introduzcamos el operador unitario de rotaciones $\check{\check{U}}_{\vec{\phi}}$, el cual definimos como el operador que transforma los vectores de la base de autoestados de posición del espacio de Hilbert \mathcal{H} según:

$$|\vec{r}_0\rangle \longrightarrow \check{\check{U}}_{\vec{\phi}} |\vec{r}_0\rangle \equiv |R_{\vec{\phi}} \vec{r}_0\rangle . \quad (5.1)$$

Por supuesto que se tiene que

$$\check{\check{r}} |R_{\vec{\phi}} \vec{r}_0\rangle = \check{\check{r}} \check{\check{U}}_{\vec{\phi}} |\vec{r}_0\rangle = (R_{\vec{\phi}} \vec{r}_0) |R_{\vec{\phi}} \vec{r}_0\rangle .$$

Figura 5.1: Rotación del \vec{r}_0 .

De las relaciones anteriores concluimos que

$$\check{\mathbf{r}} \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} |\check{\mathbf{r}}_0\rangle = (\mathbf{R}_{\vec{\phi}} \check{\mathbf{r}}_0) \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} |\check{\mathbf{r}}_0\rangle .$$

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 R^3 , de modo que sus componentes son reales y conmutan con los operadores de \mathcal{H} ¹.

Multiplicando la última ecuación a la izquierda por $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1} = \check{\mathbf{U}}_{-\vec{\phi}}$, se obtiene

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1} \check{\mathbf{r}} \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} |\check{\mathbf{r}}_0\rangle &= \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1} (R_{\vec{\phi}} \vec{r}_0) \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} |\vec{r}_0\rangle \\ &= (R_{\vec{\phi}} \vec{r}_0) \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1} \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} |\vec{r}_0\rangle \\ &= (R_{\vec{\phi}} \vec{r}_0) |\vec{r}_0\rangle = R_{\vec{\phi}} \check{\mathbf{r}} |\check{\mathbf{r}}_0\rangle . \end{aligned}$$

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

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1} \check{\mathbf{r}} \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} = \mathbf{R}_{\vec{\phi}} \check{\mathbf{r}} . \quad (5.2)$$

Hemos demostrado que si $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$ es un operador de rotación en \mathcal{H} entonces se cumple (5.2). Recíprocamente, mostremos ahora que si un operador $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$ cumple con (5.2), entonces es un operador de rotaciones en \mathcal{H} . Hay que mostrar que si (5.2) 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 (5.2) por $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$ y operando sobre un vector arbitrario $|\vec{r}_0\rangle$, se deduce que:

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{r}} \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} |\vec{r}_0\rangle &= \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} R_{\vec{\phi}} \check{\mathbf{r}} |\vec{r}_0\rangle \\ &= \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} (R_{\vec{\phi}} \vec{r}_0) |\vec{r}_0\rangle \\ &= (R_{\vec{\phi}} \vec{r}_0) \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} |\vec{r}_0\rangle . \end{aligned}$$

c.q.d.

Hemos demostrado, entonces, que (5.2) es una condición necesaria y suficiente para que $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$ sea un operador de rotaciones en \mathcal{H} .

¹ $R_{\vec{\phi}}$ puede ser representado por una matriz 3 x 3.

Figura 5.2: Rotación infinitesimal del \vec{r}_0 .

Notemos que la ecuación (5.2) representa, en realidad, tres relaciones entre operadores, una para cada componente vectorial:

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1} \check{\mathbf{r}}_i \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} = \sum_j R_{ij}(\vec{\phi}) \check{\mathbf{r}}_j .$$

Encontremos ahora una expresión explícita para el operador $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$. Para ello consideremos primeramente rotaciones infinitesimales $\delta\vec{\phi}$ en R^3 , con $\delta\vec{\phi} = \hat{n} \delta\phi$. Es fácil convencerse de que el efecto de tal rotación infinitesimal sobre un vector arbitrario \vec{r}_0 es (ver figura 5.2)

$$R_{\delta\vec{\phi}} \vec{r}_0 = \vec{r}_0 + \delta\vec{r}_0 = \vec{r}_0 + \delta\phi \hat{n} \times \vec{r}_0 . \quad (5.3)$$

Consideremos ahora el operador $\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}}$, asociado a $R_{\delta\vec{\phi}}$, que actúa en \mathcal{H} . Usando la definición (5.1) y la relación (5.3), obtenemos

$$\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}} |\vec{r}_0\rangle = |\vec{r}_0 + \delta\phi \hat{n} \times \vec{r}_0\rangle .$$

Observemos que la rotación infinitesimal es equivalente a una *traslación* infinitesimal. Usando las propiedades de las traslaciones (ver ecuaciones (2.84) y (2.85)), se encuentra

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}} |\vec{r}_0\rangle &= \left[\check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \delta\phi \hat{n} \times \vec{r}_0 \cdot \check{\mathbf{p}} \right] |\vec{r}_0\rangle \\ &= \left[\check{\mathbf{1}} + \frac{i}{\hbar} \delta\phi \hat{n} \times \check{\mathbf{p}} \cdot \vec{r}_0 \right] |\vec{r}_0\rangle \\ &= \left[\check{\mathbf{1}} + \frac{i}{\hbar} \delta\phi \hat{n} \times \check{\mathbf{p}} \cdot \check{\mathbf{r}} \right] |\vec{r}_0\rangle \\ &= \left[\check{\mathbf{1}} + \frac{i}{\hbar} \check{\mathbf{p}} \times \check{\mathbf{r}} \cdot \delta\phi \hat{\mathbf{n}} \right] |\vec{r}_0\rangle . \end{aligned}$$

Dado que el vector base $|\vec{r}_0\rangle$ es arbitrario, se deduce que

$$\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}} = \left[\check{\mathbf{1}} + \frac{i}{\hbar} \sum_{i,j,k=1}^3 \epsilon_{jkl} \check{\mathbf{p}}_j \check{\mathbf{r}}_k \delta\phi_\ell \right] = \left[\check{\mathbf{1}} + \frac{i}{\hbar} \sum_{i,j,k} \epsilon_{jkl} \check{\mathbf{r}}_j \check{\mathbf{p}}_k \delta\phi_\ell \right] . \quad (5.4)$$

Acá se usó que $[\check{\mathbf{r}}_j, \check{\mathbf{p}}_k] = 0$ si $j \neq k$. Podemos reescribir la ecuación (5.4) de la forma

$$\check{U}_{\delta\vec{\phi}} = \check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}} , \quad (5.5)$$

donde $\check{\mathbf{L}}$ es el llamado *operador de momento angular orbital*, definido por

$$\check{\mathbf{L}} = \check{\mathbf{r}} \times \check{\mathbf{p}} . \quad (5.6)$$

El operador $\check{\mathbf{L}}$ es autohermítico. En efecto,

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{L}}_j^\dagger &= \sum_{k,\ell} \epsilon_{jkl} (\check{\mathbf{r}}_k \check{\mathbf{p}}_\ell)^\dagger = \sum_{k,\ell} \epsilon_{jkl} \check{\mathbf{p}}_\ell^\dagger \check{\mathbf{r}}_k^\dagger \\ &= \sum_{k,\ell} \epsilon_{jkl} \check{\mathbf{p}}_\ell \check{\mathbf{r}}_k = \sum_{k,\ell} \epsilon_{jkl} \check{\mathbf{r}}_k \check{\mathbf{p}}_\ell = \check{\mathbf{L}}_j , \end{aligned}$$

o sea,

$$\check{\mathbf{L}}^\dagger = \check{\mathbf{L}} .$$

De acá sigue trivialmente que $\check{U}_{\delta\vec{\phi}}$ es un operador unitario.

Observemos además la cercana analogía entre los resultados actuales para la relación entre el momento angular y el operador de rotaciones, y los resultados del Cap. 2 para el momento lineal y el operador de traslaciones.

Busquemos ahora una expresión explícita para el operador $\check{U}_{\vec{\phi}}$ correspondiente a una rotación finita en \mathcal{H} . Para ello, usamos el hecho de que una rotación finita se puede descomponer en un producto de rotaciones infinitesimales.

Empezamos por notar la existencia de un homomorfismo entre el producto de rotaciones euclidianas en 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 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, y es en general una función complicada de $\vec{\phi}_1$ y $\vec{\phi}_2$. Consideramos ahora los operadores de rotaciones en el espacio de Hilbert asociados a estas rotaciones en R^3 . Tenemos

$$\begin{aligned} \check{U}_{\vec{\phi}_1} \check{U}_{\vec{\phi}_2} |\vec{r}_0\rangle &= \check{U}_{\vec{\phi}_1} |R_{\vec{\phi}_2} \vec{r}_0\rangle = |R_{\vec{\phi}_1} R_{\vec{\phi}_2} \vec{r}_0\rangle \\ &= |R_{\vec{\phi}} \vec{r}_0\rangle = \check{U}_{\vec{\phi}} |\vec{r}_0\rangle , \end{aligned}$$

donde $|\vec{r}_0\rangle$ es un vector arbitrario de la base de posición. De acá se deduce que

$$\check{U}_{\vec{\phi}_1} \check{U}_{\vec{\phi}_2} = \check{U}_{\vec{\phi}(\vec{\phi}_1, \vec{\phi}_2)} ,$$

por lo tanto, los operadores $\{\check{U}_{\vec{\phi}}\}$ sobre \mathcal{H} preservan la ley de producto de las operaciones euclidianas propias sobre R^3 (son grupos homomorfos de operadores).

Técnicamente, el conjunto de operadores $\{\check{U}_{\vec{\phi}}\}_{|\vec{\phi}| \leq \pi}$ forma un grupo, el así llamado grupo de simetría de las rotaciones propias en \mathcal{H} . Tal grupo es isomorfo al grupo de rotaciones en R^3 : $\{R_{\vec{\phi}}\}_{|\vec{\phi}| \leq \pi}$, y se denomina *grupo SO_3* .

Dado que para dos rotaciones sobre el mismo eje se cumple $R_{\phi\vec{n}}R_{\theta\vec{n}} = R_{(\phi+\theta)\vec{n}}$, se tiene que una rotación finita en $\vec{\phi}$ se obtiene aplicando N veces una rotación infinitesimal en $\vec{\phi}/N$:

$$R_{\vec{\phi}} = \left(R_{\vec{\phi}/N} \right)^N ,$$

y por lo tanto,

$$\check{U}_{\vec{\phi}} = \left(\check{U}_{\delta\vec{\phi}} \right)^N \quad \text{con} \quad \delta\vec{\phi} = \frac{\vec{\phi}}{N} .$$

En el límite $N \rightarrow \infty$, $\delta\vec{\phi}$ es infinitesimal, de modo que

$$\check{U}_{\vec{\phi}} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 - \frac{i}{\hbar} \frac{\vec{\phi}}{N} \cdot \check{\mathbf{L}} \right)^N = e^{-i\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}/\hbar} .$$

Es inmediato que

$$\check{U}_{\vec{\phi}}^\dagger = \check{U}_{-\vec{\phi}} = \check{U}_{\vec{\phi}}^{-1} ,$$

o sea, $\check{U}_{\vec{\phi}}$ es un operador unitario.

Nuevamente, nuestros resultados son análogos a los obtenidos anteriormente para el momento lineal y las traslaciones. Y es natural, porque esto es simplemente el análogo cuántico de que el operador de momento (lineal/angular) es el generador de las traslaciones en la variable conjugada respectiva.

