

Mecánica Cuántica

Apuntes de Clases



Hugo F. Arellano
Departamento de Física - FCFM
Universidad de Chile

Status 02 julio 2015

Avance 02-jul-2015

Índice general

1. Introducción	13
1.1. La constante de Planck	13
1.2. Constantes fundamentales y escalas	16
2. Albores de la mecánica cuántica	21
2.1. Radiación de cuerpo negro (Plank - 1900)	22
2.2. Efecto fotoeléctrico (Einstein - 1905)	25
2.3. El átomo de hidrógenoHidrógeno!átomo (Bohr - 1913)	28
2.4. El efecto Compton (Compton - 1923)	31
3. Mecánica ondulatoria	35
3.1. Comportamiento <i>dual</i> de la luz	35
3.2. La hipótesis de de Broglie	36
3.3. Consecuencias de la hipótesis de de Broglie	37
3.4. La ecuación de ondas de Schrödinger	40
3.5. Interpretación física de la función de onda	43

3.6. La norma de la función de ondas	44
3.7. La <i>función</i> delta de Dirac	46
3.8. La función de onda en espacio de momentum	48
3.9. Valores de expectación	50
3.10. La ecuación de Schrödinger en espacio de momentum	54
3.11. La ecuación de Schrödinger para un sistema binario	56
4. Aplicaciones unidimensionales	59
4.1. Condiciones sobre la función de onda	60
4.2. Propiedades de soluciones en sistemas unidimensionales	62
4.3. Potencial de alcance nulo: ' <i>zero-range potential</i> '	66
4.4. Pozo finito 1D	69
4.5. Pozo finito en 3D	73
4.6. Efecto túnel	74
4.7. El oscilador armónico	78
4.7.1. Cota para la energía del estado fundamental	79
4.7.2. Espectro del oscilador y los polinomios de Hermite	80
5. Formalismo	85
5.1. Espacios vectoriales	85
5.2. Notación de Dirac: bras y kets	89

5.3. Autovalores y autovectores	94
5.4. Representaciones	95
5.5. Representación de operadores	98
5.6. La ecuación de Schrödinger revisitada	100
5.7. El oscilador armónico en representación de energía	101
5.8. Evolución temporal, translaciones y 'boosts'	108
5.9. Cuadros de Schrödinger y Heisenberg	110
5.10. Principios de la mecánica cuántica	112
5.11. Relaciones generales de incerteza	116
5.12. Observables compatibles	118
5.13. Límites clásicos de la mecánica cuántica	119
5.13.1. El teorema de Ehrenfest	120
5.13.2. Las ecuaciones de Hamilton-Jacobi	121
6. Aplicaciones menos elementales	125
6.1. Sistema cuántico de dos niveles	125
6.2. Spin y momento magnético	127
6.2.1. Electrones bajo el efecto de un campo magnético	127
6.2.2. Razón giromagnética y magnetones	129
6.2.3. El momentum angular del electrón	131
6.2.4. Electrones sometidos a un campo magnético	132

6.2.5.	Respuesta clásica de dipolo a campo externo	138
6.3.	Momentum angular	140
6.3.1.	Momentum angular orbital	140
6.3.2.	Isospín	140
6.3.3.	Algebra	142
6.3.4.	Diagonalización de $\hat{\mathbf{J}}^2$ y \hat{J}_z	143
6.3.5.	Elementos de matriz de $\hat{\mathbf{J}}$	145
6.3.6.	Representaciones en espacio de coordenadas	147
6.3.7.	Los esféricos armónicos	148
6.4.	El átomo de hidrógeno	152
6.4.1.	Observables compatibles (rótulos)	153
6.4.2.	Función de onda	153
6.4.3.	Degeneración	155
6.5.	Niveles de Landau	157
6.5.1.	Consideraciones generales	157
6.5.2.	Solución algebraica	160
6.5.3.	Solución en espacio de coordenadas	161
6.6.	Acoplamiento del momentum angular	163
6.7.	Interpretación geométrica del momentum angular	171
6.8.	Métodos variacionales	173

6.8.1. Oscilador armónico 3D	174
6.8.2. Atomo de helio	175
6.9. El principio de exclusión de Pauli	178
6.10. Modelo de gas de Fermi	183
A. Unidades	187
A.1. Alfabeto griego	188
A.2. Prefijos del <i>Sistema Internacional</i>	189
B. Integrales definidas	191
B.1. Evaluación de $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2-ibx} dx$	191
B.2. Evaluación de $\int_{-\infty}^{\infty} e^{ix^2} dx$	192
B.3. Evaluación de $\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx}/(k^2 + b^2)$	193
C. Identidades matemáticas	195
C.1. Integrales indefinidas recurrentes	195
C.2. Integrales definidas recurrentes	196
C.3. Símbolo de Levi-Civita	196
C.4. Identidades vectoriales	197
C.5. Identidades diferenciales	197
C.6. Coordenadas cartesianas: $(x, y, z) \rightarrow (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$	198
C.7. Coordenadas cilíndricas: $(\rho, \phi, z) \rightarrow (\hat{\rho}, \hat{\phi}, \hat{z})$	198

C.8. Coordenadas esféricas: $(r, \theta, \phi) \rightarrow (\hat{r}, \hat{\theta}, \hat{\phi})$	199
D. Funciones especiales	201
D.1. Polinomios de Legendre	201
D.2. Funciones asociadas de Legendre	202
D.3. Funciones esféricas de Bessel	203
D.4. Funciones esféricas armónicas	205
Indice de autores	208
Indice de materias	209

*El pájaro rompe el cascarón.
El huevo es el mundo.
El que quiera nacer, tiene que romper un mundo.
El pájaro vuela hacia dios, el dios se llama Abraxas.*

Herman Hesse

Pre-texto

Estos apuntes surgen de una transcripción del primer manuscrito de cátedras del curso *Mecánica Cuántica*, que dicté el año 2004 en la Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas de la Universidad de Chile. Con el tiempo los contenidos de estas notas han ido evolucionando cuidando siempre de ajustarme a la motivación original que me llevó a escribirlos: que sirvan de material complementario –entiéndase de revisión– de temas discutidos en clases. Mantienen por tanto un buen grado de informalidad en su presentación, careciendo de desarrollos *in extenso* de ideas y explicaciones que comunmente se dan en clases.

La Mecánica Cuántica es una teoría física tan misteriosa como fascinante que hace una lenta y controvertida aparición a comienzos del siglo XX. Muchos de los supuestos que se introducen para explicar fenómenos de la física atómica y subatómica rompieron con lo establecido llevando a interpretaciones sumamente contra-intuitivas. La génesis de la *Mecánica Cuántica* respondió a la necesidad de entender fenómenos completamente inexplicables en el marco de las teorías vigentes: la mecánica newtoniana, la termodinámica y el electromagnetismo. Con el transcurrir de los años muchos de los nuevos conceptos introducidos en el contexto de la mecánica cuántica han expandido las fronteras del conocimiento a límites inimaginables. Muchos de los avances tecnológicos osados del siglo XX se sustentan en conocimientos en el marco de la física cuántica. Inventos y tecnologías asociadas a ella nos han transportado increíblemente más lejos que los más audaces cuentos de ciencia ficción. Tal es el caso de la tecnología informática y de telecomunicaciones, donde el manejo y control de la física a escalas pequeñas ha sido fundamental.

El tema de la mecánica cuántica es sumamente extenso y diverso, tanto en sus enfoques (filosófico, formal o aplicado) como de nivel (básico vs avanzado). En esa línea hay una gran diversidad de textos de muy buena calidad donde encontrar desarrollos y discusiones interesantes, además de buenos problemas de ejercitación. Es usual que el hojear libros sobre el tema casi siempre resulte en nuevas ideas o formas de visualizar conceptos. Por lo tanto es muy recomendable contar con un par de textos adicionales para de estudio. Lo mejor en este caso es ir a la biblioteca y buscar referencias de cabecera que mejor se acomode al estudiante.

El sentido de escribir estas notas es más bien registrar el énfasis de algunos aspectos a discutir en clases y de como ellos se estructuran hacia los temas más avanzados. Es la impronta que uno le da a sus clases. Durante el desarrollo de los temas he ido incluyendo ejercicios en los cuales se ilustran algunos ejemplos o se demuestran algunas propiedades sobre las cuales es recomendable contar con algún dominio. Si bien algunos de estos ejercicios cuentan con soluciones, aconsejo resolver estos problemas antes de leer sus soluciones (*Lectura Activa*). Esta es una buena práctica para compenetrarse en la temática.

Este manuscrito se divide en seis capítulos y una colección de apéndices. El Cap. 1 es de carácter introductorio, donde se presenta la constante de Planck y discute cómo utilizarla para inferir si un determinado fenómeno físico requiere de la mecánica cuántica para su descripción. Se esboza además el manejo de unidades y estimaciones. El Cap. 2 se dedica a una breve revisión de fenómenos que evidencian las limitaciones de la mecánica clásica, de los cuales surgen conceptos no convencionales para su interpretación. En el Cap. 3 se presenta la mecánica ondulatoria, vale decir la formulación introducida por Erwin Schrödinger para descripción de sistemas semejantes a los sistemas clásicos. El Cap. 4 se centra al estudio de sistemas unidimensionales en el contexto de la ecuación de Schrödinger. En el Cap. 5 se revisan elementos de espacios vectoriales, se introduce la notación de Dirac y se presenta una reformulación de la mecánica cuántica. Se formulan y discuten los principios de la mecánica cuántica, además de otros aspectos como observables, mediciones, compatibilidad de observables, etc. El Cap. 6 se destina a aplicaciones más avanzadas, partiendo por spin y momentum angular, el comportamiento de partículas cargadas bajo campos electromagnéticos, métodos variacionales y partículas idénticas. Se agrega a lo anterior una serie de apéndices donde se resumen herramientas matemáticas necesarias para el estudio de las materias del curso.