5.2. 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:

$$\check{L}_j = \sum_{k,\ell} \epsilon_{jkl} \check{r}_k \check{p}_\ell \quad j = 1, 2, 3 . \quad (5.7)$$

Consideremos la ecuación (5.2) para el caso de una rotación infinitesimal (dada por la ecuación (5.5)). Se tiene

$$\left[\check{\mathbf{1}} + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}} \right] \check{\mathbf{r}} \left[\check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}} \right] = \mathbf{R}_{\delta\vec{\phi}} \check{\mathbf{r}} = \check{\mathbf{r}} + \delta\vec{\phi} \times \check{\mathbf{r}} .$$

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

$$\sum_k \delta\phi_k [\check{\mathbf{r}}_j, \check{\mathbf{L}}_k] = i\hbar \sum_{k,\ell} \epsilon_{j k \ell} \delta\phi_k \check{\mathbf{r}}_\ell .$$

Como $\delta\vec{\phi}$ es un vector arbitrario, se obtiene la siguiente relación de conmutación

$$[\check{\mathbf{r}}_j, \check{\mathbf{L}}_k] = i\hbar \sum_\ell \epsilon_{j k \ell} \check{\mathbf{r}}_\ell .$$

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 (5.7), tenemos

$$[\check{\mathbf{p}}_s, \check{\mathbf{L}}_j] = \sum_{k,\ell} \epsilon_{j k \ell} [\check{\mathbf{p}}_s, \check{\mathbf{r}}_k] \check{\mathbf{p}}_\ell = -i\hbar \sum_\ell \epsilon_{j s \ell} \check{\mathbf{p}}_\ell ,$$

o sea,

$$[\check{\mathbf{p}}_i, \check{\mathbf{L}}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{i j k} \check{\mathbf{p}}_k . \quad (5.8)$$

Conociendo los conmutadores de $\check{\mathbf{L}}$ con los operadores de momento y posición, podemos evaluar el conmutador del operador de momento angular con sí mismo. Se obtiene:

$$[\check{\mathbf{L}}_i, \check{\mathbf{L}}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{i j k} \check{\mathbf{L}}_k ,$$

es decir, las distintas componentes del momento angular no conmutan entre sí.

5.3. Invariancia rotacional.

En el Cap. 2, observamos que en un sistema invariante ante traslaciones espaciales el momento lineal se conserva, lo cual en realidad no es sino un corolario del Teorema de Ehrenfest. Ahora mostraremos explícitamente, mediante un desarrollo análogo, la ley de conservación análoga, pero para un sistema invariante ante rotaciones.

Multipliquemos la relación (5.8) por $\delta\phi_j$ y sumemos sobre j :

$$-\frac{i}{\hbar} [\check{\mathbf{p}}_i, \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}] = (\delta\vec{\phi} \times \check{\mathbf{p}})_i .$$

Con esta ecuación y (5.5), se encuentra

$$[\check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}}] = \delta\vec{\phi} \times \check{\mathbf{p}} .$$

Aplicamos esta relación sobre un autoestado $|\vec{p}_0\rangle$ del operador de momento lineal:

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{p}} (\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}} |\vec{p}_0\rangle) &= \vec{p}_0 \check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}} |\vec{p}_0\rangle + \delta\vec{\phi} \times \vec{p}_0 |\vec{p}_0\rangle \\ &= (\vec{p}_0 + \delta\vec{\phi} \times \vec{p}_0) \check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}} |\vec{p}_0\rangle + o((\delta\phi)^2) . \end{aligned}$$

De este modo

$$\check{\mathbf{p}} (\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}}|\check{\mathbf{p}}_0\rangle) = \mathbf{R}_{\delta\vec{\phi}} \check{\mathbf{p}}_0 (\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}}|\check{\mathbf{p}}_0\rangle) \quad ,$$

lo que permite la identificación

$$\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}}|\check{\mathbf{p}}_0\rangle = |R_{\delta\vec{\phi}}\check{\mathbf{p}}_0\rangle \quad .$$

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 $\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}}$,

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}|\check{\mathbf{p}}_0\rangle = |R_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{p}}_0\rangle \quad .$$

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 (5.1) a la ecuación (5.2), deducimos la siguiente relación entre operadores:

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1}\check{\mathbf{p}}\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} = \mathbf{R}_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{p}} \quad .$$

En general, para un operador $\check{\mathbf{F}} = \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}})$ se obtiene

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1}\check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}})\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} = \check{\mathbf{F}}(\mathbf{R}_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{r}}, \mathbf{R}_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{p}}) \quad ,$$

como es fácil de ver al expandir $\check{\mathbf{F}}$ en series de Taylor.

Para rotaciones en R^3 se tiene que:

$$\vec{r} \cdot \vec{r} = (R_{\vec{\phi}}\vec{r}) \cdot (R_{\vec{\phi}}\vec{r})$$

$$\vec{p} \cdot \vec{p} = (R_{\vec{\phi}}\vec{p}) \cdot (R_{\vec{\phi}}\vec{p})$$

y

$$\vec{r} \cdot \vec{p} = (R_{\vec{\phi}}\vec{r}) \cdot (R_{\vec{\phi}}\vec{p}) \quad ,$$

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

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1}\check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}^2, \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{p}}^2)\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} = \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}^2, \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}}, \check{\mathbf{p}}^2) \quad .$$

Si $\check{\mathbf{F}}$ es invariante ante $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$, $\forall \vec{\phi}$, entonces

$$[\check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}] = 0 \quad .$$

Proposición:

$$[\check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}] = 0 \quad \forall \vec{\phi} \iff [\check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{L}}] = 0 \quad .$$

Demostración:

- ii) Supongamos que $[\check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{L}}] = 0$, entonces, como $\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}$ es sólo función del operador $\check{\mathbf{L}}$, se tiene que $[\check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}] = 0$.

ii) Supongamos que $[\check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}] = 0 \quad \forall \vec{\phi}$. Entonces, en particular, esta relación se cumple para rotaciones infinitesimales $\delta\vec{\phi}$, o sea,

$$\begin{aligned} 0 &= \check{\mathbf{F}}\check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}} - \check{\mathbf{U}}_{\delta\vec{\phi}}\check{\mathbf{F}} \\ &= \check{\mathbf{F}} \left(\check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}} \right) - \left(\check{\mathbf{1}} - \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}} \right) \check{\mathbf{F}} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \check{\mathbf{F}} \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}} + \frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}} \check{\mathbf{F}} \\ &= -\frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot [\check{\mathbf{F}}\check{\mathbf{L}} - \check{\mathbf{L}}\check{\mathbf{F}}] = -\frac{i}{\hbar} \delta\vec{\phi} \cdot [\check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{L}}] \quad , \end{aligned}$$

o sea,

$$[\check{\mathbf{F}}, \check{\mathbf{L}}] = 0 \quad .$$

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

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}^{-1} \check{\mathbf{H}} \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}} = \check{\mathbf{H}} \iff [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{U}}_{\vec{\phi}}] = 0 \iff [\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{L}}] = 0 \implies \frac{d}{dt} \langle \check{\mathbf{L}} \rangle = \mathbf{0} \quad .$$

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.

Hemos visto que los operadores $\check{\mathbf{r}}$ y $\check{\mathbf{p}}$, bajo rotaciones, se comportan igual que los vectores usuales en \mathbb{R}^3 . En algún sentido, podemos entonces decir que $\check{\mathbf{r}}$ y $\check{\mathbf{p}}$ son *vectores*, claro que en un espacio de operadores. Algo análogo se hace en Relatividad Especial, al definir los cuadvectores: del mismo modo que los vectores usuales transforman de cierta manera específica, conservando su norma, bajo rotaciones en \mathbb{R}^3 , existen objetos, en el espacio de cuatro dimensiones (t, \vec{r}) , que transforman conservando su norma (el intervalo) bajo “rotaciones” (las transformaciones de Lorentz) en dicho espacio. Es natural entonces definir vectores en el espacio de operadores como tríos de operadores que, bajo rotaciones, transforman del mismo modo que los vectores usuales en \mathbb{R}^3 , lo cual justifica la siguiente definición.

Definición:

Operadores vectoriales son un trío de operadores en \mathcal{H} , que bajo rotaciones transforman como

$$\check{\mathbf{F}}(\mathbf{R}_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{r}}, \mathbf{R}_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{p}}) = \mathbf{R}_{\vec{\phi}}\check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) \quad .$$

Los operadores $\check{\mathbf{r}}$ y $\check{\mathbf{p}}$, entonces, son operadores vectoriales. Pero el producto cruz de dos vectores en \mathbb{R}^3 también transforma como un vector ante rotaciones propias, de modo que $\check{\mathbf{L}} = \check{\mathbf{r}} \times \check{\mathbf{p}}$, $\check{\mathbf{p}} \times \check{\mathbf{L}}$, etc., también son operadores vectoriales.

Como veremos a continuación, varias afirmaciones que hemos demostrado hasta ahora para el momento angular son en realidad válidas para todo operador vectorial.

Si $\check{\mathbf{F}}$ es un operador vectorial, se deduce que

$$\check{\mathbf{U}}_{\check{\phi}}^{-1} \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) \check{\mathbf{U}}_{\check{\phi}} = \mathbf{R}_{\check{\phi}} \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) , \quad (5.9)$$

o bien,

$$e^{i\check{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}/\hbar} \check{\mathbf{F}} e^{-i\check{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}/\hbar} = \mathbf{R}_{\check{\phi}} \check{\mathbf{F}} .$$

Para rotaciones infinitesimales se obtiene que

$$\check{\mathbf{U}}_{\delta\check{\phi}}^{-1} \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) \check{\mathbf{U}}_{\delta\check{\phi}} = \check{\mathbf{F}} + \frac{i}{\hbar} [\delta\check{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}, \check{\mathbf{F}}] .$$

Por otra parte

$$\mathbf{R}_{\delta\check{\phi}} \check{\mathbf{F}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) = \check{\mathbf{F}} + \delta\check{\phi} \times \check{\mathbf{F}} ,$$

luego, reemplazando estas dos últimas ecuaciones en la definición de operador vectorial, se obtiene la relación

$$\frac{i}{\hbar} [\delta\check{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}, \check{\mathbf{F}}] = \delta\check{\phi} \times \check{\mathbf{F}} .$$

Dado que el ángulo infinitesimal $\delta\check{\phi}$ es arbitrario podemos elegir $\delta\check{\phi} = \delta\phi \hat{e}_j$, concluyendo

$$\frac{i}{\hbar} [\delta\check{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}, \check{\mathbf{F}}_i] = \frac{i}{\hbar} \delta\phi_j [\check{\mathbf{L}}_j, \check{\mathbf{F}}_i] = \sum_k \epsilon_{ijk} \delta\phi \check{\mathbf{F}}_k ,$$

o sea,

$$[\check{\mathbf{F}}_i, \check{\mathbf{L}}_j] = i\hbar \sum_k \epsilon_{ijk} \check{\mathbf{F}}_k . \quad (5.10)$$

Es inmediato revertir el desarrollo para una rotación infinitesimal $\delta\check{\phi}$, pasando de la relación (5.10) a la ecuación (5.9) y aplicando reiteradamente el resultado para rotaciones infinitesimales, obtener la relación (5.9) para una rotación finita. De este modo:

Proposición: Todo operador $\check{\mathbf{F}}$ que cumple con la ecuación (5.10) es un operador vectorial, y a la inversa, todo operador vectorial cumple con relación (5.10).

Los operadores vectoriales satisfacen propiedades análogas a los vectores en \mathbb{R}^3 . En particular, 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,

$$\check{\mathbf{U}}_{\check{\phi}}^{-1} \check{\mathbf{A}} \cdot \check{\mathbf{B}} \check{\mathbf{U}}_{\check{\phi}} = (\mathbf{R}_{\check{\phi}} \check{\mathbf{A}}) \cdot (\mathbf{R}_{\check{\phi}} \check{\mathbf{B}}) = \check{\mathbf{A}} \cdot \check{\mathbf{B}} .$$

ii) $\check{\mathbf{A}} \times \check{\mathbf{B}}$ es un nuevo operador vectorial

$$\check{\mathbf{U}}_{\check{\phi}} (\check{\mathbf{A}} \times \check{\mathbf{B}}) \check{\mathbf{U}}_{\check{\phi}} = \mathbf{R}_{\check{\phi}} \check{\mathbf{A}} \times \mathbf{R}_{\check{\phi}} \check{\mathbf{B}} = \mathbf{R}_{\check{\phi}} (\check{\mathbf{A}} \times \check{\mathbf{B}}) .$$

5.4. Autovalores y autovectores.

A continuación encontraremos los autovalores y autovectores del operador momento angular. 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:

$$[\check{\mathbf{L}}_i, \check{\mathbf{L}}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\check{\mathbf{L}}_k$$

$$[\check{\mathbf{r}}_i, \check{\mathbf{L}}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\check{\mathbf{r}}_k$$

y

$$[\check{\mathbf{p}}_i, \check{\mathbf{L}}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\check{\mathbf{p}}_k .$$

Estas tres relaciones derivan de la relación (5.10) 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:

$$[\check{\mathbf{L}}_i, \check{\mathbf{L}}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\check{\mathbf{L}}_k \implies (\Delta L_i)(\Delta L_j) \geq \frac{\hbar}{2} |\epsilon_{ijk}\langle\check{\mathbf{L}}_k\rangle| .$$

Este resultado contrasta completamente con la experiencia clásica: es imposible, en general, medir simultáneamente dos componentes del momento angular orbital $\check{\mathbf{L}}$. Sólo es posible si $\langle\check{\mathbf{L}}_j\rangle = 0$ para las tres componentes $j = x, y, z$.

Definamos el operador

$$\check{\mathbf{L}}^2 = \check{\mathbf{L}} \cdot \check{\mathbf{L}} = \check{\mathbf{L}}_x^2 + \check{\mathbf{L}}_y^2 + \check{\mathbf{L}}_z^2 .$$

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 existe 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, como observamos antes, 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

$$[\check{\mathbf{J}}_i, \check{\mathbf{J}}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\check{\mathbf{J}}_k . \quad (5.11)$$

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 (5.11) 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 (5.11), y no usar para nada las propiedades específicas del momento angular orbital.

La relación (5.11) implica que $\vec{\mathbf{J}}$ es un “operador vectorial” al usar el propio $\vec{\mathbf{J}}$ como “generador de rotaciones”:

$$e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\vec{\mathbf{J}}}\vec{\mathbf{J}}e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\vec{\mathbf{J}}} = \mathbf{R}(\vec{\phi})\vec{\mathbf{J}} . \quad (5.12)$$

(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 $\vec{\mathbf{J}}$ es el momento angular orbital $\vec{\mathbf{L}}$, entonces $R(\vec{\phi})$ sí corresponde a una rotación en nuestro espacio usual R^3 .)

A partir de (5.12) se deduce que

$$\begin{aligned} e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\vec{\mathbf{J}}}\vec{\mathbf{J}}^2e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\vec{\mathbf{J}}} &= e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\vec{\mathbf{J}}}\vec{\mathbf{J}}\cdot\vec{\mathbf{J}}e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\vec{\mathbf{J}}} = \\ &= e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\vec{\mathbf{J}}}\vec{\mathbf{J}}e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\vec{\mathbf{J}}}\cdot e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\vec{\mathbf{J}}}\vec{\mathbf{J}}e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\vec{\mathbf{J}}} \\ &= \left(R(\vec{\phi})\vec{\mathbf{J}}\right)\cdot\left(R(\vec{\phi})\vec{\mathbf{J}}\right) = \vec{\mathbf{J}}^2 . \end{aligned} \quad (5.13)$$

Tomando el límite $\vec{\phi} \rightarrow 0$ en (5.13) (o usando las reglas de conmutación (5.11)) es fácil demostrar que

$$[\vec{\mathbf{J}}^2, \vec{\mathbf{J}}_i] = 0 \quad i = x, y, z .$$

En el conjunto de operadores compatibles podemos incorporar a $\vec{\mathbf{J}}^2$ y a una componente de $\vec{\mathbf{J}}$. Por fijar ideas, trabajemos con $\{\vec{\mathbf{J}}^2, \vec{\mathbf{J}}_z\}$ como observables compatibles y sea $|\lambda m\rangle$ un autoestado de ambos observables, es decir,

$$\vec{\mathbf{J}}^2|\lambda m\rangle = \hbar^2\lambda|\lambda m\rangle$$

y

$$\vec{\mathbf{J}}_z|\lambda m\rangle = \hbar m|\lambda m\rangle .$$

Usando la ecuación (5.13) podemos escribir

$$e^{\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\vec{\mathbf{J}}}\vec{\mathbf{J}}^2e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\vec{\mathbf{J}}} = \hbar^2\lambda|\lambda m\rangle ,$$

o sea,

$$\vec{\mathbf{J}}^2\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\vec{\mathbf{J}}}|\lambda m\rangle\right) = \hbar^2\lambda\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{\phi}\cdot\vec{\mathbf{J}}}|\lambda m\rangle\right) .$$

De este modo se encuentra que mediante rotaciones del estado $|\lambda m\rangle$ es posible obtener otros autoestados de $\vec{\mathbf{J}}^2$ con el mismo autovalor λ . En otras palabras, $\vec{\mathbf{J}}$ rota los autoestados de momento angular, pero cambiando sólo su proyección en \hat{z} , no su momento angular total.

Estudiemos con mayor detalle las características del espacio de degeneración de \check{J}^2 . Para ello introduzcamos los operadores

$$\check{J}_+ = \check{J}_x + i\check{J}_y$$

y

$$\check{J}_- = \check{J}_x - i\check{J}_y .$$

Dado el carácter autohermítico de \check{J}_x y \check{J}_y , se cumple

$$(\check{J}_+)^{\dagger} = \check{J}_-$$

y

$$(\check{J}_-)^{\dagger} = \check{J}_+ .$$

Es inmediato mostrar que \check{J}_+ y \check{J}_- cumple con las siguientes reglas de conmutación

$$[\check{J}_z, \check{J}_+] = \hbar\check{J}_+ , \quad (5.14)$$

$$[\check{J}_z, \check{J}_-] = -\hbar\check{J}_- \quad (5.15)$$

y

$$[\check{J}^2, \check{J}_{\pm}] = 0 .$$

A partir del último conmutador se deduce que

$$\check{J}^2 (\check{J}_{\pm}|\lambda m\rangle) = \hbar^2\lambda (\check{J}_{\pm}|\lambda m\rangle)$$

de modo que los $\check{J}_{\pm}|\lambda m\rangle$ también son autovectores de \check{J}^2 con el mismo autovalor original, $\hbar^2\lambda$.

Analicemos cómo se comportan estos vectores ante la acción de \check{J}_z . Para ello reescribimos las relaciones (5.14) y (5.15) en la forma

$$\check{J}_z\check{J}_{\pm} = \check{J}_{\pm}(\check{J}_z \pm \hbar\mathbf{1}) .$$

Operando con esta igualdad sobre un vector $|\lambda m\rangle$ concluimos que

$$\check{J}_z(\check{J}_+|\lambda m\rangle) = \hbar(m+1)(\check{J}_+|\lambda m\rangle)$$

y

$$\check{J}_z(\check{J}_-|\lambda m\rangle) = \hbar(m-1)(\check{J}_-|\lambda m\rangle)$$

Es decir, al actuar sobre un vector $|\lambda m\rangle$ con los operadores \check{J}_{\pm} , el autovalor de \check{J}^2 (que es $\hbar^2\lambda$) no se altera, mientras que el autovalor ante el operador \check{J}_z sí se modifica (pasa de $\hbar m$ a $\hbar(m \pm 1)$). Por esta razón, los operadores \check{J}_{\pm} se denominan “operadores de subida” y de “bajada” respectivamente. De la discusión anterior se tiene que

$$\check{J}_+|\lambda m\rangle = \alpha_+(m)|\lambda, m+1\rangle \quad (5.16)$$

y

$$\check{J}_-|\lambda m\rangle = \alpha_-(m)|\lambda, m-1\rangle . \quad (5.17)$$

Para evaluar las constantes α_{\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

$$\begin{aligned} 0 \leq |\alpha_+|^2 &= (\check{\mathbf{J}}_+ |\lambda m\rangle)^\dagger (\check{\mathbf{J}}_+ |\lambda m\rangle) \\ &= \langle \lambda m | \check{\mathbf{J}}_- \check{\mathbf{J}}_+ | \lambda m \rangle = \hbar^2 (\lambda - m(m+1)) . \end{aligned} \quad (5.18)$$

En forma análoga

$$\begin{aligned} 0 \leq |\alpha_-|^2 &= (\check{\mathbf{J}}_- |\lambda m\rangle)^\dagger (\check{\mathbf{J}}_- |\lambda m\rangle) \\ &= \langle \lambda m | \check{\mathbf{J}}_+ \check{\mathbf{J}}_- | \lambda m \rangle = \hbar^2 (\lambda - m(m-1)) . \end{aligned} \quad (5.19)$$

Sumando estas dos desigualdades obtenemos que $\lambda - m^2 \geq 0$, o sea,

$$-\sqrt{\lambda} \leq m \leq +\sqrt{\lambda} . \quad (5.20)$$

Esta desigualdad parece estar en contradicción con las relaciones (5.16) y (5.17), pues dichas relaciones nos llevan a escribir

$$(\check{\mathbf{J}}_{\pm})^h |\lambda m\rangle = (\text{constante}) |\lambda, m \pm h\rangle , \quad (5.21)$$

de modo que, al elegir h suficientemente grande, aparentemente podemos encontrar valores de $m' = m \pm h$ que no cumplan con la desigualdad (5.20). Esta aparente contradicción se obvia sólo si asumimos que la constante involucrada en la ecuación (5.21) 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

$$m_1 - m_2 = h \in \mathbb{N}^* . \quad (5.22)$$

De las relaciones anteriores y las ecuaciones (5.16) y (5.17) que definen las constantes $\alpha_{\pm}(m)$ se tiene que

$$\alpha_+(m_1) = \alpha_-(m_2) = 0 .$$

Usando este resultado en (5.18) y (5.19) se obtiene que

$$0 = \hbar^2 (\lambda - m_1(m_1 + 1))$$

$$0 = \hbar^2 (\lambda - m_2(m_2 - 1)) ,$$

es decir,

$$\lambda = m_1(m_1 + 1) = m_2(m_2 - 1) .$$

Esta ecuación junto con (5.22) implican que

$$m_1 = \frac{\hbar}{2}$$

y

$$m_2 = -\frac{\hbar}{2} = -m_1 .$$

Denotemos por j al valor máximo que puede tomar m (esto es, $j = m_1 = \hbar/2 = -m_2$). Como \hbar 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 recapitulamos:

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 $[\check{\mathbf{J}}_i, \check{\mathbf{J}}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\check{\mathbf{J}}_k$, 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 separa 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 semi-entero. Dichos espacios poseen dimensión $(2j + 1)$ y una base es

$$\{|jm\rangle ; m = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j\} .$$

Dicha base está caracterizada por las ecuaciones

$$\check{\mathbf{J}}^2 |jm\rangle = \hbar^2 j(j + 1) |jm\rangle \tag{5.23}$$

$$\check{\mathbf{J}}_z |jm\rangle = \hbar m |J, m\rangle \quad (5.24)$$

$$\check{\mathbf{J}}_{\pm} |jm\rangle = \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle , \quad (5.25)$$

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 (5.24) y (5.25). 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 $\check{\mathbf{J}}$:

$$|\psi\rangle \in \mathcal{H}_j \implies e^{-i\vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{J}}} |\psi\rangle \in \mathcal{H}_j \quad \forall |\vec{\phi}|.$$

Hasta el momento, hemos construido una serie de operadores a partir de $\check{\mathbf{J}}$. Todos permiten mover vectores dentro del mismo subespacio de degeneración asociado a un número cuántico dado j . En particular, los operadores $\check{\mathbf{J}}_{\pm}$ cambian la proyección en \hat{z} , y de este modo, conocido un $|jm\rangle$, podemos en principio encontrar todos los otros vectores del subespacio. Sin embargo, para tener la base completa del espacio necesitamos un operador que permita salir del subespacio de momento angular j , y esto lo conseguimos con el operador vectorial definido a continuación.

Sea $\check{\mathbf{F}}$ un trío de operadores que cumple las leyes de conmutación

$$[\check{\mathbf{F}}_j, \check{\mathbf{J}}_k] = i\hbar \epsilon_{jkl} \check{\mathbf{F}}_l , \quad (5.26)$$

donde $\check{\mathbf{J}}$ es un operador “tipo momento angular”, i.e. que cumple con relaciones de conmutación (5.11). Si un operador cumple con las reglas de conmutación (5.26) decimos que tal operador es un *operador vectorial respecto a $\check{\mathbf{J}}$* . Definamos

$$\check{\mathbf{F}}_{\pm} = \check{\mathbf{F}}_x \pm i\check{\mathbf{F}}_y . \quad (5.27)$$

A partir del conmutador (5.26) 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: Sea $|j, m = j\rangle$ uno de los autovectores de $\{\check{\mathbf{J}}^2, \check{\mathbf{J}}_z\}$, entonces

$$\check{\mathbf{F}}_+ |j, j\rangle = \alpha |j + 1, j + 1\rangle . \quad (5.28)$$

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 $(\check{\mathbf{F}}_+ |jj\rangle)$ 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.