Hugo F. Arellano
Santiago, mayo de 2015

Capítulo 1

Introducción

1.1. La constante de Planck

Entre las constantes fundamentales de la física podemos citar la velocidad de la luz c , la constante de gravitación universal G , la carga del electrón e y la constante de Planck h . Esta última fué introducida por Max Planck en el año 1900 para dar cuenta del comportamiento espectral de la radiación de cuerpo negro. Retrospectivamente, la constante de Planck es determinante para describir cuantitativamente fenómenos a escalas muy pequeñas. Esta afirmación es vaga en el sentido que las escalas macroscópicas humanas bien pudieran entenderse como ‘pequeñas’ al ser comparadas con distancias intergalácticas. En realidad se trata de comparaciones de la *acción* de un sistema físico en relación a la acción fundamental, dada por la constante de Planck. El valor aceptado de esta constante es

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J s}$$

$$\hbar = h/2\pi = 1.055 \times 10^{-34} \text{ J s} .$$

A esta última se le denomina *constante reducida de Planck*. Dimensionalmente, $[\hbar] = \text{ML}^2/\text{T}$.

Con esta escala, la ‘pequeñez’ de un sistema físico se puede establecer comparando la constante de Planck con una estimación de la acción de éste, construida a partir de magnitudes que lo caractericen. Recordar que la acción S de un sistema mecánico para una partícula está dada por $S = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}) dt$, donde L es el lagrangiano. Como regla, si tal acción resulta comparable con \hbar entonces el sistema es inherentemente cuántico. A la inversa, si la acción resulta varios ordenes de magnitud mayor que \hbar , entonces el sistema es clásico y lo podremos describir satisfactoriamente mediante las leyes de la mecánica clásica.

Para ilustrar el punto anterior consideremos una partícula de masa m en caída libre vertical ante la gravedad terrestre g . La partícula parte del reposo y cae una altura H .

La solución a este problema, desde el punto de vista clásico, surge de minimizar la acción $S = \int_0^{t_f} (T - V) dt$. La energía cinética está dada por $T = \frac{1}{2} m \dot{x}^2$, mientras que la potencial por $V = mgx$, con x la coordenada vertical. Al extremar la acción surge la trayectoria clásica, conducente a las soluciones ya conocidas $\dot{x} = v(t) = -gt$; $y(t) = H - gt^2/2$. Reemplazando estos términos en la expresión para la acción obtenemos $S = -\sqrt{2} \sqrt{H^3 m^2 g}$. Como vemos, la acción es del orden $S \sim \sqrt{H^3 m^2 g}$, la que se habría obtenido bajo análisis dimensional. Examinemos dos situaciones de caída libre por gravedad.

- *Una manzana.* Consideremos la caída de una manzana (0.1 kg) desde una altura de 1 m. Sustituyendo valores obtenemos $S \approx 0,3$ J s, 35 órdenes de magnitud por sobre \hbar . Esto indica que la caída de una manzana es un fenómeno eminentemente clásico el cual podemos describir satisfactoriamente haciendo uso de las leyes de la mecánica clásica.
- *Un electrón.* Nos preguntamos en este caso a qué escalas la caída libre de un electrón manifiesta comportamiento cuántico. En particular nos preguntamos por H tal que la acción sea comparable con la constante de Planck, $\sqrt{H^3 m^2 g} \approx \hbar$, con m la masa de un electrón. Sustituyendo $m = 9 \times 10^{-31}$ kg, obtenemos $H \approx 1$ mm. Esto significa que la caída de un electrón por efecto de la gravedad terrestre expresa su comportamiento cuántico a escalas de 1 mm. Esta es una distancia sorprendentemente grande, lo que es consecuencia de lo débil que es la fuerza de gravedad. Para revisar la sensatez de este resultado es interesante estimar la temperatura que implican velocidades a estas escalas. Recordemos que la energía cinética media y la temperatura se relacionan mediante $3k_B T/2 = \frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle$, donde k_B es la constante de Boltzmann ($k_B = 1,3806488 \times 10^{-23}$ m²kg/s²K). Estimando $\langle v^2 \rangle \approx 2gH$ inferimos la temperatura, $T \approx 5 \times 10^{-9}$ K, una temperatura extremadamente baja. En el año 2010 se reportan temperaturas del orden de nK, obtenidos en Aalto University en Finlandia¹.

Ejercicio 1.1 Estime la acción para un electrón en caída libre de 1 mm, cuando su velocidad inicial es comparable a la rapidez media de electrones a una temperatura de 0 C.

Examinemos otros ejemplos en los cuales dirimimos si los fenómenos a describir requieren de la mecánica cuántica. En ellos estimaremos una acción a partir de análisis dimensional y la comparamos con la constante de Planck. Los ejemplos que siguen han sido tomados del libro J.-M. Levi Leblond.²

¹<http://lounasmaalab.aalto.fi/en/>

²Jean-Marc Levi Leblond y Françoise Bilibar, *Quantics: Rudiments of Quantum Mechanics*, North-Holland, New York (1990).

Reloj mecánico. El tamaño de su mecanismo es milimétrico, vale decir es del orden de 10^{-3} m; su masa es de unos gramos, vale decir 10^{-3} kg; sus lapsos característicos del orden de 1 s. Construimos una acción S combinando adecuadamente estas magnitudes. Claramente $S = \text{masa} \times \text{tamaño}^2 / \text{lapso} \approx 10^{-9} \text{ J s} = 10^{25} \hbar \gg \hbar$. Notamos que S es varios ordenes de magnitud mayor que \hbar , lo que nos indica que el sistema mecánico de un reloj es indiscutiblemente clásico. En otras palabras, podemos prescindir totalmente de la mecánica cuántica para describirlo.

Circuito oscilante. Estimamos su capacitancia $C \approx 10^{-10}$ F, su inductancia $L \approx 10^{-4}$ H y corriente $I \approx 10^{-3}$ A. Notamos que $LI^2 \sim \text{energía} \rightarrow 10^{-10}$ J, y que $\sqrt{LC} \sim \text{tiempo} \rightarrow 10^{-7}$ s. Así, $S \sim LI^2 \times \sqrt{LC} \approx 10^{-17} \text{ J s} = 10^{17} \hbar \gg \hbar$. Nuevamente estamos frente a un fenómeno clásico.

Antena de radio. Estimamos su potencia P en 1 kW y su frecuencia de emisión f en 1 MHz. La combinación de estas cantidades con dimensiones de acción es $S = P/f^2$. Sustituyendo obtenemos $S \sim 10^{-9} \text{ J s} = 10^{25} \hbar \gg \hbar$, vale decir, el sistema es clásico.

Atomo de hidrógeno. La energía del sistema debe ser del orden de la energía potencial de un electrón interactuando con un protón. En unidades SI,

$$U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{R}$$

donde R es del orden de 10^{-10} m. Resulta útil en este caso tener a mano

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \approx 2,3 \times 10^{-28} \text{ J m.}$$

Con ello la energía de ligazón B del sistema debe ser del orden de 2×10^{-18} J. Si suponemos que B , R y m (masa del electrón) definen físicamente el sistema, la combinación $S = R\sqrt{m_e B}$ tiene dimensiones de acción. Sustituyendo valores se obtiene $S \approx 1.4 \hbar$. En este caso la acción es comparable a \hbar , por lo que el sistema está regido por las leyes de la mecánica cuántica.

Estructura cristalina. Consideremos el caso de la sal común (NaCl), consistente en una red cúbica caracterizada por $a = 2.81 \text{ \AA}$, distancia característica de la red. La energía de ligazón B de cada molécula es ~ 8 eV. La masa media M del Na o Cl es del orden de $\sim 5 \times 10^{-26}$ kg. Construimos y evaluamos una acción con estas magnitudes, $S = a\sqrt{MB} \approx 700\hbar \gg \hbar$. Por lo tanto aquellos fenómenos que involucren a los átomos Na-Cl de la red cristalina son esencialmente clásicos. Si intercambiamos las masas de los átomos por la del electrón encontramos $S \sim 2,9 \hbar$, lo que nos aproxima al umbral cuántico. En este límite se está describiendo el comportamiento de los electrones en una red cristalina, uno de los temas de la física del estado sólido.

Núcleo atómico. Al igual que en el ejemplo anterior, podemos construir una acción combinando la masa M de los constituyentes, la energía de ligazón B y el tamaño a del sistema para obtener $S = a\sqrt{MB}$. Si $Mc^2 \approx 1000$ MeV, $B \approx 8$ MeV y $a \approx 3$ fm obtenemos $S \approx 1.4\hbar$, claramente dentro del dominio cuántico.

Helio líquido. El helio toma el estado líquido a temperaturas del orden de, o inferiores a 4 K. En tal estado experimenta comportamientos muy particulares entre los cuales destaca su estado de superfluidez. Nuevamente podemos utilizar $S = a\sqrt{MB}$, con el debido acomodo de las magnitudes involucradas. La masa M del helio es aproximadamente $4m_p$, con $m_p = 1,67 \times 10^{-27}$ kg (masa del protón). La separación aproximada entre los átomos es de 4×10^{-10} m, que se infiere de la densidad del helio líquido (146 kg/m³) y de la masa de sus constituyentes. Estimamos la energía térmica por constituyente en $k_B T$, con $k_B = 1,38 \times 10^{-23}$ J/K. Así, $S \sim 2\hbar$, indicando que se trata de un sistema de comportamiento cuántico.

1.2. Constantes fundamentales y escalas

En el desarrollo de los temas que siguen será muy útil llevar a cabo estimaciones, las que resultan cruciales para discriminar entre contribuciones relevantes e irrelevantes, regímenes accesibles e inaccesibles, etc. Tales consideraciones son de suma importancia para calibrar la sensatez de un modelo físico. Si bien muchas de estas estimaciones pueden ser realizadas dentro del Sistema Internacional de Unidades y Medidas (SI), resulta particularmente práctico el uso del *Sistema Gaussiano*. En estas unidades la energía potencial entre dos cargas interactuantes es $U = q_1 q_2 / r$, con r la distancia relativa entre ellas. Una unidad práctica para representar energías es el *electrónvolt*, simbolizado por eV. Esta corresponde a la energía cinética que experimenta un electrón (o cualquier otra partícula con igual carga eléctrica) cuando es sometido a una diferencia de potencial de 1 volt. De esta forma, un electrón libre entre dos placas metálicas conectadas a una batería de 1,5 V, adquirirá una energía cinética de 1,5 eV.

Las energías atómicas y moleculares están en el rango de los electronvolts. Así por ejemplo, la energía de ionización del átomo de hidrógeno en estado fundamental es de 13,6 eV. Vale decir, si por algún mecanismo físico le hacemos llegar esta energía a un átomo de hidrógeno, lo ionizamos. Hay que tener presente la conservación de momentum lineal, lo que generalmente conduce a que la energía del agente ionizador –un fotón por ejemplo– ha de ser ligeramente superior a la de ionización.

A energías más bajas que las de ionización nos encontramos con toda un área de enormes desarrollos hoy en día: la física del estado sólido y materia condensada. En este caso las energías características caen en el rango de los *mili-electronvolt*, denotado meV.

A escalas nucleares las energías características de los protones o neutrones en el núcleo atómico están en el rango de los *mega-electronvolts* (MeV). Típicamente, el valor medio de la energía de ligazón de los nucleones (término genérico para los protones y neutrones) en el núcleo es de 8 MeV.

El 10 de septiembre de 2008 entró en operación el *Large Hadron Collider* (LHC) ubicado en la frontera franco-suiza. Su perímetro es de aproximadamente 27 km. Con este acelerador se logró (2012) el choque frontal de dos haces de protones, permitiendo energías cercanas a 7 *tera-electronvolts* (TeV), correspondiente a 7×10^{12} eV. La intención es alcanzar los 14 TeV, programado para no antes de 2016. Con este acelerador ha sido posible el descubrimiento del *Boson de Higgs*, cuya masa es del orden de 125 GeV. Esta masa es del orden de 133 veces la masa del protón.

En cuanto a las longitudes, los sistemas más recurrentes a estudiar serán los sistemas a escala atómica y aquellas a escala nuclear. El tamaño de un átomo es del orden de 1 angstrom $= 1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m} = 0.1 \text{ nm}$. Recordar que el prefijo 'n' representa *nano* y corresponde a la potencia 10^{-9} . En el caso del núcleo atómico, su radio está entre 2 y 7 femtometros, donde 1 femtometro $= 1 \text{ fm} = 10^{-15} \text{ m}$. Por razones históricas, es frecuente la denominación *fermi* para referirse al femtometro.

La combinación $\hbar c$ tiene dimensiones de [energía] \times [longitud]. Su valor aproximado,

$$\hbar c \approx 197 \text{ MeV fm} = 197 \text{ eV nm},$$

de modo que al usar $\hbar c \approx 200 \text{ MeV fm}$, incurrimos en un error inferior al 2%. Otra cantidad importante es la constante de estructura fina α , una constante adimensional que en el sistema gaussiano está dada por

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}.$$

En el SI esta misma constante viene dada por

$$\alpha_{SI} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c}.$$

Con las constantes anteriores podemos hacer algunas estimaciones. Por ejemplo, podemos estimar la energía potencial electrostática de dos electrones separados a 1 fm y 0.1 nm, respectivamente. En el sistema gaussiano la energía potencial U viene dada simplemente por $U = e^2/r$. Esta cantidad es reescrita convenientemente a fin de utilizar las cantidades presentadas recientemente. Así, para $r = 1 \text{ fm}$,

$$U = \frac{e^2}{r} = \frac{e^2 \hbar c}{\hbar c r} \rightarrow \frac{1}{137} \frac{200 \text{ MeV fm}}{1 \text{ fm}} \approx 1,5 \text{ MeV}.$$

Esta misma estimación se puede realizar en unidades SI, donde reescribimos

$$U = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c} \frac{\hbar c}{r} \approx \frac{1}{137} \frac{200}{1} \text{ MeV} \approx 1,5 \text{ MeV}.$$

Al usar $r = 0,1 \text{ nm}$ obtenemos $U \sim 15 \text{ eV}$.

En cuanto a las masas de nucleones y electrones, la relación de Einstein $E = mc^2$, permite expresarlas en unidades de energía. De este modo la masa del electrón, $m_e \approx 0,5 \text{ MeV}/c^2$. En el caso de los nucleones, $M_p \approx M_n \approx 940 \text{ MeV}/c^2$. Por simplicidad, es muy usual recurrir a las *unidades naturales*, en las cuales $\hbar = c = 1$. Con este sistema se logra una notable simplificación en la manipulación algebraica de las expresiones. La reconstitución dimensional de los resultados se puede hacer al final, al momento de evaluar las expresiones. En este sistema de unidades la masas pueden darse en unidades de energía o 1/longitud.

Estimemos la rapidez de un electrón cuando tiene una energía cinética de 1 MeV. Puesto que esta energía es comparable con la masa del electrón debemos tratar los efectos relativistas. Denotando $\beta = v/c$, la energía cinética viene dada por

$$K = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \beta^2}} - mc^2,$$

de donde despejamos β

$$\beta^2 = 1 - \frac{1}{(1 + K/mc^2)^2} \approx 1 - \frac{1}{(1 + 1/0,5)^2} = 8/9.$$

Por lo tanto, $v \approx 0,94c$.

Ejercicio 1.2 Considere la colisión frontal de una partícula α (He^{++}) contra un átomo de cobre. Este último cuenta con 29 electrones, por lo que debiera tener 29 protones. Suponga que los electrones se distribuyen uniformemente en una membrana esférica de radio a , del orden $0,5 \text{ \AA}$ ($0,05 \text{ nm}$). Las cargas de los protones se distribuyen uniformemente en una esfera concéntrica de radio $b < a$. Determine y grafique la energía potencial electrostática de una partícula α cuando ésta se encuentra a una distancia r del centro del átomo de Cu. Determine el punto de máxima energía potencial y evalúe (en eV) para los casos $b = a$; $b = a/2$; y $b = a/10$. Al irradiar partículas α con energía cinética de 10 MeV se observa que algunas de ellas rebotan perfectamente. Estime una cota mínima de b para que ello sea posible. Compare el b estimado con la longitud de onda de de Broglie de la partícula α : $\lambda = h/p$.

El carácter ondulatorio de la mecánica cuántica nos lleva recurrentemente a comparaciones entre longitudes de onda, energías asociadas y el tamaño de los sistemas. En relación

al espectro electromagnético es conveniente tener presente los siguientes dominios caracterizados por su longitud de onda:

Dominio	λ
Radio	– 1 m
Microondas	1 m – 1 mm
Infrarojo	1 mm – 750 nm
Visible	750 nm – 400 nm
Ultravioleta	400 nm – 10 nm
Rayos X	10 nm – 10 pm
Rayos γ	10 pm –

Los rayos X son producidos por la colisión violenta de electrones acelerados contra los constituyentes de una placa metálica. Los proyectiles remueven electrones de las capas más bajas de los átomos del metal, produciendo 'huecos', los que son llenados mediante la caída de sus mismos electrones a las capas desocupadas. En este proceso de decaimiento se libera un fotón, de energía igual a la diferencia entre los niveles de energía del electrón. Además de este proceso, el frenado violento de los electrones acelerados también conlleva a la emisión de luz. De acuerdo a las leyes de electromagnetismo, toda carga acelerada emite radiación, fenómeno conocido como *Bremsstrahlung*.

A modo de ilustración estimemos la energía asociada a un fotón cuya longitud de onda es de 10 nm (rayos X blandos). Escribimos,

$$E = h\nu = 2\pi\hbar c/\lambda \approx \frac{2 \times 3 \times 200}{10} \approx 60 \text{ eV}.$$

Esta energía es potencialmente dañina para el cuerpo humano puesto que se trata de energía suficiente como para ionizar átomos en tejidos biológicos. Si la longitud de onda fuese aun más corta, digamos $\lambda \sim 0,01 \text{ nm}$ (rayos X duros), entonces $E \sim 60 \text{ keV}$. Considerando que las longitudes de onda de la radiación UV están entre los 10 nm y 400 nm, las energías asociadas están entre 3 y 60 eV, también dentro del rango de ionización de los átomos. He ahí un factor de riesgo a la salud de la piel cuando es expuesta a radiación UV.