En todo caso, la constante α en la relación (5.28) puede que sea nula, no existiendo criterios generales para saber cuando ello ocurre.

5.5. Autofunciones del momento angular orbital.

Utilicemos los resultados de la sección anterior, particularizados al caso 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 expandámoslo en la base de posición:

$$|\psi\rangle = \int d^3r \psi(\vec{r}) |\vec{r}\rangle .$$

Al operar sobre él mediante $\check{U}_{\vec{\phi}}$ tenemos

$$\check{U}_{\vec{\phi}} |\psi\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}} |\psi\rangle = \int d^3r \psi(\vec{r}) |R_{\vec{\phi}} \vec{r}\rangle$$

y cambiando la variable de integración, $\vec{r} \rightarrow R_{\vec{\phi}}^{-1} \vec{r}$, se tiene

$$e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}} |\psi\rangle = \int d^3r \psi \left(R_{\vec{\phi}}^{-1} \vec{r} \right) |\vec{r}\rangle$$

de modo que

$$\langle \vec{r} | e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}} |\psi\rangle =: e^{-\frac{i}{\hbar} \vec{\phi} \cdot \check{\mathbf{L}}} \psi(\vec{r}) = \psi \left(R_{\vec{\phi}}^{-1} \vec{r} \right) . \quad (5.29)$$

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:

El operador $(\check{\mathbf{L}})^2 = \left(\check{\mathbf{r}} \times \check{\mathbf{p}} \right)^2$ (sólo) posee autovalores $\hbar^2 \ell(\ell + 1)$, con ℓ 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 (5.29), sigue que

$$\psi_{\ell m} \left(R_{\alpha \hat{z}}^{-1} \vec{r} \right) = e^{-i\alpha m} \psi_{\ell m}(\vec{r}) .$$

Expresando el vector \vec{r} en coordenadas esféricas (respecto al eje \hat{z}), se obtiene

$$\psi_{\ell m}(r, \theta, \phi - \alpha) = e^{-i\alpha m} \psi_{\ell m}(r, \theta, \phi) \quad \forall \alpha \in R . \quad (5.30)$$

Si elegimos $\alpha = 2\pi$ en la última ecuación, la condición de que $\psi(\vec{r})$ sea una función monovaluada en R^3 , exige que

$$\psi_{\ell m}(r, \theta, \phi - 2\pi) = \psi_{\ell m}(r, \theta, \phi) ,$$

de modo que

$$e^{-2\pi i m} = 1 .$$

Esta relación exige que m deba ser entero, y por consiguiente también ℓ (que es el valor máximo que puede tomar m), o sea,

$$\ell = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (\text{para el caso del momento angular orbital}) .$$

Usemos la ecuación (5.30) con $\alpha = \phi$. Definamos $\psi_{\ell m}(r, \theta, 0) = \psi_{\ell m}(r, \theta)$. Entonces se encuentra que

$$\psi_{\ell m}(r, \theta, \phi) = e^{im\phi} \psi_{\ell m}(r, \theta) . \quad (5.31)$$

A continuación deduciremos una expresión general para los autoestados de los operadores $\{\check{\mathbf{L}}^2, \check{L}_z\}$, asociados al momento angular orbital.

Comenzamos escribiendo la ecuación (5.25) 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

$$\begin{aligned} |\ell m\rangle &= \frac{1}{\hbar^{\ell-m}}\sqrt{\frac{(\ell+m)!}{(2\ell)!(\ell-m)!}}\check{\mathbf{L}}_-^{\ell-m}|\ell, \ell\rangle \\ &= \frac{1}{\hbar^{\ell+m}}\sqrt{\frac{(\ell-m)!}{(2\ell)!(\ell+m)!}}\check{\mathbf{L}}_+^{\ell+m}|\ell, -\ell\rangle . \end{aligned} \quad (5.32)$$

5.5.1. Los operadores de momento angular en la representación de coordenadas.

Sea $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$ un vector arbitrario. Entonces

$$\begin{aligned} \langle \vec{r}|\check{\mathbf{L}}|\Psi\rangle &= \langle \vec{r}|\check{\vec{r}} \times \check{\vec{p}}|\Psi\rangle \\ &= \vec{r} \times \langle \vec{r}|\check{\vec{p}}|\Psi\rangle \\ &= -i\hbar\vec{r} \times \vec{\nabla}\langle \vec{r}|\Psi\rangle , \end{aligned}$$

o sea,

$$\langle \vec{r}|\check{\mathbf{L}}|\Psi\rangle = -i\hbar\vec{r} \times \vec{\nabla}\Psi(\vec{r}) = \check{\mathbf{L}}^{(op)}\Psi(\vec{r}) .$$

Acá $\check{\mathbf{L}}^{(op)}$ es un operador diferencial que opera sobre funciones complejas. Para cada una de las componentes cartesianas por separado se tiene:

$$\langle \vec{r}|\check{\mathbf{L}}_x|\Psi\rangle = -i\hbar\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right)\Psi(\vec{r}) ,$$

$$\langle \vec{r} | \check{\mathbf{L}}_y | \Psi \rangle = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) \Psi(\vec{r})$$

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:

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} ,$$

$$x = r \sin \theta \cos \phi ,$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

y

$$z = r \cos \theta .$$

Pongamos

$$-i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = A \frac{\partial}{\partial \theta} + B \frac{\partial}{\partial \phi} + C \frac{\partial}{\partial r} \quad (5.33)$$

y encontremos el valor de las constantes A, B, C .

Operando con la relación (5.33) 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 (5.33), con $C = 0$, sobre la función $x = r \sin \theta \cdot \cos \phi$ se obtiene

$$-i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) x = \left(A \frac{\partial}{\partial \theta} + B \frac{\partial}{\partial \phi} \right) (r \sin \theta \cos \phi) ,$$

o sea,

$$0 = r (A \cos \theta \cos \phi - B \sin \theta \sin \phi) .$$

Finalmente, operando con la relación (5.33), con $C = 0$, sobre $z = r \cos \theta$, se obtiene

$$-i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) z = \left(A \frac{\partial}{\partial \theta} + B \frac{\partial}{\partial \phi} \right) r \cos \theta ,$$

o sea,

$$-i\hbar y = -Ar \sin \theta .$$

De las relaciones anteriores se deduce que

$$A = \frac{i\hbar r \sin \theta \sin \phi}{r \sin \theta} = i\hbar \sin \phi$$

y

$$B = i\hbar \frac{\cos \theta \cos \phi}{\sin \theta} = i\hbar \cotg \theta \cos \phi .$$

(Otro modo de obtener los mismos resultados es usar la regla de la cadena, y escribir $\partial/\partial x = \partial r/\partial x \partial/\partial r + \partial \theta/\partial x \partial/\partial \theta + \partial \phi/\partial x \partial/\partial \phi$, y análogamente con y y z .)

Podemos ahora escribir el operador diferencial $L_x^{(op)}$ en coordenadas polares esféricas:

$$L_x^{(op)} = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = i\hbar \left(\cotg \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} + \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) .$$

Análogamente, se obtiene

$$L_y^{(op)} = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) = i\hbar \left(\cotg \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} - \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right)$$

y

$$L_z^{(op)} = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} .$$

La forma particularmente simple de $L_z^{(op)}$ no debería sorprendernos, ya que justamente escogimos la base de momento angular como autovectores de $\hat{\mathbf{J}}_z$, de modo que ésta es una dirección privilegiada. Notemos también que esta última relación concuerda con (5.31):

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} e^{im\phi} = m e^{im\phi} .$$

Para $L_+^{(op)} \equiv L_x^{(op)} + iL_y^{(op)}$ se obtiene

$$\begin{aligned} L_+^{(op)} &= i\hbar \left(\cotg \theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial \phi} + \sin \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + (-\hbar) \left(\cotg \theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \phi} - \cos \phi \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \\ &= \hbar \left[\cotg \theta (i \cos \phi - \sin \phi) \frac{\partial}{\partial \phi} + (i \sin \phi + \cos \phi) \frac{\partial}{\partial \theta} \right] \\ &= \hbar e^{i\phi} \left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cotg \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) . \end{aligned}$$

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

$$L^{(op)2} = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] .$$

Observemos que esto tiene precisamente la forma de la parte angular del Laplaciano en coordenadas esféricas. Esto no es casualidad, como se verá en el Cap. 6.

5.6. 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 θ y ϕ , 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 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 (5.31) implica que $Y_{\ell m}(\theta, \phi)$ se puede escribir como el producto de dos funciones, una de las cuales sólo depende de θ y otra que sólo depende de ϕ :

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = g_{\ell m}(\theta) e^{im\phi} .$$

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:

$$\begin{aligned} \langle \theta \phi | \check{\mathbf{L}}_z | \ell m \rangle &= L_z^{(op)} Y_{\ell m}(\theta, \phi) \\ &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi} g_{\ell m}(\theta) e^{im\phi} = \hbar m g_{\ell m}(\theta) e^{im\phi} \\ &= \hbar m Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \hbar m \langle \theta \phi | \ell m \rangle . \end{aligned}$$

A continuación encontraremos explícitamente las autofunciones de momento angular en representación de coordenadas, utilizando los resultados generales de álgebra de operadores de la Sec. 5.4. Comenzaremos encontrando Y_{00} , y luego aplicaremos los operadores de la Sec. 5.5.1, tanto para pasar a estados de momento angular ℓ distinto, como para movernos a estados con distintas proyecciones de momento angular m dentro de cada subespacio de momento angular.

5.6.1. Evaluación de Y_{00} .

Consideremos el caso particular en que $\ell = 0$. Entonces también $m = 0$ (recuerde que para un valor de ℓ dado, m sólo puede tomar los valores $-\ell, -\ell + 1, \dots, \ell$).

Al usar (5.25) 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 (θ, ϕ) , 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 :

$$\Psi_{\ell=m=0}(\vec{r}) = f(r) .$$

5.6.2. 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 (5.28) con el operador vectorial $\vec{\mathbf{F}} = \check{\mathbf{r}}$. De acuerdo a (5.27), definimos

$$\check{\mathbf{r}}_+ = \check{\mathbf{x}} + i\check{\mathbf{y}} .$$

Se tiene:

$$\begin{aligned} |11\rangle &= (\text{cte}) \check{\mathbf{r}}_+ |00\rangle \\ |22\rangle &= (\text{cte}) (\check{\mathbf{r}}_+)^2 |00\rangle \\ &\vdots \\ |\ell\ell\rangle &= (\text{cte}) (\check{\mathbf{r}}_+)^{\ell} |00\rangle . \end{aligned} \tag{5.34}$$

En la representación de posición el operador $(\check{\mathbf{r}}_{\pm})^{\ell}$ queda expresado por

$$(x^{(op)} \pm iy^{(op)})^{\ell} = [r \sin \theta (\cos \phi \pm i \sin \phi)]^{\ell} = r^{\ell} \sin^{\ell} \theta e^{\pm i\ell\phi} .$$

Usando esta expresión podemos escribir (5.34) en la representación de posición:

$$Y_{\ell\ell}(\theta, \phi) = (\text{cte}) r^{\ell} \sin^{\ell} \theta e^{i\ell\phi} Y_{00}(\theta, \phi) ,$$

o bien,

$$Y_{\ell\ell}(\theta, \phi) = C_{\ell} e^{i\ell\phi} \sin^{\ell} \theta . \tag{5.35}$$

Ejercicio:

(a) Verifique que

$$L_+^{(op)} Y_{\ell\ell}(\theta, \phi) = 0 .$$

(b) Muestre que la expresión (5.35) es la única solución del tipo $e^{i\ell\phi} g_{\ell}(\theta)$ que posee la ecuación diferencial de la parte (a).

La constante de normalización C_{ℓ} se evalúa exigiendo

$$\int d\Omega |Y_{\ell m}(\theta, \phi)|^2 = 1 .$$

De esta manera se encuentra que

$$\begin{aligned} 1 &= |C_\ell|^2 \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^{+1} (d \cos \theta) (\sin^2 \theta)^\ell \\ &= 4\pi |C_\ell|^2 \frac{2^{2\ell} (\ell!)^2}{(2\ell + 1)!} . \end{aligned}$$

Despejando C_ℓ y eligiendo la fase de acuerdo a cierta forma tradicional, obtenemos

$$Y_{\ell\ell}(\theta, \phi) = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{(2\ell + 1)!}{4\pi}} e^{i\ell\phi} \sin^\ell \theta .$$

Note que también se tiene que

$$|\ell, \ell\rangle = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \sqrt{(2\ell + 1)!} \frac{(\check{\mathbf{x}} + i\check{\mathbf{y}})^\ell}{r^\ell} |00\rangle . \quad (5.36)$$

En lo que sigue usaremos esta relación para evaluar a las demás autofunciones del momento angular orbital.