Para cerrar esta divagación expresemos la constante de Planck en unidades convenientes para la física del sólido. Una conversión directa de unidades permite afirmar $\hbar \approx 0,66 \text{ meV ps}$, con $1 \text{ ps} = 1 \text{ piconsegundo} = 10^{-12} \text{ s}$. La frecuencia asociada a 1 ps es de $1 \text{ THz} = 1 \text{ terahertz} = 10^{12} \text{ Hz}$. Para contextualizar estas unidades de tiempo, estimemos la distancia Δd que recorre la luz en 1 ps. En unidades SI: $\Delta d = c\Delta t \rightarrow \Delta d = 3 \times 10^8 \times 10^{-12} = 3 \times 10^{-4}$, o sea 0.3 mm, el diámetro aproximado de un cabello.

Ejercicio 1.3 Actualmente es posible producir neutrones 'ultra-fríos', los que tienen una energía cinética del orden de 10^{-7} eV. Justifique la denominación 'ultra-frío' calculando la temperatura asociada a esta energía. Determine la velocidad de estos neutrones y compárela con la de un transeunte. ¿Qué altura alcanzarían estos neutrones al ser lanzados verticalmente? Calcule la longitud de onda de de Broglie de estos neutrones ($\lambda = h/p$) y compárela con la separación interatómica de un sólido.

Ejercicio 1.4 Calcule al 5 % y sin uso de calculadora, utilizando prefijos femto, pico, nano, micro, mili, kilo, mega, según convenga:

- El radio de Bohr, $a_0 = \hbar^2/me^2$;
 - La longitud de onda de Compton del electrón: $\lambda_C = h/mc$;
 - La longitud de onda de Compton para un nucleón: $\lambda_C = h/Mc$;
 - La energía potencial entre un protón y un electrón para $r = a_0$ (radio de Bohr);
 - La máxima longitud de onda de los fotones en la aniquilación $e^+ + e^- \rightarrow \gamma + \gamma$;
 - La longitud de onda de de Broglie $\lambda = h/p$, de electrones con energía cinética de 1 MeV;
 - La longitud de onda de de Broglie para un protón con energía cinética de 3,5 TeV;
 - La masa de 1 litro de materia nuclear ($\rho \approx 0,16 \text{ fm}^{-3}$).
-

Capítulo 2

Albores de la mecánica cuántica

Revisamos sucintamente algunos de los fenómenos más emblemáticos conducentes a la génesis de la mecánica cuántica. Se trata de fenómenos cuyos comportamientos resultaban inexplicables bajo las nociones clásicas de la física conocidas hacia fines del siglo XIX y cuya validez era incuestionable. De las hipótesis formuladas para explicar estos fenómenos fué clave aceptar, como una manifestación de la naturaleza, nociones como

- a) la discretización (cuantización) de cantidades físicas (Planck, Bohr);
- b) comportamiento corpuscular de la luz (Einstein); y
- c) comportamiento ondulatorio de las partículas (de Broglie).

De acuerdo a la física clásica, la energía y el momentum angular de un sistema son cantidades continuas, ajustables a cualquier valor mediante condiciones iniciales apropiadas. La luz, por otra parte, se entendía como ondas electromagnéticas, gobernadas por las ecuaciones de Maxwell. Una manifestación característica de las ondas electromagnéticas es el fenómeno de interferencia. El transporte de energía, en tanto, es gradual y caracterizado por el vector de Poynting. Por otra parte, la materia se entiende formada por partículas de localización ilimitada, cuyo comportamiento es predecible cabalmente mediante las ecuaciones de Newton. Las trayectorias de las partículas quedan totalmente determinadas a partir de sus condiciones iniciales.

La aceptación de ideas radicalmente contrapuestas a las clásicas tomó grandes esfuerzos tanto teóricos como experimentales, los que también se extendieron por un largo tiempo. No sólo era difícil dejar de lado un marco teórico que había sido sumamente eficaz para entender y describir fenómenos naturales, sino que también no era claro qué aspectos de ella debían quedar de lado. Transcurrieron al menos dos décadas hasta concensuar principios para la

mecánica cuántica ampliamente aceptados hoy en día. A pesar los impresionantes aciertos y avances logrados en el campo de la física cuántica, aún perduran dificultades conceptuales planteadas en sus inicios por importantes detractores.

2.1. Radiación de cuerpo negro (Plank - 1900)

Los cuerpos muy calientes irradian luz que podemos percibir ópticamente. Tal es el caso de un trozo de hierro candente al ser sacado de la fragua. La radiación electromagnética resulta del movimiento acelerado de los constituyentes del cuerpo, la cual es caracterizada por la densidad espectral de energía, $u(\lambda, T)$. Esta función da cuenta de la intensidad de radiación como función de la longitud de onda λ cuando el horno está a una temperatura T .

El fenómeno de radiación es modelado mediante un sistema físico equivalente, llamado cuerpo negro, consistente en una cavidad a temperatura T con un pequeño orificio por donde escapa radiación. La radiación desde el exterior no tiene incidencia sobre el sistema en su interior. La radiación electromagnética en el interior de la cavidad está en equilibrio térmico con las paredes. Dimensionalmente $u(\lambda, T)$ se expresa como densidad volumétrica de energía por unidad de longitud, lo que en el Sistema Internacional de unidades se expresa en J/m^4 . Así, $u(\lambda, T) d\lambda$ expresa la densidad volumétrica de energía con longitudes de onda entre λ y $\lambda + d\lambda$. Estudios experimentales muy prolijos permitieron establecer que:

- El espectro $u(\lambda, T)$ como función de λ es independiente del material, geometría y tamaño de la cavidad. Sólo depende de la temperatura.
- El espectro exhibe un solo máximo, en λ_{max} , longitud de onda que disminuye a medida que la temperatura T del cuerpo negro aumenta.

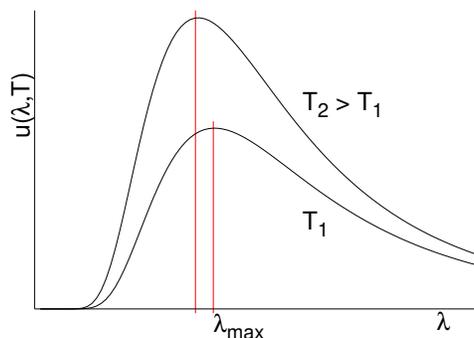


Figura 2.1: Espectro de la radiación de cuerpo negro.

Empíricamente, cuando observamos una fragua candente ésta tiene un color dominan-

te. Tal color corresponde a la longitud de onda de mayor intensidad. En relación a este comportamiento Wilhelm Wien observa que

$$\lambda_{max} T = 2.898 \times 10^{-3} \text{ m K} ,$$

la cual es reconocida como *ley de desplazamiento de Wien*. Posteriormente, en 1896 Wien propone la siguiente parametrización empírica para la radiación de cuerpo negro:

$$u(\lambda, T) = A \lambda^{-5} e^{-B/\lambda T} , \quad (2.1)$$

con A y B dos constantes ajustables experimentalmente.

Hacia junio de 1900 Lord Rayleigh objeta el comportamiento propuesto por Wien argumentando que para grandes longitudes de onda $u(\lambda, T)$ debiera aumentar con la temperatura (ver Fig. 2.1), lo que no se refleja en la expresión de Wien. En efecto,

$$u(\lambda, T)|_{\lambda T \gg B} \rightarrow A \lambda^{-5} \left(1 - \frac{B}{\lambda T}\right) \Rightarrow \lim_{T \rightarrow \infty} u(\lambda, T) = A \lambda^{-5} .$$

Rayleigh propone en cambio $u(\lambda, T) = C \lambda^{-4} T$, para λ grande. Este resultado lo obtiene considerando osciladores en las paredes, los cuales estarían en equilibrio térmico con la radiación electromagnética en de la cavidad. Así, $u(\lambda, T) d\lambda = \langle E \rangle_T dn$, con

$$\langle E \rangle_T = \frac{\int_0^\infty E e^{-\beta E} dE}{\int_0^\infty e^{-\beta E} dE} = \frac{1}{\beta} = k_B T ,$$

donde k_B es la constante de Boltzmann. La cantidad dn representa el número de estados por unidad de volumen con longitudes de onda entre λ y $\lambda + d\lambda$. Conocimientos de electromagnetismo para los modos en una cavidad conductora nos muestran que

$$dn = \frac{8\pi}{\lambda^4} d\lambda ,$$

con lo cual se obtiene el comportamiento sugerido por Rayleigh

$$u(\lambda, T) = k_B T \frac{8\pi}{\lambda^4} d\lambda = C T \lambda^{-4} d\lambda . \quad (2.2)$$

Max Planck, un físico alemán, estaba muy intrigado por la universalidad de la radiación de cuerpo negro. El había notado que la ley de Wien describía correctamente el espectro de radiación a longitudes de onda pequeña (ultravioleta), en tanto que el modelo propuesto por Rayleigh daba cuenta del comportamiento a longitudes de onda largas (infrarojo). Planck buscó una expresión que tuviese como límites ambos comportamientos. Hace notar que la entropía S del sistema ha de ser máxima. Considerando $S = S(U)$, entonces ($dU = T dS$)

$$\begin{aligned} \text{Wien} &\rightarrow \frac{d^2 S}{dU^2} \propto \frac{-\lambda}{U} \quad (\lambda \sim 0) \\ \text{Rayleigh} &\rightarrow \frac{d^2 S}{dU^2} \propto \frac{-1}{U^2} \quad (\lambda \sim \infty) \end{aligned}$$

A fin de conciliar ambos comportamientos asintóticos de la entropía en λ construye la siguiente relación

$$\frac{d^2 S}{dU^2} = \frac{-a}{U (b/\lambda + U)} .$$

Esta representación tiene la cualidad de reproducir los comportamientos para longitudes de onda cortas y largas. Integrando la ecuación de arriba con respecto a U se obtiene

$$\frac{dS}{dU} = \frac{a}{(b/\lambda)} \ln \left| \frac{b/\lambda}{U} + 1 \right| .$$

Puesto que $dS/dU = 1/T$, es directo obtener

$$U = \frac{b/\lambda}{e^{B/\lambda T} - 1} .$$

Con esta expresión Planck procede a ajustar b y B , obteniendo una descripción casi perfecta de la curva espectral de radiación. El problema era como justificarla.