5.6.3. Evaluación de $Y_{\ell m}$.

Las restantes autofunciones se obtienen aplicando sucesivamente a $|\ell\ell\rangle$ dado por (5.36), el operador de bajada $\check{\mathbf{L}}_-$. De esta manera se obtiene (al usar (5.32))

$$|\ell m\rangle = \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell!} \sqrt{(2\ell + 1) \frac{(\ell + m)!}{(\ell - m)!}} \left(\frac{\check{\mathbf{L}}_-}{\hbar} \right)^{\ell - m} \frac{(\check{\mathbf{x}} + i\check{\mathbf{y}})^\ell}{r^\ell} |00\rangle .$$

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

$$\begin{aligned} Y_{\ell m}(\theta, \phi) &= \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell! \hbar^{\ell - m}} \sqrt{(2\ell + 1) \frac{(\ell + m)!}{(\ell - m)!}} \frac{1}{(x - iy)^m} \\ &\cdot \left(\frac{1}{x - iy} L_-^{(op)} \right)^{\ell - m} (x - iy)^\ell \frac{(x + iy)^\ell}{r^\ell} Y_{00}(\theta, \phi) . \end{aligned}$$

Ahora

$$\frac{1}{x - iy} = \frac{e^{i\phi}}{r \sin \theta}$$

y

$$(x - iy)(x + iy) = r^2 \sin^2 \theta .$$

Usando estas relaciones y la expresión del operador $L_-^{(op)}$ en coordenadas polares esféricas, se obtiene

$$\begin{aligned} Y_{\ell m}(\theta, \phi) &= \frac{(-1)^\ell}{2^\ell \ell! r^\ell} \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell + m)!}{(\ell - m)!}} \left(\frac{e^{i\phi}}{r \sin \theta} \right)^m \\ &\quad \cdot \left(\frac{e^{i\phi}}{r \sin \theta} \frac{L_-^{(op)}}{\hbar} \right)^{\ell - m} r^{2\ell} \sin^{2\ell} \theta \\ &= \frac{1}{2^\ell \ell!} \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell + m)!}{(\ell - m)!}} \frac{e^{im\phi}}{\sin^m \theta} \left(\frac{\partial}{\partial \cos \theta} \right)^{\ell - m} (\cos^2 \theta - 1)^\ell . \end{aligned}$$

A estos autoestados de $\check{\mathbf{L}}^2$ y $\check{\mathbf{L}}_z$ se los conoce como *armónicos esféricos*. Normalmente, aparecen en el contexto de ecuaciones diferenciales como una base para las soluciones angulares para la ecuación de Laplace. Acá, en cambio, hemos encontrado que los armónicos esféricos son los autoestados de momento angular, escritos en representación de coordenadas. Los armónicos esféricos se expresan normalmente en términos de las *funciones asociadas de Legendre* $P_{\ell m}(\cos \theta)$:

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - m)!}{(\ell + m)!}} P_{\ell m}(\cos \theta) e^{im\phi} , \quad (5.37)$$

donde,

$$P_{\ell m}(x) = \frac{(-1)^m (\ell + m)!}{2^\ell \ell! (\ell - m)!} \left(\frac{1}{1 - x^2} \right)^{\frac{m}{2}} \left(\frac{d}{dx} \right)^{\ell - m} (x^2 - 1)^\ell . \quad (5.38)$$

Esta última ecuación constituye una generalización de la llamada “fórmula de Rodrigues” para los polinomios de Legendre.

5.6.4. Armónicos esféricos.

De acuerdo al análisis anterior los armónicos esféricos cumplen con

$$L^{(op)2} Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \hbar^2 \ell(\ell + 1) Y_{\ell m}(\theta, \phi) ,$$

$$L_z^{(op)} Y_{\ell m}(\theta, \phi) = \hbar m Y_{\ell m}(\theta, \phi)$$

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 a los polinomios asociados de Legendre.

A partir de las relaciones (5.37) y (5.38) 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 (θ, ϕ) son direcciones diametralmente opuestas en el espacio, de modo que

$$\Psi_{\ell m}(-\vec{r}) = (-1)^\ell \Psi_{\ell m}(\vec{r}) , \tag{5.39}$$

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

$$\begin{aligned} \langle \Omega | \Omega' \rangle &= \langle \Omega | \left(\sum_{\ell m} |\ell m\rangle \langle \ell m| \right) | \Omega' \rangle = \langle \theta\phi | \left(\sum_{\ell m} |\ell m\rangle \langle \ell m| \right) | \theta'\phi' \rangle \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} Y_{\ell m}^*(\Omega) Y_{\ell m}(\Omega') = \delta(\Omega - \Omega') . \end{aligned} \tag{5.40}$$

En forma explícita, algunos de los armónicos esféricos de orden más bajo son:

$$\begin{aligned} Y_{00}(\Omega) &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ Y_{1,\pm 1}(\Omega) &= \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{\pm i\phi} \sin \theta = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \left(\frac{x \pm iy}{r} \right) \\ Y_{1,0}(\Omega) &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{z}{r} \\ Y_{2,\pm 2}(\Omega) &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}} e^{\pm 2i\phi} \sin^2 \theta = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \left(\frac{x \pm iy}{r} \right)^2 \\ Y_{2,\pm 1}(\Omega) &= \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{\pm i\phi} \cos \theta \sin \theta = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \frac{(x \pm iy)z}{r^2} \\ Y_{2,0}(\Omega) &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \left(\frac{2z^2 - x^2 - y^2}{r^2} \right) . \end{aligned}$$

Capítulo 6

Problemas con simetría esférica.

En este capítulo nos dedicaremos a buscar autoestados de energía en sistemas tridimensionales centrándonos en forma casi exclusiva a problemas con potenciales esféricamente simétricos.

6.1. El problema de dos cuerpos.

Consideremos dos partículas, 1 y 2, interactuando a través de un potencial $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$. Acá \vec{r}_1 y \vec{r}_2 son los operadores de posición de las partículas en cuestión.

El espacio de Hilbert de este sistema compuesto es del tipo

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2 \quad ,$$

donde \mathcal{H}_1 y \mathcal{H}_2 corresponden a los espacios de las partículas aisladas. Una base de \mathcal{H} es $\{|\vec{r}_1, \vec{r}_2\rangle = |\vec{r}_1\rangle \otimes |\vec{r}_2\rangle\}$ (o bien $\{|\vec{r}_1, \vec{r}_2\rangle = |\vec{r}_1\rangle \otimes |\vec{p}_2\rangle\}$, etc.), teniéndose que $\{\vec{r}_1, \vec{r}_2\}$ (o bien $\{\vec{r}_1, \vec{p}_2\}$, etc.) son conjuntos completos de observables compatibles, sociados con una y otra elección de bases. (Acá \vec{p}_1 y \vec{p}_2 son los operadores de momento, conjugados canónicos de \vec{r}_1 y \vec{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

$$\check{\mathbf{H}} = \frac{\check{\mathbf{P}}_1^2}{2m_1} + \frac{\check{\mathbf{P}}_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \quad . \quad (6.1)$$

Es claro que este Hamiltoniano es invariante ante una traslación rígida de ambas partículas, digamos en una cantidad \vec{a} . Poniendo

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}^{(j)} = e^{i\vec{a} \cdot \check{\mathbf{P}}_j / \hbar}$$

y recordando que

$$[\check{\mathbf{p}}_{1i}, \check{\mathbf{p}}_{2j}] = [\check{\mathbf{p}}_{1i}, \check{\mathbf{r}}_{2j}] = 0 \quad , i, j = x, y, z \quad ,$$

tenemos

$$\check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}^{(1)} \check{\mathbf{U}}_{\vec{a}}^{(2)} = e^{-i\vec{a} \cdot (\check{\mathbf{p}}_1 + \check{\mathbf{p}}_2) / \hbar} \equiv e^{-i\vec{a} \cdot \check{\mathbf{P}}_{\mathbf{T}}} \quad ,$$

con

$$\check{\check{\mathbf{P}}}_T = \check{\check{\mathbf{p}}}_1 \check{\check{\mathbf{p}}}_2 = \text{momento total} .$$

$$\begin{aligned} \check{\check{U}}_{\check{\check{a}}}^{(1)} \check{\check{U}}_{\check{\check{a}}}^{(2)} \check{\check{H}}(\check{\check{\mathbf{r}}}_1, \check{\check{\mathbf{r}}}_2, \check{\check{\mathbf{p}}}_1, \check{\check{\mathbf{p}}}_2) \check{\check{U}}_{-\check{\check{a}}}^{(1)} \check{\check{U}}_{-\check{\check{a}}}^{(2)} &= \check{\check{H}}(\check{\check{U}}_{\check{\check{a}}}^{(1)} \check{\check{\mathbf{r}}}_1 \check{\check{U}}_{-\check{\check{a}}}^{(1)}, \check{\check{U}}_{\check{\check{a}}}^{(2)} \check{\check{\mathbf{r}}}_2 \check{\check{U}}_{-\check{\check{a}}}^{(2)}, \check{\check{\mathbf{p}}}_1, \check{\check{\mathbf{p}}}_2) \\ &= \check{\check{H}}(\check{\check{\mathbf{r}}}_1 - \check{\check{\mathbf{a}}}, \check{\check{\mathbf{r}}}_2 - \check{\check{\mathbf{a}}}, \check{\check{\mathbf{p}}}_1, \check{\check{\mathbf{p}}}_2) \end{aligned}$$

Al particularizar esta relación a nuestro Hamiltoniano (6.1), sigue

$$e^{-i\check{\check{\mathbf{a}}}\cdot\check{\check{\mathbf{P}}}_T} \check{\check{H}} e^{i\check{\check{\mathbf{a}}}\cdot\check{\check{\mathbf{P}}}_T} = \check{\check{H}} \iff [\check{\check{H}}, \check{\check{\mathbf{P}}}_T] = \mathbf{0} . \quad (6.2)$$

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 $\{\check{\check{\mathbf{P}}}_T, \check{\check{\mathbf{R}}}, \check{\check{\mathbf{p}}}, \check{\check{\mathbf{r}}}\}$ que cumplan

$$[\check{\check{\mathbf{R}}}_\alpha, \check{\check{\mathbf{P}}}_{T\beta}] = [\check{\check{\mathbf{r}}}_\alpha, \check{\check{\mathbf{p}}}_\beta] = i\hbar\delta_{\alpha,\beta}$$

y

$$[\check{\check{\mathbf{R}}}_\alpha, \check{\check{\mathbf{p}}}_\beta] = [\check{\check{\mathbf{r}}}_\alpha, \check{\check{\mathbf{P}}}_{T\beta}] = 0 .$$

Una posible elección de dicho conjunto es

$$\begin{aligned} \check{\check{\mathbf{R}}} &= \frac{1}{M} (\mathbf{m}_1 \check{\check{\mathbf{r}}}_1 + \mathbf{m}_2 \check{\check{\mathbf{r}}}_2) , \\ \check{\check{\mathbf{P}}}_T &= \check{\check{\mathbf{p}}}_1 + \check{\check{\mathbf{p}}}_2 , \\ \check{\check{\mathbf{r}}} &= \check{\check{\mathbf{r}}}_1 - \check{\check{\mathbf{r}}}_2 \end{aligned}$$

y

$$\check{\check{\mathbf{p}}} = \frac{1}{M} (\mathbf{m}_2 \check{\check{\mathbf{p}}}_1 - \mathbf{m}_1 \check{\check{\mathbf{p}}}_2) ,$$

con $M = m_1 + m_2$.

De acuerdo a (6.2), conviene expresar el Hamiltoniano en términos de este nuevo conjunto de variables canónicamente conjugadas. Usando que

$$\check{\check{\mathbf{p}}}_1 = \check{\check{\mathbf{p}}} + \frac{\mathbf{m}_1}{M} \check{\check{\mathbf{P}}}_T$$

y

$$\check{\check{\mathbf{p}}}_2 = -\check{\check{\mathbf{p}}} + \frac{\mathbf{m}_2}{M} \check{\check{\mathbf{P}}}_T$$

sigue,

$$\check{\check{H}} = \frac{\check{\check{\mathbf{p}}}_1^2}{2m_1} + \frac{\check{\check{\mathbf{p}}}_2^2}{2m_2} + V(\check{\check{\mathbf{r}}}_1 - \check{\check{\mathbf{r}}}_2) = \frac{\check{\check{\mathbf{P}}}_T^2}{2M} + \frac{\check{\check{\mathbf{p}}}^2}{2\mu} + V(\check{\check{\mathbf{r}}}) .$$

Acá μ es la *masa reducida*

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{M} .$$

Así,

$$\check{\check{H}} = \frac{\check{\check{\mathbf{P}}}_T^2}{2M} + \check{\check{H}}_0 ,$$

con

$$\check{\mathbf{H}}_0 = \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + V(\check{\mathbf{r}}) .$$

Notar que $\{\check{\mathbf{P}}, \check{\mathbf{H}}_0(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}})\}$ forman un conjunto de observables compatibles.

Pasemos a la representación de coordenadas. Se tiene:

$$\check{\mathbf{P}}_{\mathbf{T}} \Psi_{\check{\mathbf{P}}_0, E_0}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{R}}) = \check{\mathbf{P}}_0 \Psi_{\check{\mathbf{P}}_0, E_0}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{R}}) ,$$

$$\check{\mathbf{H}}_0 \Psi_{\check{\mathbf{P}}_0, E_0}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{R}}) = E_0 \Psi_{\check{\mathbf{P}}_0, E_0}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{R}})$$

y

$$\check{\mathbf{H}} \Psi_{\check{\mathbf{P}}_0, E_0}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{R}}) = \left[\frac{P_0^2}{2M} + E_0 \right] \Psi_{\check{\mathbf{P}}_0, E_0}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{R}}) = E \Psi_{\check{\mathbf{P}}_0, E_0}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{R}}) .$$

Como $\check{\mathbf{H}}_0$ no depende de $\check{\mathbf{P}}_{\mathbf{T}}$ ni de $\check{\mathbf{R}}$, el sistema de ecuaciones de autovalores representado por las tres últimas ecuaciones admite soluciones en la forma de productos

$$\Psi_{\check{\mathbf{P}}_0, E_0}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{R}}) = \Psi_{\check{\mathbf{P}}_0}(\check{\mathbf{R}}) \Psi_{E_0}(\check{\mathbf{r}}) ,$$

esto es

$$\Psi_{\check{\mathbf{P}}_0, E_0}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{R}}) = e^{i\check{\mathbf{P}}_0 \cdot \check{\mathbf{R}}/\hbar} \Psi_{E_0}(\check{\mathbf{r}})$$

y

$$\left[\frac{\check{\mathbf{P}}^2}{2\mu} + V(\check{\mathbf{r}}) \right] \Psi_{E_0}(\check{\mathbf{r}}) = E_0 \Psi_{E_0}(\check{\mathbf{r}}) .$$

Es precisamente este tipo de ecuación, particularizada al importante caso $V(\check{\mathbf{r}}) = V(r)$, la que se estudiará en la siguiente sección.

6.2. La ecuación radial de Schrödinger.

Consideremos el caso de un potencial esféricamente simétrico, o sea, $\check{\mathbf{V}}(\check{\mathbf{r}}) = \check{\mathbf{V}}(\mathbf{r})$ sólo depende de la magnitud $r = \sqrt{\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{r}}}$. Una partícula de masa reducida μ , moviéndose bajo la influencia de tal potencial estará descrito por el Hamiltoniano

$$\check{\mathbf{H}}(\check{\mathbf{r}}, \check{\mathbf{p}}) = \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + \check{\mathbf{V}}(\check{\mathbf{r}}) .$$

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:

$$\check{\mathbf{H}}|E\ell m\rangle = E|E\ell m\rangle ,$$

$$\check{\mathbf{L}}^2|E\ell m\rangle = \hbar^2 \ell(\ell + 1)|E\ell m\rangle$$

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:

$$\begin{aligned}\check{\mathbf{L}}^2 &= (\check{\mathbf{r}} \times \check{\mathbf{p}})_i (\check{\mathbf{r}} \times \check{\mathbf{p}})_i \\ &= \epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} \check{r}_j \check{p}_k \check{r}_\ell \check{p}_m \\ &= (\delta_{j\ell} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{k\ell}) \check{r}_j \check{p}_k \check{r}_\ell \check{p}_m \\ &= \check{\mathbf{r}}^2 \check{\mathbf{p}}^2 + 2i\hbar \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}} - (\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}})(\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}}) - i\hbar \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}} \ ,\end{aligned}$$

o sea,

$$\check{\mathbf{L}}^2 = \check{\mathbf{r}}^2 \check{\mathbf{p}}^2 + i\hbar \check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}} - (\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}})(\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}}) \ .$$

Despejemos $\check{\mathbf{p}}^2$ y usemos la relación

$$(\check{\mathbf{r}} \cdot \check{\mathbf{p}})^{(op)} = -i\hbar \vec{r} \cdot \vec{\nabla} = -i\hbar r \frac{\partial}{\partial r} \ .$$

De esta manera se encuentra que

$$\begin{aligned}p^{(op)2} \Psi(\vec{r}) &= \frac{1}{r^2} \left[L^{(op)2} - \hbar^2 \left(r \frac{\partial}{\partial r} + \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 \right) \right] \Psi(\vec{r}) \\ &= -\hbar^2 r \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r \Psi(\vec{r})) + \frac{1}{r^2} L^{(op)2} \Psi(\vec{r}) \ .\end{aligned}$$

De esta manera se encuentra que 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 θ y ϕ . 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

$$Y_{\ell m}(\theta, \phi) \left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + V(r) - E \right\} R_{E\ell}(r) = 0 \ ,$$

o sea, $R_{E\ell}(r)$ 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

$$\begin{aligned}\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) R &= \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) \frac{u}{r} \\ &= \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{1}{r} \frac{du}{dr} - r^2 \frac{1}{r^2} u \right) \\ &= \frac{d}{dr} \left(r \frac{du}{dr} - u \right) = r \frac{d^2 u}{dr^2} \ ,\end{aligned}$$

o sea,

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} r \frac{d^2 u}{dr^2} + \left(\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2} + V(r) - E \right) \frac{u}{r} = 0 .$$

Multiplicando por $-\frac{2\mu}{\hbar^2} r$ se encuentra, finalmente:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - U(r) + k^2 \right] u_{k\ell}(r) = 0 . \quad (6.3)$$

Esta ecuación se conoce con el nombre de *Ecuación Radial de Schrödinger*. En (6.3), $U(r)$ 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 (6.3) 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 (6.3), la función de onda $\langle \vec{r} | E \ell m \rangle$ viene dada por

$$\langle \vec{r} | E \ell m \rangle = \Psi_{E\ell m}(r, \theta, \phi) = \frac{u_{k\ell}(r)}{r} Y_{\ell m}(\theta, \phi) .$$

Como $\Psi_{E\ell m}(r\theta\phi)$ tiene que ser finito en el origen ($r = 0$), la solución de (6.3) debe satisfacer la condición

$$u_{k\ell}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0 .$$

Para una energía E fija, la solución general viene dada por

$$\Psi_E(\vec{r}) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{\ell} A_{\ell m} \frac{u_{k\ell}(r)}{r} Y_{\ell m}(\theta, \phi) , \quad (6.4)$$

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 ℓ 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 ℓ fijo. Cuando se tienen energías discretas, generalmente las autoenergías para valores de ℓ distintos no coinciden, luego, a menos que exista una degeneración accidental, en la relación (6.4)

Figura 6.1: (a) Función de onda Ψ_E , (b) función de onda rotada $\check{\mathbf{U}}_{\check{\phi}}\Psi_E$ en presencia de un potencial esféricamente simétrico.

se debe suprimir la suma sobre ℓ . 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:

$$\check{\mathbf{H}}|\Psi_E\rangle = \left(\frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + \check{\mathbf{V}}(r) \right) |\Psi_E\rangle = E|\Psi_E\rangle .$$

Se tiene que

$$\check{\mathbf{U}}_{\check{\phi}} \left[\frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + \check{\mathbf{V}}(|\vec{r}|) \right] \check{\mathbf{U}}_{\check{\phi}^{-1}} = \frac{(R_{\check{\phi}}^{-1}\check{\mathbf{p}})^2}{2\mu} + \check{\mathbf{V}}(|R_{\check{\phi}^{-1}}\vec{r}|) = \frac{\check{\mathbf{p}}^2}{2\mu} + \check{\mathbf{V}}(|\vec{r}|) ,$$

esto es, $\check{\mathbf{U}}_{\check{\phi}}\check{\mathbf{H}} = \check{\mathbf{H}}\check{\mathbf{U}}_{\check{\phi}}$. Este resultado nos permite concluir de que

$$\check{\mathbf{H}} \left(\check{\mathbf{U}}_{\check{\phi}}|\Psi_E\rangle \right) = E \left(\check{\mathbf{U}}_{\check{\phi}}|\Psi_E\rangle \right) .$$

De este modo, todos los estados $\check{\mathbf{U}}_{\check{\phi}}|\Psi_E\rangle$ poseen igual energía. Si $|\Psi_E\rangle$ posee momento angular ℓ , 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 6.1 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 $\check{\mathbf{U}}_{\check{\phi}}\Psi_E(\vec{r})$. 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.

6.2.1. 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 $r^2 V(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} 0$ (en una sección anterior se vió que carecían de sentido físico 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

$$\left[-r^2 \frac{d^2}{dr^2} + \ell(\ell+1) \right] u_{k\ell}(r) \approx 0 \quad \text{en } r = 0 .$$

Esta 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 fué 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 (continuo)¹. 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

$$u_{n\ell}(r) \approx e^{\pm kr} ,$$

con $E_{n\ell} = \hbar^2 k^2 / (2\mu)$.

¹Puede 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.

- (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

$$u_{n\ell}(r) \approx \exp[-Cr^{1+\alpha/2}] \quad ,$$

con

$$C = \sqrt{\frac{8\mu V_0}{\hbar^2(\alpha + 2)^2}} \quad .$$

6.3. La partícula libre en coordenadas polares esféricas.

La ecuación radial de Schrödinger para la partícula libre viene dada por

$$\left[-\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} - k^2 \right] R_{k\ell}(r) = 0 \quad .$$

Esta es la ecuación diferencial que satisfacen las funciones de Bessel esféricas. Dos soluciones linealmente independientes son $j_\ell(kr)$ y $n_\ell(kr)$.

6.3.1. 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

$$n_\ell(kr) = (-1)^\ell \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{-(\ell+\frac{1}{2})}(kr) \quad .$$

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

$$h_\ell^\pm(kr) \equiv n_\ell(kr) \pm i j_\ell(kr) \quad .$$

El comportamiento asintótico de estas funciones y el comportamiento en la vecindad del origen viene dado por

$$\begin{aligned} j_\ell(z) &\xrightarrow{z \rightarrow +\infty} \frac{1}{z} \sin \left(z - \frac{\ell\pi}{2} \right) \quad , \\ n_\ell(z) &\xrightarrow{z \rightarrow +\infty} \frac{1}{z} \cos \left(z - \frac{\ell\pi}{2} \right) \quad , \\ h_\ell^\pm(z) &\xrightarrow{z \rightarrow +\infty} \frac{1}{z} e^{\pm i(z - \frac{\ell\pi}{2})} \cdot \left(1 \pm i \frac{\ell(\ell + 1)}{2z} - \dots \right) \quad , \end{aligned}$$

$$j_\ell(z) \xrightarrow{z \rightarrow 0} \frac{z^\ell}{(2\ell + 1)!!} \left(1 - \frac{z^2}{2(2\ell + 3)} + \dots \right)$$

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

$$f_{\ell-1}(z) = \left(\frac{d}{dz} + \frac{\ell + 1}{z} \right) f_\ell(z) . \quad (6.5)$$

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 (6.5), 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:

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z}$$

$$j_1(z) = \frac{\sin z}{z^2} - \frac{\cos z}{z}$$

$$n_0(z) = -\frac{\cos z}{z}$$

$$n_1(z) = -\frac{\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z} .$$

Dos relaciones muy importantes son:

$$e^{ikz} = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) i^\ell j_\ell(kr) P_\ell(\cos \theta)$$

y

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} (4\pi i^\ell Y_{\ell m}^*(\theta_{\vec{k}}, \phi_{\vec{k}})) j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta, \phi) . \quad (6.6)$$

Figura 6.2: 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 $V_{eff}(r) = \hbar^2 \ell(\ell + 1)/(2\mu r^2)$.