La dificultad radicaba en gran medida en describir la distribución de las energías de los osciladores y como promediarlas. Procede entonces de la manera usual a como se abordan cierto tipo de problemas en física: discretizar alguna variable para posteriormente tomar el límite al continuo. La expectativa era que así se obtendría la solución al problema. Considera entonces

$$E \rightarrow E_n = n \epsilon_0 ,$$

con ϵ_0 un parámetro de discretización de la energía que eventualmente haría tender a cero. Con ello

$$\langle E \rangle_T = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} n \epsilon_0 e^{-\beta n \epsilon_0}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta n \epsilon_0}} = \frac{\epsilon_0}{e^{\epsilon_0/k_B T} - 1} ,$$

según el cual obtiene

$$u(\lambda, T) d\lambda = \frac{8\pi}{\lambda^4} d\lambda \frac{\epsilon_0}{e^{\epsilon_0/k_B T} - 1} . \quad (2.3)$$

La sorpresa de Planck fué que al hacer $\epsilon_0 \rightarrow 0$, se cae inevitablemente al resultado de Rayleigh, válido sólo para grandes longitudes de onda. En cambio, al desistir de este límite se reproduce el espectro de cuerpo negro en todo el rango de frecuencias. La reproducción de tal comportamiento se logra al hacer

$$\frac{\epsilon_0}{k_B T} = \frac{B}{\lambda T} .$$

Haciendo uso de $\lambda\nu = c$, obtenemos

$$\epsilon_0 = \frac{k_B B}{\lambda} = \left(\frac{k_B B}{c} \right) \nu \equiv h\nu ,$$

por lo que la constante h se obtiene a partir de B , ajustada al espectro de radiación. Planck obtiene un valor muy cercano al actualmente aceptado, $h = 6.63 \times 10^{-34}$ J.s. Ello ocurre en Berlín, en el año 1900. A esta constante se le reconoce actualmente como constante de Planck, de carácter universal. La expresión final para la radiación de cuerpo negro se reduce a

$$u(\lambda, T) d\lambda = \frac{8\pi}{\lambda^5} \frac{hc}{e^{hc/\lambda k_B T} - 1} d\lambda . \quad (2.4)$$

Ejercicio 2.1 Obtenga la ley del corrimiento de Wien: $\lambda_{\max} T = 0,29$ cm K.

Ejercicio 2.2 Obtenga los comportamientos asintóticos para λ 'grande' y 'pequeña', corroborando los límites asintóticos de Wien y Raileight. Estime λ para las cuales se cumplen estos límites asintóticos en el caso de una temperatura de 5000 K.

Ejercicio 2.3 A partir de la Ec. (2.4) para la radiación de cuerpo negro, obtenga la potencia por unidad de área irradiada perpendicularmente desde el orificio de una cavidad radiante (cuerpo negro) a temperatura T , $\epsilon = \sigma T^4$, con $\sigma = 5.42 \times 10^{-6}$ W/m²K⁴.

2.2. Efecto fotoeléctrico (Einstein - 1905)

En 1865 James Clerk Maxwell predice las ondas electromagnéticas, reconociéndose con ello la naturaleza ondulatoria de la luz. En 1887, Heinrich Hertz lleva a cabo un experimento que corrobora esta predicción. Sin embargo, en el desarrollo de sus experimentos Hertz observa la ocurrencia de chispas en la espira del detector, las cuales salían con mayor facilidad cuando se utilizaba radiación ultravioleta (UV).

En 1888 Wilhelm Hallwachs observa que el zinc, al ser iluminado con luz UV, se cargaba positivamente. Once años más tarde, ya en 1899, J. J. Thomson demuestra que en el experimento de Hallwachs la aparición de carga neta en el zinc se debe a que electrones son expelidos del metal por la radiación UV. A este fenómeno se le reconoce como efecto

fotoeléctrico. En 1902 Philipp Lenard lleva a cabo un experimento más refinado a fin de estudiar este fenómeno. Para ello aplica luz monocromática sobre una placa metálica, de la cual saldrían electrones. La circulación de electrones es controlada mediante una batería ajustable, como se esquematiza en la figura.

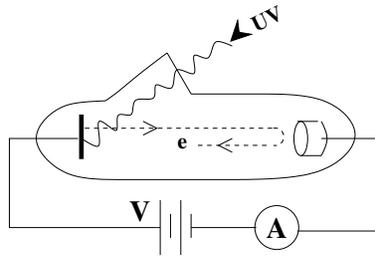


Figura 2.2: Experimento de Lenard

Luego de un detallado estudio del fenómeno Lenard concluye lo siguiente:

- Al iluminar la placa metálica con luz monocromática de frecuencia ν pueden salir electrones, lo que ocurriría inmediatamente después de la iluminación.
- Los electrones salen del metal sólo si la frecuencia ν es mayor que una frecuencia umbral ν_0 , característica del metal.
- La corriente, cuando existe, es proporcional a la intensidad de la luz, como se ilustra en la figura de más abajo.

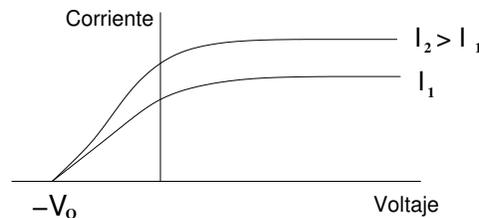


Figura 2.3: Comportamiento de la corriente en función del voltaje.

- La energía cinética de los electrones eyectados no depende de la intensidad de la luz.
- La emisión fotoeléctrica es instantánea, en radical contraste con las estimaciones clásicas que permite la emisión de electrones luego de unos 100 minutos.

La explicación a este fenómeno la aporta Albert Einstein en 1905. En ella introduce el concepto corpuscular de la luz, que denomina *quantum de luz*, en el sentido de un *quanto* de energía de radiación que es aportado al metal iluminado. Según Einstein, la energía del fotón, $E_\nu = h\nu$, es captada por un electrón en el metal. Parte de esta energía es utilizada

para elevar energéticamente al electrón al nivel de contención energética del metal, que es la barrera de energía que impide que los electrones se evaporen del metal, y el remanente queda disponible en forma de energía cinética. Por lo tanto

$$h\nu = \phi + K \quad (\phi > 0).$$

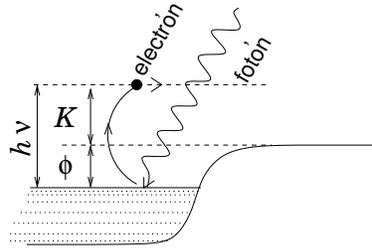


Figura 2.4: Esquema del efecto fotoeléctrico, según Einstein.

En esta ecuación K es la energía cinética adquirida por el electrón y ϕ es la función trabajo del metal. La energía cinética adquirida por el electrón liberado es controlada mediante un potencial de frenado V_0 , de modo que $K = e V_0$. Cuando la energía de los fotones es $h\nu_0$ los electrones emergen del metal con energía cinética ínfima ($K \approx 0$), de modo que $\phi = h\nu_0$. Sustituyendo en la ecuación de arriba tenemos

$$V_0 = \frac{h}{e} \nu - \frac{h}{e} \nu_0,$$

en plena concordancia con los experimentos. Lo notable de la explicación del efecto fotoeléctrico dada por Einstein es que *a priori*, la constante h no tenía porque ser igual a la constante h de Planck introducida para explicar la radiación de cuerpo negro. Lo sorprendente y notable de este estudio es que la constante h que se infiere del efecto fotoeléctrico coincide con la de constante de Planck, lo que sugiere en ella un carácter fundamental.

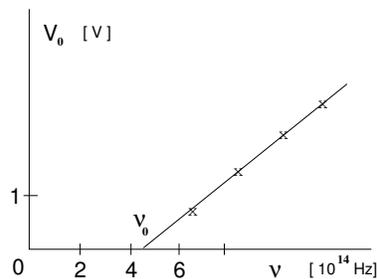


Figura 2.5: Voltaje de frenado en función de la frecuencia.

La descripción de Einstein al efecto fotoeléctrico concuerda con estudios experimentales muy meticulosos realizados por Robert A. Millikan. Millikan fué un tenaz detractor de la

noción de *quanto* de energía introducida por Einstein. Así, Millikan comienza en 1906 una serie de experimentos tendientes a refutar la explicación de Einstein. Le tomó casi 10 años llegar a resultados convincentes y ceder a la hipótesis del *quanto* de energía del fotón. Hacia el año 1926, el físico-químico Gilbert N. Lewis propone el término *fotón* para referirse al quanto electromagnético de energía.

2.3. El átomo de hidrógeno (Bohr - 1913)

Si bien el espectro de la radiación de cuerpo negro es continuo en la frecuencia de emisión, las emisiones luminosas de un gas rarificado sometido a descargas eléctricas presentan espectros con líneas discretas muy definidas. La luz emanada desde el tubo puede ser examinada luego de hacerla pasar por un prisma, el que segrega colores en haces diferentes. En el caso del hidrógeno, tal segregación conduce a cuatro líneas espectrales en el rango visible, las cuales se denotan por H_α , H_β , H_γ y H_δ . Sus respectivas longitudes de onda son 656.21 nm (H_α), 486.07 nm (H_β), 434.01 nm (H_γ) y 410.12 nm (H_δ).



Figura 2.6: Líneas espectrales de emisión de la serie de Balmer. La del extremo derecho corresponde a H_α (656.21 nm).

En 1884, J. J. Balmer, un profesor de matemáticas suizo, encuentra la siguiente regularidad para las longitudes de onda observadas en el espectro del átomo de hidrógeno

$$\lambda_m = 364,56 \text{ nm} \frac{m^2}{m^2 - 4}, \quad m=3,4,\dots$$

Así, las líneas quedan reproducidas con un error menor que $1 \div 40.000$. Johannes Rydberg sugiere más tarde la conocida fórmula

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{m^2} \right).$$

donde $R=1.09737 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$, constante que lleva el nombre de Rydberg.

En 1909 dos estudiantes de Ernest Rutherford en Manchester, Hans Geiger y Ernest Marsden, llevan a cabo un experimento de colisiones de partículas alfa (α) sobre películas de oro a fin de indagar el tamaño y distribución de las cargas positivas de un átomo. Las partículas alfa consisten en átomos de helio doblemente ionizados (He^{++}): dos protones y dos

neutrones, sin electrones. En ese entonces era totalmente desconocida la estructura de un átomo. Es más, aún no se había descubierto el protón. Conjeturas sugerían que su tamaño no era del orden de 10^{-10} m, que tenía electrones y que debía ser eléctricamente neutro. Como la carga de cada electrón es $-e$, necesariamente debía haber igual carga positiva. El misterio era que no se sabía como se distribuían estas cargas positivas.

Como resultado de los experimentos de Geiger y Madsen, se concluye que la distribución de cargas positivas está confinada a una región del orden de 10^{-14} m, más diez mil veces más pequeño que el tamaño del mismo átomo. Este descubrimiento, aparte de impresionante, fue crucial en la formulación de la teoría atómica.

Previamente, ya en 1903, el físico japonés Hantaro Nagaoka había sugerido un modelo orbital para el átomo, análogo al planeta Saturno y sus anillos. Sin embargo tal idea no prosperó pues no podía explicar su estabilidad. La pérdida de energía por radiación de las partículas cargadas en órbita (aceleradas) impiden –desde un punto de vista clásico– una vida del átomo superior a unos 10^{-8} segundos.

Ejercicio 2.4 Haciendo uso de la fórmula de Larmor para la potencia electromagnética P irradiada por una partícula con aceleración a , estime la vida de un átomo clásico. En el sistema gaussiano $P = 2q^2 a^2 / 3c^3$. En unidades SI, $P = q^2 a^2 / 6\pi\epsilon_0 c^3$.

Neils Bohr, luego de doctorarse en Copenhagen en 1911, se une al grupo de Rutherford en Manchester, Inglaterra. El intuía que la constante de Planck podía desempeñar un rol crucial en la determinación del tamaño de un átomo. Sus primeras conjeturas las basa en análisis dimensional. Si k representa la constante de Coulomb, m la masa del electrón, e su carga eléctrica y h la constante de Planck, entonces la combinación entre ellas con dimensiones de longitud es

$$\left[\frac{h^2}{mke^2} \right] = L .$$

Sustituyendo numéricamente $h=6.63 \times 10^{-34}$ J s, $m=9.11 \times 10^{-31}$ kg y $ke^2=2.31 \times 10^{-28}$ J m, se obtiene $L \sim 2 \times 10^{-9}$ m, una longitud comparable con las estimaciones del tamaño de los átomos en ese entonces.

Los avances de Bohr fueron lentos, hasta que en julio de 1912 logra reproducir los resultados de Balmer-Rydberg para las líneas espectrales del hidrógeno. El modelo de Bohr consiste en un modelo orbital de un electrón alrededor de una carga positiva muy masiva, el protón. El modelo era el mismo que el conjeturado por Nagaoka. Sin embargo Bohr ya estaba al tanto que la teoría de Maxwell no daba cuenta de la radiación de cuerpo negro ni del efecto fotoeléctrico, de modo que no se sintió compelido a insistir en la idea de radiación de los

electrones mientras orbitan. El modelo propuesto por Bohr para dar cuenta del espectro de emisión del hidrógeno se sustenta en los siguientes tres postulados:

- I.- Los electrones describen órbitas circunferenciales estacionarias en torno a una carga positiva y muy masiva. Tales órbitas son descritas clásicamente, de modo que su energía está dada por

$$E = -\frac{ke^2}{2r} . \quad (2.5)$$

- II.- Radiación es liberada cuando un electrón pasa de una órbita permitida a otra. La frecuencia de la radiación está dictada por la diferencia de energía entre los dos niveles

$$h\nu = E_m - E_n , \quad (2.6)$$

donde E_m y E_n corresponden a las energías de dos estados permitidos.

- III.- El momentum angular del electrón toma valores múltiplos de $\hbar \equiv h/2\pi$, vale decir,

$$mvr = n\hbar . \quad (2.7)$$

Considerando $mv^2/r = ke^2/r^2$, sustituyendo en la ecuación para la energía, se obtiene

$$E_n = -\frac{mk^2e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} . \quad (2.8)$$

Con este resultado se reproduce la serie de Balmer, correspondientes a la transición $n \rightarrow 2$. Además, Bohr obtiene la constante de Rydberg en términos de constantes fundamentales:

$$R = \frac{mk^2e^4}{4\pi c\hbar^3} .$$

El resultado de Bohr se puede extender a iones con un solo electrón en órbita (He^+ , Li^{++} , etc.), para los cuales

$$E_n = -\frac{13.6 \text{ [eV]}}{n^2} Z^2 ,$$

con $n = 1$ el estado de más baja energía, también denominado estado fundamental.

Notar que el espectro de energías para el átomo de hidrógeno se puede expresar

$$E_n = -\frac{1}{2}\alpha^2 mc^2 \frac{1}{n^2} ,$$

donde α representa la constante de estructura fina. De igual forma, se puede verificar que la energía potencial protón-electrón se puede expresar

$$V(r) = -\alpha^2 mc^2 \frac{a_0}{r} ,$$

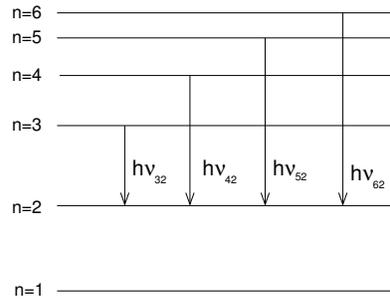


Figura 2.7: Esquema (no a escala) de las transiciones $n \rightarrow 2$ del átomo de hidrógeno, responsables de las líneas espectrales H_α , H_β , H_γ y H_δ . El nivel $n = 1$ representa el estado fundamental.

con $a_0 \equiv \hbar^2/mc^2$ el radio de Bohr. Notar que tanto $E - n$ como $V(r)$ as escalan con α^2 y la masa del electrón. El radio de Bohr es un patrón muy común en física atómica. Su valor numérico es cercano a medio *angstrom*:

$$a_0 = \frac{\hbar c}{\alpha m c^2} = 0,0529 \text{ nm} .$$

Ejercicio 2.5 La energía cinética media por partícula para un gas a temperatura T es $3k_B T/2$. Estime la temperatura que permita transiciones del átomo de hidrógeno desde el estado fundamental al primer estado excitado ($1 \rightarrow 2$).

Solución. Consideramos $k_B=8,617 \times 10^{-5} \text{ eV} \cdot \text{K}^{-1}$. Suponiendo que energía térmica permite la subida de nivel desde el estado fundamental ($n = 1$) al primer estado excitado ($n = 2$) planteamos $\Delta E = 3k_B T/2$. En unidades eV, $13.6(1 - 1/4) = 3k_B T/2$, de donde $T \approx 79.000 \text{ K}$. Esta es una temperatura altísima. Para tener una idea, la temperatura superficial del Sol se estima en 5.770 K . Es por tal motivo que excitaciones de hidrógeno desde el estado fundamental son inviables mediante calentamiento convencional, como lo pudiera ser un horno. Los tubos de descarga son una solución efectiva. Un cálculo análogo para la ionización total del átomo de hidrógeno implica temperaturas del orden de 105.000 K . A esta temperatura los electrones forman un plasma, dejando de tener pertenencia a algún núcleo en particular.