6.3.2. 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:

$$\Psi_{k\ell m}(r, \theta, \phi) = j_\ell(kr)Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad , \quad (6.7)$$

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 (6.7) es una solución particular de la ecuación de Schrödinger para la partícula libre. La solución general para una energía fija viene dada por

$$\Psi_k(\vec{r}) = \sum_{\ell m} A_{\ell m} j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad ,$$

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 (6.6).

La figura 6.2 muestra esquemáticamente el comportamiento de la función regular $j_\ell(kr)$.

Ejercicio:

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:

- (a) Demuestre que para $\ell = 0$, las autofunciones con energía

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$$

vienen dadas por

$$\Psi_{k,\ell=m=0}(r) = A \frac{\sin(kr)}{kr} - B \frac{\cos kr}{kr} \quad .$$

(b) Demuestre que el operador momento lineal $\check{\mathbf{p}}$ satisface

$$[\check{\mathbf{p}}_+, \check{\mathbf{H}}] = 0 \quad ,$$

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

$$\left(\frac{i}{\hbar}\check{\mathbf{p}}_+\right)^\ell \Psi_{k00}(r) = \Psi_{k\ell\ell}(\vec{r}) \quad .$$

(c) Luego demuestre que

$$\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}_+^{(op)} f(r) = (x + iy) \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} f(r)$$

y además que

$$[\check{\mathbf{p}}_+, (\check{\mathbf{x}} + i\check{\mathbf{y}})] = 0 \quad .$$

(d) Combinando los resultados anteriores concluya finalmente que

$$\Psi_{k\ell\ell}(\vec{r}) = \left(\frac{x + iy}{r}\right)^\ell r^\ell \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\right)^\ell \Psi_{k00}(r) = R_{k\ell}(r) Y_{\ell\ell}(\theta, \phi) \quad .$$

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

$$R_{k\ell}(r) = A_\ell j_\ell(kr) + B_\ell n_\ell(kr) \quad ,$$

con

$$j_\ell(kr) = \left(-\frac{r}{k}\right)^\ell \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\right)^\ell \left(\frac{\sin kr}{kr}\right)$$

y

$$n_\ell(kr) = \left(-\frac{r}{k}\right)^\ell \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}\right)^\ell \left(-\frac{\cos kr}{kr}\right) \quad .$$

6.4. 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

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r > a \\ 0 & r \leq a \end{cases} \quad .$$

La solución para una energía $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$, momento angular ℓ y proyección m fija, es

$$\Psi_{k\ell m}(\vec{r}) = j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad r \leq a \quad .$$

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 $r = 0$).

Cuadro 6.1: Ceros de las funciones de Bessel esféricas $j_\ell(x)$.

n	ℓ	$X_{n\ell}$	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

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

$$j_\ell(ka) = 0 . \quad (6.8)$$

Esta ecuación nos da los niveles discretos de energía (para un ℓ dado). En efecto, sean $X_{n,\ell}$, $n = 1, 2, \dots$, las raíces de $j_\ell(x)$, entonces (6.8) implica que k no puede tomar cualquier valor, sino que sólo los valores

$$k = k_{n\ell} = \frac{X_{n\ell}}{a} .$$

Consecuentemente, la energía sólo puede tomar los valores

$$E = E_{n\ell} = \frac{\hbar^2}{2\mu} \cdot \frac{X_{n\ell}^2}{a^2} .$$

Los ceros de las funciones de Bessel con distintos valores de ℓ 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 $2\ell + 1$.

La tabla 6.1 da los ceros de las funciones de Bessel en orden creciente.

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

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

$$\Psi_{100}(\vec{r}) = A j_0(kr) Y_{00}(\theta, \phi) = \frac{\bar{A}}{r} \sin\left(\frac{\pi r}{a}\right) .$$

6.4.1. Inclusión de un carozo.

Consideremos ahora el mismo problema, pero agregándole un carozo (núcleo) repulsivo al centro, es decir, consideremos una partícula de masa μ 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 ℓ y proyección m fijos. Para $b \leq r \leq a$, la partícula es libre y la solución general de la ecuación de Schrödinger es

$$\Psi_{k\ell m}(\vec{r}) = (j_\ell(kr) + \alpha n_\ell(kr)) Y_{\ell m}(\theta, \phi) . \quad (6.9)$$

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 (6.9) es válida.

Para $r = b$ y $r = a$ la solución (6.9) debe anularse, o sea,

$$\Psi_{k\ell m}(r = a, \theta, \phi) = \Psi_{k\ell m}(r = b, \theta, \phi) = 0 \quad \forall \theta, \phi .$$

Usando (6.9) se deduce que debe cumplirse

$$j_\ell(ka) + \alpha n_\ell(ka) = 0$$

y

$$j_\ell(kb) + \alpha n_\ell(kb) = 0 .$$

Eliminando α 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

$$\sin(ka) \cos(kb) - \sin(kb) \cos(ka) = 0 ,$$

o sea,

$$\sin(k(a - b)) = 0 .$$

Los valores de k posibles (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 α podemos también escribir la función de onda del estado fundamental; ésta resulta ser:

$$\Psi_{100}(\vec{r}) = \bar{A} \left(\frac{a-b}{\pi r} \right) \left[\sin \left(\frac{\pi r}{a-b} \right) - \tan \left(\frac{\pi a}{a-b} \right) \cos \left(\frac{\pi r}{a-b} \right) \right],$$

donde \bar{A} es una constante de normalización.

6.5. 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:

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

$$\begin{aligned}
& z \frac{d^2}{dz^2} {}_1F_1(a, c; z) + c \frac{d}{dz} {}_1F_1(a, c; z) - z \frac{d}{dz} {}_1F_1(a, c; z) - a {}_1F_1 = \\
&= \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{z^{n-1}}{(n-2)!} [a, c, n-1] - \frac{cz^{n-1}}{(n-1)!} [a, c, n-1] \right) + \\
&+ (-1) \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{z^n n}{n!} [a, c, n-1] + a \frac{z^n}{n!} [a, c, n-1] \right) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{z^n}{(n-1)!} [a, c, n] + \frac{cz^n}{n!} [a, c, n] - \frac{z^n n}{n!} [a, c, n-1] + \right. \\
&\quad \left. + (-1) \frac{az^n}{n!} [a, c, n-1] \right) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{n!} [a, c, n-1] \left\{ n \frac{a+n}{c+n} + c \frac{a+n}{c+n} - n - a \right\} = 0 ,
\end{aligned}$$

o sea, la función

$$\phi_1(z) = {}_1F_1(a, c; z)$$

es una solución particular de la ecuación

$$z \frac{d^2 \phi}{dz^2} + (c-z) \frac{d\phi}{dz} - a\phi = 0 . \quad (6.10)$$

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 :

$${}_1F_1(-n, c; z) = \text{polinomio de grado } n \text{ si } n \in \mathbb{N} .$$

6.6. 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

$$\left[2\frac{d}{dz} + 4z\frac{d^2}{dz^2} - z - \frac{\ell(\ell+1)}{z} + 2\epsilon \right] \tilde{u}(z) = 0 . \quad (6.11)$$

Para $z \rightarrow \infty$, esta ecuación toma la forma

$$\left(4\frac{d^2}{dz^2} - 1 \right) \tilde{u}(z) = 0 .$$

Las soluciones de esta ecuación son $\exp(-z/2)$ y $\exp(z/2)$. De estas dos soluciones sólo la primera es físicamente aceptable (ya que para $r \rightarrow \infty$, es decir, $z \rightarrow \infty$, la función de onda debe tender a cero). De la discusión anterior se desprende que la solución (6.11) satisface:

$$\tilde{u}(z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} e^{-\frac{z}{2}} .$$

Para $z \rightarrow 0$ la ecuación (6.11) toma la forma

$$\left[2\frac{d}{dz} + 4z\frac{d^2}{dz^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{z} \right] \tilde{u}(z) = 0 .$$

Planteando una solución del tipo z^s se obtiene que s debe satisfacer la ecuación

$$2s + 4s(s-1) - \ell(\ell+1) = 0 ,$$

o sea,

$$4s^2 - 2s = \ell(\ell + 1).$$

De las dos soluciones de esta ecuación:

$$s = \frac{1}{4} \left(1 \pm \sqrt{1 + 4\ell(\ell + 1)} \right) = \frac{1}{4} (1 \pm (2\ell + 1)) ,$$

sólo la con el signo positivo es aceptable, ya que para $r \rightarrow 0$ la solución $\tilde{u}(z)$ debe anularse. Por lo tanto, cerca del origen, la solución de (6.11) tiene la forma

$$\tilde{u}(z) \xrightarrow{z \rightarrow 0} z^s ,$$

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

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dz^2} u(z) &= \left[\left(-\frac{1}{2} + \frac{s}{z} \right) e^{-\frac{z}{2}} z^s \left(\left(-\frac{1}{2} + \frac{s}{z} \right) w(z) + w'(z) \right) + \right. \\ &\quad \left. + e^{-\frac{z}{2}} z^s \left(-\frac{1}{2} w' - \frac{s}{z^2} w + \frac{s}{z} w' + w'' \right) \right] \\ &= e^{-\frac{z}{2}} z^s \left[\left(-\frac{1}{2} + \frac{s}{z} \right) \left(\left(-\frac{1}{2} + \frac{s}{z} \right) w + w' \right) - \frac{1}{2} w' - \frac{s}{z^2} w + \frac{s}{z} w' + w'' \right] . \end{aligned}$$

Con estas expresiones se obtiene, después de alguna álgebra, la ecuación diferencial que cumple $w(z)$:

$$\left[z \frac{d^2}{dz^2} + \left(2s + \frac{1}{2} - z \right) \frac{d}{dz} + n \right] w(z) = 0 , \quad (6.12)$$

con

$$n \equiv \frac{\epsilon}{2} - s - \frac{1}{4} .$$

La ecuación (6.12) es la ecuación hipergeométrica confluyente. La solución regular en el origen es

$$w(z) = {}_1F_1 \left(-n, 2s + \frac{1}{2}; z \right) .$$

Cuadro 6.2: Oscilador armónico tridimensional.

n	ℓ	Λ	$(n+1)\ell$ 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		

Ejercicio:

Demuestre que para que se tenga $u(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$, la función hipergeométrica ${}_1F_1(-n, 2s + \frac{1}{2}; z)$ debe ser un polinomio, es decir, la serie debe terminar. Esto sólo ocurre si n es un entero no negativo.

Del último ejercicio 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 $\Lambda = 2n + \ell$, con $\Lambda = 0, 1, 2, \dots$. Λ se denomina *número cuántico principal*:

$$E_{n\ell} = E_{\Lambda} = \hbar\omega\left(\Lambda + \frac{3}{2}\right) .$$

La tabla 6.2 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 Λ 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_{Λ} 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 Λ).

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 ℓ corresponde a una situación excepcional, que se da sólo con muy pocos potenciales centrales $V(r)$ (otro caso especial es el potencial coulombiano $V(r) = \alpha/r$).