2.4. El efecto Compton (Compton - 1923)

En 1923 Arthur H. Compton encuentra evidencia adicional acerca de la naturaleza corpuscular de la luz. El estudiaba el scattering de rayos X desde grafito (carbón). En estos experimentos un haz de rayos X incide sobre una muestra de grafito y se analiza la deflexión del haz emergente. Los rayos X los podemos entender como una onda electromagnética de

muy alta frecuencia. Clásicamente se espera que las cargas eléctricas, afectadas por los rayos X, oscilen con la misma frecuencia del haz de luz incidente. Por lo tanto, la reemisión de la luz debiera ocurrir con la misma frecuencia incidente, independiente del ángulo de observación. Sin embargo Compton encuentra que a un mismo ángulo de observación, el espectro de los rayos emergentes exhibe dos máximos, como se ilustra en el diagrama derecho de la figura. A este fenómeno se le reconoce como efecto Compton.

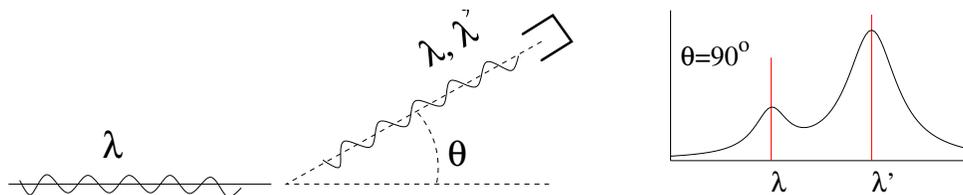


Figura 2.8: Observaciones de Compton

Si bien hubo intentos desde la física clásica para dar cuenta de este comportamiento, ellos resultaron insatisfactorios. El problema era abordado en el marco de la interacción de ondas electromagnéticas con electrones, las cuales nunca permitieron entender los resultados experimentales. Sin embargo, al abordar este fenómeno desde un punto de vista de colisiones entre fotones y electrones (*scattering* γe) es posible describir el fenómeno cabalmente. Esta explicación la aporta Compton en el año 1923.¹

La energía de los rayos X utilizados era del orden de unos 20 keV, unas 1500 veces la energía de ligazón de los electrones en sus estados fundamentales. Ello permite suponer que los electrones constituyentes están prácticamente libres ante sus colisiones con los fotones. Se estudia entonces la colisión de un fotón, de cuadrimomento $p_\gamma = (\omega, \mathbf{k})$, con un electrón en reposo cuyo cuadrimomento es $p_e = (m_e, \mathbf{0})$. Aquí hacemos uso de unidades naturales, donde $\hbar = c = 1$, para reconstituir dimensionalmente al final. Los momenta del fotón y electrón luego de la colisión se representan por $p'_\gamma = (\omega', \mathbf{k}')$ y $p'_e = (E, \mathbf{p})$, respectivamente.

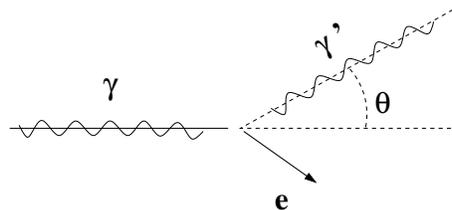


Figura 2.9: Colisión fotón-electrón

Imponiendo conservación de energía-momentum se obtiene

$$(\omega, \mathbf{k}) + (m_e, \mathbf{0}) - (\omega', \mathbf{k}') = (E, \mathbf{p}). \quad (2.9)$$

¹Arthur H. Compton, *Physical Review* **21**, 483 (1923).

Calculando el cuadrado a ambos lados, en el sentido de Lorentz, y considerando $(E, \mathbf{p})^2 = m_e^2$ para el electrón y $(E_\gamma, \mathbf{p}_\gamma)^2 = 0$ para los fotones, se obtiene

$$m_e(\omega - \omega') = \omega\omega'(1 - \cos\theta),$$

donde se ha identificado $\cos\theta = \hat{k} \cdot \hat{k}'$. Tomando $\omega = 2\pi/\lambda$ inferimos, luego de hacer reaparecer \hbar y c

$$\lambda' - \lambda = \lambda_C (1 - \cos\theta), \quad (2.10)$$

donde λ_C corresponde a la *longitud de onda de Compton* del electrón dada por

$$\lambda_C = \frac{h}{m_e c}.$$

El comportamiento para la longitud de onda del fotón luego de la colisión con el electrón dada por la Ec. (2.10) da cuenta del segundo pico en la intensidad de los rayos X observados a un ángulo θ . Esta descripción lograda por Compton al fenómeno de rayos X persuadió a muchos detractores del fotón a aceptar la idea corpuscular de la luz. Aquí nuevamente se manifiesta la constante de Planck, en la separación entre los dos máximos de intensidad de los rayos X observados.

La longitud de onda de Compton surge más adelante como una limitación intrínseca para la medición de la posición de una partícula. La idea detrás de esto es que mientras mayor es la energía de un fotón, más corta es su longitud de onda y por ende mayor es la resolución espacial para localizar una partícula. Pero esta energía tiene un límite, la masa de la partícula a localizar. Cuando la energía $h\nu$ aportada por el fotón es mayor que la energía en reposo de una partícula, mc^2 , consideraciones energéticas no impiden la creación de nuevas partículas. Por lo tanto la capacidad de localizar la partícula se pierde. Al igualar $h\nu = mc^2$, con $\lambda\nu = c$, inferimos que la longitud de onda que limita esta precisión es $\lambda = h/mc$, es decir la longitud de onda de Compton. Un análisis más prolijo sobre este tema permite identificar la *longitud de onda de Compton reducida*, denotada por $\bar{\lambda}_C$, como el límite de tal resolución espacial. Ella viene expresada por

$$\bar{\lambda}_C = \frac{\hbar}{mc}.$$

En el caso del electrón se tiene $\bar{\lambda}_C \approx 386$ fm, bastante mayor al tamaño de un núcleo atómico cuyos radios varían entre 2 y 7.5 fm.

Capítulo 3

Mecánica ondulatoria

3.1. Comportamiento *dual* de la luz

Una vez introducida la teoría electromagnética de Maxwell y realizadas las verificaciones que le siguieron, el consenso se inclinó hacia la aceptación de la naturaleza ondulatoria de la luz. Por otra parte, la noción corpuscular de la luz introducida por Einstein dejó sorprendidos a muchos y por largo tiempo.

La componente eléctrica de una onda electromagnética plana puede ser descrita mediante

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}, \quad (3.1)$$

donde \mathbf{k} representa el vector número de onda y ω la frecuencia angular. Si la propagación es en el vacío, entonces

$$\frac{\omega}{k} = c.$$

Estas mismas cantidades físicas son las que Einstein les hace corresponder el fotón. En este caso su energía está dada por $E_\gamma = \hbar\omega$. Para el momentum recurrimos a la relación energía-momentum $E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4$, la que nos permite obtener el momentum $\mathbf{p} = (E_\gamma/c)\hat{p} = (\hbar\omega/c)\hat{p}$. Puesto que $\omega/k = c$, se obtiene

$$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}.$$

Además, puesto que el número de onda k se expresa en términos de la longitud de onda, $k = 2\pi/\lambda$, entonces obtenemos la siguiente relación entre longitud de onda y momentum para la luz

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (3.2)$$

Un ingrediente adicional y crucial es la propiedad de superposición de las ondas electromagnéticas, garantizada por la naturaleza lineal de las ecuaciones de los campos.

3.2. La hipótesis de de Broglie

En 1924, Louis de Broglie introduce una hipótesis sumamente osada en su tesis doctoral. En ella él parte de la concepción de que la naturaleza es simétrica, por lo que el comportamiento *dual* de la luz postulado por Einstein se debe expresar también en la materia.

Las ondas electromagnéticas están caracterizadas por su frecuencia ω y su vector de ondas \mathbf{k} . A éstas se les hace corresponder la energía y momentum del fotón:

$$E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}.$$

En forma equivalente, de Broglie postula a que la materia (partículas materiales) están caracterizadas por su energía E y momentum \mathbf{p} , haciéndoles corresponder una frecuencia y vector número de ondas análogas a los fotones:

$$\omega = \frac{E}{\hbar} \quad \mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}.$$

De esta última surge que a la materia se le puede asociar una longitud de onda λ :

$$\lambda = \frac{h}{p}. \tag{3.3}$$

Con este argumento de Broglie fué capaz de interpretar geoméricamente el tercer postulado de Bohr, en el cual el momentum angular es un múltiplo de \hbar , vale decir $L = rp = n\hbar$. Bajo este supuesto $2\pi r = n\lambda$, equivalente a decir que el perímetro de las órbitas estacionarias de Bohr es un múltiplo de la longitud de onda del electrón ligado. No obstante, para muchos físicos de la época ésta no era más que una mera coincidencia.

Fué en 1926, cuando los físicos norteamericanos C. J. Davison y L. H. Germer¹ observaron que al hacer incidir un haz de electrones monoenergético sobre un blanco de sodio (Na) el haz emergente exhibe un comportamiento de difracción igual al de los rayos X. La geometría del patrón de difracción, en el caso de los rayos X, está determinada por la geometría de la red (conocida) y la longitud de onda λ de la onda incidente. Lo notable, en el caso del

¹C. J. Davison y L. H. Germer, *Physical Review* **30**, 705 (1927).

haz de electrones, es que el patrón de difracción observado coincidía perfectamente con la longitud de onda λ establecida en la hipótesis de de Broglie: $\lambda = h/p$, donde

$$\frac{p^2}{2m} = eV,$$

con V el voltaje de aceleración del haz de electrones. Este experimento constituyó una prueba contundente en favor del comportamiento ondulatorio de la materia.