Esta degeneración en energía entre estados con distintos valores de ℓ 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 R^3 , 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:

$$\begin{aligned} \text{Estado 1s} \quad \langle \vec{r} | 100 \rangle &= \frac{2}{\sqrt[4]{\pi}} \exp(-\xi^2/2) \\ \text{Estado 1p} \quad \langle \vec{r} | 11m \rangle &= \sqrt{\frac{8}{3\sqrt{\pi}}} \xi \exp(-\xi^2/2) Y_{1m}(\theta, \phi) \\ \text{Estado 1d} \quad \langle \vec{r} | 12m \rangle &= \frac{4}{\sqrt{15\sqrt{\pi}}} \xi^2 \exp(-\xi^2/2) Y_{2m}(\theta, \phi) \\ \text{Estado 2s} \quad \langle \vec{r} | 200 \rangle &= \sqrt{\frac{8}{3\sqrt{\pi}}} \left(\xi^2 - \frac{3}{2} \right) \exp(-\xi^2/2) \end{aligned}$$

6.6.1. Operadores de subida y bajada.

Recordando los desarrollos del oscilador armónico unidimensional introduzcamos operadores de *subida* y *bajada* definidos por:

$$\check{\mathbf{a}}_j \equiv \frac{1}{\sqrt{2\mu\hbar\omega}} (\mu\omega\check{\mathbf{r}}_j + i\check{\mathbf{p}}_j) \quad , \quad j = x, y, z$$

y

$$\check{\mathbf{a}}_j^\dagger = \check{\mathbf{b}}_j = \frac{1}{\sqrt{2\mu\hbar\omega}} (\mu\omega\check{\mathbf{r}}_j - i\check{\mathbf{p}}_j) \quad .$$

Los conmutadores de estos operadores con el Hamiltoniano son

$$[\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{a}}_j] = -\hbar\omega\check{\mathbf{a}}_j$$

y

$$[\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{b}}_j] = \hbar\omega\check{\mathbf{b}}_j \quad .$$

Ejercicio: 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 $E + \hbar\omega$.

De esta manera, tenemos tres operadores de subida y tres operadores de bajada.

Definamos ahora el operador $\check{\mathbf{a}} = (\check{\mathbf{a}}_1, \check{\mathbf{a}}_2, \check{\mathbf{a}}_3)$ y $\check{\mathbf{b}} = \check{\mathbf{a}}^\dagger$. Estos operadores son operadores vectoriales respecto a $\check{\mathbf{L}}$ (demuéstrelo como ejercicio), es decir, cumplen las siguientes reglas de conmutación:

$$[\check{\mathbf{a}}_j, \check{\mathbf{L}}_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}\check{\mathbf{a}}_l$$

y

$$[\check{\mathbf{b}}_j, \check{\mathbf{L}}_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}\check{\mathbf{b}}_l \quad .$$

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 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, $[\check{\mathbf{L}}_j, \check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}}] = \mathbf{0}$ 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

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{L}}^2\check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}}|\Lambda\ell m\rangle &= \check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}}\check{\mathbf{L}}^2|\Lambda\ell m\rangle \\ &= \check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}}\hbar^2\ell(\ell + 1)|\Lambda\ell m\rangle \\ &= \hbar^2\ell(\ell + 1) \left(\check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}}|\Lambda\ell m\rangle \right) , \end{aligned}$$

o sea, $\check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}}|\Lambda\ell m\rangle$ 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 $\check{\mathbf{H}} \left(\check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}}|\Lambda\ell m\rangle \right)$. 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

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{H}} \left(\check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}}|\Lambda\ell m\rangle \right) &= \left(\check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}}\check{\mathbf{H}} + 2\hbar\omega \check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}} \right) |\Lambda\ell m\rangle \\ &= \hbar\omega \left(\Lambda + 2 + \frac{3}{2} \right) \left(\check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}}|\Lambda\ell m\rangle \right) , \end{aligned}$$

o sea, $(\check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}}|\Lambda\ell\mathbf{m}\rangle)$ es autovector de $\check{\mathbf{H}}$ con autovalor $\hbar\omega(\Lambda + 2 + 3/2)$. Con esto queda demostrada la proposición.

Definamos ahora los operadores

$$\check{\mathbf{a}}_+ = \check{\mathbf{a}}_x + i\check{\mathbf{a}}_y$$

y

$$\check{\mathbf{b}}_+ = \check{\mathbf{b}}_x + i\check{\mathbf{b}}_y .$$

Proposición 2:

$$\check{\mathbf{b}}_+|\Lambda\ell\ell\rangle \propto |\Lambda + 1, \ell + 1, \ell + 1\rangle .$$

y

$$\check{\mathbf{a}}_+|\Lambda\ell\ell\rangle \propto |\Lambda - 1, \ell + 1, \ell + 1\rangle .$$

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

$$[\check{\mathbf{H}}, \check{\mathbf{b}}_+] = \hbar\omega\check{\mathbf{b}}_+$$

(demuéstrello como ejercicio). Luego

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{H}}\check{\mathbf{b}}_+|\Lambda\ell\ell\rangle &= (\check{\mathbf{b}}_+\check{\mathbf{H}} + \hbar\omega\check{\mathbf{b}}_+)|\Lambda\ell\ell\rangle \\ &= \hbar\omega(\Lambda + 1 + \frac{3}{2})\check{\mathbf{b}}_+|\Lambda\ell\ell\rangle , \end{aligned}$$

o sea, $(\check{\mathbf{b}}_+|\Lambda\ell\ell\rangle)$ es autovector de $\check{\mathbf{H}}$ con autovalor $\hbar\omega(\Lambda + 1 + 3/2)$. Con esto queda demostrada la proposición.

Proposición 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). Luego $\check{\mathbf{a}}_+\check{\mathbf{b}}_+|\Lambda\ell\ell\rangle$ es autovector de $\check{\mathbf{H}}$ con el autovalor $\hbar\omega(\Lambda + 3/2)$. Usando la proposición 2 se encuentra que $\check{\mathbf{a}}_+\check{\mathbf{b}}_+|\Lambda\ell\ell\rangle$ 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 4:

$$\check{\mathbf{L}}_- |\Lambda \ell m\rangle \propto |\Lambda, \ell, m-1\rangle .$$

Usando las proposiciones 1–4 se demuestra ahora fácilmente que:

$$(\check{\mathbf{L}}_-)^{\ell-m} \check{\mathbf{b}}_+^\ell (\check{\mathbf{b}} \cdot \check{\mathbf{b}})^{\frac{\Lambda-\ell}{2}} |000\rangle \propto |\Lambda \ell m\rangle . \quad (6.13)$$

Acá $(\Lambda - \ell)/2$ debe ser entero no negativo. Si Λ es par entonces $\ell = 0, 2, 4, \dots, \Lambda$, y si Λ 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 (6.13) representa la forma más general posible de un autoestado de $\check{\mathbf{H}}$.

Ejercicio: Demuestre que

$$(\check{\mathbf{L}}_-)^{\ell+2-m} \check{\mathbf{a}}_+ \check{\mathbf{b}}_+ |\Lambda \ell \ell\rangle \propto |\Lambda, \ell + 2, m\rangle .$$

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 como ejercicio 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 $(\lambda_{ij}, \tau_{ij} \in R)$ 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.

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).

Figura 6.3: Potencial coulombiano atractivo.

6.7. El átomo de hidrógeno.

En esta sección consideraremos el problema de una partícula de masa μ ligada por un potencial de la forma (ver figura 6.3)

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} .$$

Deseamos encontrar los estados ligados, o sea, los estados estacionarios con energía $E < 0$.

Definamos $\gamma > 0$ a través de

$$E = -\frac{\hbar^2\gamma^2}{2\mu} . \quad (6.14)$$

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

$$n \equiv \frac{\mu Ze^2}{\gamma\hbar^2} . \quad (6.15)$$

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 α

$$\alpha(\alpha-1) - \ell(\ell+1) = 0 ,$$

o sea,

$$\alpha_1 = -\ell$$

y

$$\alpha_2 = \ell + 1 .$$

Como $u(r)$ debe ser regular en el origen, el primer valor de α 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

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u}{dr^2} = & r^{\ell+1} e^{-\gamma r} \left[\left(\frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2(\ell+1)}{r} \gamma + \gamma^2 \right) f + \right. \\ & \left. + 2 \left(\frac{\ell+1}{r} - \gamma \right) f' + f'' \right] . \end{aligned}$$

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:

$$\left[\rho \frac{d^2}{d\rho^2} + (2\ell + 2 - \rho) \frac{d}{d\rho} - (\ell + 1 - n) \right] \bar{f}(\rho) = 0 .$$

Cuadro 6.3: Niveles de energía del átomo de hidrógeno.

n	n_r	ℓ	$(n\ell)$ 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	1p	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	16	+	
	2	1	4p	1/16			-	
	1	2	4d	1/16			5	+
	0	3	4f	1/16			7	-

Esta 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 $-(\ell + 1 - n)$ debe ser un entero no negativo, o sea

$$n_r = n - \ell - 1 \quad , \quad \text{con } n_r = 0, 1, 2, \dots .$$

De esta relación se deduce que

$$n = n_r + \ell + 1 \quad ,$$

o sea, 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 (6.14) y (6.15)) 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 es la constante de Rydberg.

Note que para un mismo valor de n , el número cuántico ℓ 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 ℓ , es una consecuencia de las simetrías especiales que posee este particular sistema (ver discusión que se presenta en la subsección siguiente).

La tabla 6.3 muestra las energías, degeneración, paridad y los números cuánticos de los distintos autoestados del átomo de hidrógeno.

Para el estado con números cuánticos n, ℓ, 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,

$$\begin{aligned} \Psi_{100}(r, \theta, \phi) &= C_{10} e^{-\gamma r} {}_1F_1(0, 2; 2\gamma r) Y_{00} = \frac{C_{10} e^{-\gamma r}}{\sqrt{4\pi}} \\ &= \sqrt{\frac{\gamma^3}{\pi}} e^{-\gamma r} , \end{aligned} \quad (6.16)$$

con

$$\gamma = \frac{\mu Z e^2}{\hbar^2} = \frac{Z}{a_0} .$$

Aquí a_0 es el radio de Bohr. Sustituyendo γ en (6.16) se obtiene

$$\Psi_{100}(\vec{r}) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/4} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{Zr}{a_0}\right) .$$

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 γ 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 $\langle r \rangle$ para el estado fundamental. Se tiene:

$$\begin{aligned} \langle r \rangle &= \int d^3r |\Psi_{100}(\vec{r})|^2 r \\ &= \left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \frac{1}{\pi} 4\pi \int_0^\infty dr r^3 \exp\left(-\frac{2Zr}{a_0}\right) = \frac{3a_0}{2Z} . \end{aligned}$$

Figura 6.4: (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).

6.7.1. Degeneración accidental del átomo de hidrógeno.

Escribamos el Hamiltoniano del átomo de hidrógeno en la forma

$$\check{H} = \frac{\check{p}^2}{2\mu} + \check{V}(r)$$

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 6.4. 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

$$[\check{H}, \check{M}_j] = 0 \quad , \quad j = x, y, z \quad ,$$

luego, el operador \check{M} también es una constante de movimiento cuántica.

Transformemos el operador \check{M} usando el operador unitario de las rotaciones. Tenemos

$$\begin{aligned} e^{i\vec{\phi} \cdot \check{L}/\hbar} \check{M}(\check{L}, \check{p}, \check{r}) e^{-i\vec{\phi} \cdot \check{L}/\hbar} &= \check{M}(\mathbf{R}_{\vec{\phi}} \check{L}, \mathbf{R}_{\vec{\phi}} \check{p}, \mathbf{R}_{\vec{\phi}} \check{r}) \\ &= \frac{1}{2\mu} \left[\mathbf{R}_{\vec{\phi}} \check{L} \times \mathbf{R}_{\vec{\phi}} \check{p} - \mathbf{R}_{\vec{\phi}} \check{p} \times \mathbf{R}_{\vec{\phi}} \check{L} \right] + \frac{R_{\vec{\phi}} \check{r}}{|\mathbf{R}_{\vec{\phi}} r|} = \mathbf{R}_{\vec{\phi}} \check{M} . \end{aligned} \quad (6.17)$$

Acá $R_{\vec{\phi}} = R(\vec{\phi})$ es el operador de rotación en R^3 . La ecuación (6.17) demuestra que $\vec{\mathbf{M}}$ es un operador vectorial.

Ejercicio: Demuestre que $[\check{\mathbf{M}}_i, \check{\mathbf{L}}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\check{\mathbf{M}}_k$.

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 $\vec{\mathbf{M}}$ un operador vectorial, se tiene que

$$(\check{\mathbf{M}}_{+})^{\ell} |n00\rangle = C_{\ell} |n\ell\ell\rangle .$$

(C_{ℓ} 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 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 $\{\check{U}(\vec{\phi}, \vec{\theta})|\Psi_E\rangle ; (\vec{\phi}, \vec{\theta}) \in R^6\}$, será degenerado con $|\Psi_E\rangle$.