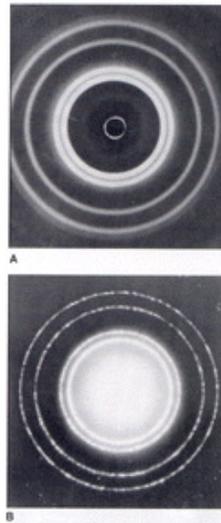


Figura 3.1: Difracción de rayos X (arriba) y electrones (abajo) debidas a una película de aluminio.

Ejercicio 3.1 Los electrones de conducción en una barra de cobre tiene una energía cinética del orden de 7 eV. Calcule la longitud de onda de de Broglie asociada y compárela con la distancia interatómica. La densidad del cobre es $\rho = 8900 \text{ kg/m}^3$ y su número de masa, $A=60$.

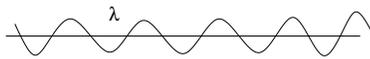
3.3. Consecuencias de la hipótesis de de Broglie

Al igual que las ondas electromagnéticas, de Broglie postula a que las ondas de materia satisfacen el principio de superposición. En el caso límite de una onda plana caracterizada por $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$, ella representa una *ondícula* de momentum completamente definido, \mathbf{p} . En tal

caso escribimos,

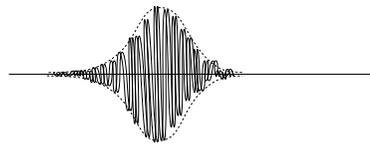
$$\begin{aligned}\phi(\mathbf{r}, t) &= \phi_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}, \\ \mathbf{k} &= \mathbf{p}/\hbar, \\ \omega &= E/\hbar\end{aligned}\quad (3.4)$$

Si bien la onda plana tiene un momentum absolutamente definido, ella *inunda* todo el espacio, lo que se traduce en una imposibilidad de localizar la partícula. Como veremos más adelante, la densidad de probabilidad de encontrar la partícula está dada por el módulo-cuadrado de la función de onda. En este ejemplo, $|\phi(\mathbf{r}, t)|^2 = |\phi_0|^2$, constante. Vale decir, el momentum de la partícula está totalmente definido, pero su localización es mínima: la probabilidad de detectar la partícula es la misma en cualquier parte del espacio.



$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \phi_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}$$

Onda plana



$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int A_{\mathbf{k}} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} d\mathbf{k}$$

Paquete de ondas

Cualquier intento de localización exige superponer contribuciones de distinta longitud de onda, de la misma forma como se procede con las series o integrales de Fourier. Cuando ello ocurre, entonces se pierde la definición del momentum pues son muchas las componentes que participan en la construcción del paquete de ondas. Esta competencia *localización* \leftrightarrow *definición de momentum* conlleva al principio de incertidumbre de Heisenberg, expresado por

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (3.5)$$

Al igual que los fenómenos ondulatorios clásicos, las ondas de materia también son caracterizadas por su velocidad de fase (v_ϕ) y velocidad de grupo (v_g), determinadas por la relación de dispersión $\omega = \omega(k)$. En el caso de partículas libres, la velocidad de fase

$$v_\phi = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{p^2/2m}{p} = \frac{1}{2} \frac{p}{m},$$

conlleva a que la velocidad de grupo,

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{m} = 2v_\phi.$$

Claramente el vacío es un *medio dispersivo* para las ondas de materia, lo que implica que los paquetes de onda se deforman a medida que transcurre el tiempo.

Evolución de un paquete de ondas en el vacío. Estudiemos un paquete de ondas gaussiano en el vacío. A fin de simplificar la manipulación algebraica trabajaremos con k en vez de p . Desde un punto de vista físico, ambas cantidades son completamente equivalentes. En 1D construimos

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \phi(k) e^{i(kx - \omega t)}, \quad (3.6)$$

donde $\phi(k)$ desempeñan el rol de los coeficientes de Fourier. Nos damos como condición inicial la distribución siguiente:

$$\Psi(x, 0) = N e^{-x^2/2\xi^2}. \quad (3.7)$$

La evolución del paquete se obtiene expeditamente una vez que determinemos los coeficientes $\phi(k)$. Para ello imponemos

$$N e^{-x^2/2\xi^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \phi(k) e^{ikx} \quad / \times e^{-ik'x} \int_{-\infty}^{\infty} dx \quad (3.8)$$

con lo cual

$$\phi(k) = \frac{N}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2\xi^2} - ikx}. \quad (3.9)$$

La integral de la derecha se puede llevar a cabo analíticamente mediante el uso de técnicas de integración en el plano complejo, como se explica en el Apéndice B.1. Con ello se obtiene

$$\phi(k) = N\xi e^{-\frac{k^2\xi^2}{2}}, \quad (3.10)$$

con lo cual

$$\Psi(x, t) = \frac{N\xi}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-\frac{k^2\xi^2}{2}} e^{i(kx - \omega t)}, \quad (3.11)$$

donde $\omega = \omega(k) = \hbar k^2/2m$. Por lo tanto,

$$\Psi(x, t) = \frac{N\xi}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-k^2(\frac{\xi^2}{2} + i\frac{\hbar t}{2m}) + ikx}. \quad (3.12)$$

Nuevamente la integración en k se puede reducir a una integral en el plano complejo, de lo cual se obtiene

$$\Psi(x, t) = \frac{N}{\sqrt{1 + i\hbar t/m\xi^2}} \exp\left(\frac{-x^2/2}{\xi^2 + i\hbar t/m}\right). \quad (3.13)$$

Claramente este resultado cumple con la condición dada para Ψ en $t = 0$. La forma del paquete se analiza considerando la evolución del modulo al cuadrado de la función de onda, $|\Psi(x, t)|^2$, que como se verá más adelante representa la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula en torno a x . En tal caso se puede observar que el ancho σ del paquete de ondas evoluciona de la forma

$$\sigma^2 = \frac{\xi^4 + (\hbar t/m)^2}{\xi^2} \quad \Rightarrow \quad \sigma \dot{\sigma} = \frac{\hbar^2 t}{m^2 \xi^2}. \quad (3.14)$$

Para tiempos grandes, vale decir $\hbar t \gg m\xi^2$, $\sigma \approx \hbar t/m\xi$. Con ello

$$\dot{\sigma} \rightarrow \frac{\hbar}{m\xi} = \frac{\hbar c}{mc^2 \xi} c.$$

Se puede apreciar que la tasa con que se ensancha el paquete de ondas depende de la masa de la partícula y de su dispersión inicial ξ . Para un electrón ($m_e c^2 \sim 0,5$ MeV) localizado en el entorno de un átomo ($\xi \sim 10^4$ fm) tenemos $\dot{\sigma} \sim \frac{4}{100} c$, una velocidad nada despreciable para el mundo atómico. Para un neutrón, en tanto, la velocidad es 1800 veces más pequeña: $\dot{\sigma} \approx 6,7$ km/s.

3.4. La ecuación de ondas de Schrödinger

Erwin Schrödinger, físico austríaco, estaba completamente fuera del grupo Göttingen-Münich-Copenhague, escuelas lideradas por Sommerfeld, Bohr y Born. El toma la idea de de Broglie y la lleva más allá de la *dualidad*, dándole a las partículas un comportamiento totalmente ondulatorio. En un comienzo buscó una ecuación de ondas relativista, sin embargo dificultades inmanejables en ese entonces lo llevaron a resignarse con una ecuación no relativista. Años más tarde un reestudio de la ecuación de ondas relativista conduce a la ecuación de Klein-Gordon, recurrente en el estudio de campos de partículas sin spin.

La primera ecuación de ondas, reconocida como *ecuación de Schrödinger*, fué reportada hacia fines de 1925. Se trata de una ecuación diferencial de segundo orden en las coordenadas espaciales y primer orden en el tiempo. Podemos, retrospectivamente, reconstruir la ecuación de Schrödinger introduciendo los siguientes supuestos.²

Sea $\Psi(\mathbf{r}, t)$ la función de onda de una partícula.

- A) La ecuación para Ψ debe ser lineal y homogénea, de modo que la superposición de ondas también sea una solución.

²Albert Messiah, *Quantum Mechanics*, Vol I, Cap. III, North-Holland, The Netherlands (1991).

B) La ecuación diferencial debe ser de primer orden en el tiempo, de modo que $\Psi(\mathbf{r}, t)$ quede completamente determinada por $\Psi(\mathbf{r}, 0)$

Consideremos una onda plana con la identificación de ω y k establecida por de Broglie:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A e^{i(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)/\hbar} . \quad (3.15)$$

Entonces,

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i \frac{E}{\hbar} \Psi \quad \rightarrow \quad i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = i \frac{p_x}{\hbar} \Psi \quad \rightarrow \quad -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = p_x \Psi \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{p_x^2}{\hbar^2} \Psi \quad \rightarrow \quad -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = p_x^2 \Psi \quad (3.18)$$

$$\nabla^2 \Psi = -\frac{p^2}{\hbar^2} \Psi \quad \rightarrow \quad -\hbar^2 \nabla^2 \Psi = p^2 \Psi . \quad (3.19)$$

Puesto que para una partícula libre esperamos $E = (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)/2m = p^2/2m$, entonces

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} , \quad (3.20)$$

que es la reconocida ecuación de Schrödinger. En ella se identifica la correspondencia

$$E \rightarrow i\hbar \partial_t \quad (3.21)$$

$$\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla . \quad (3.22)$$

Entonces la ecuación de Schrödinger se puede escribir

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right)_{\text{op}} \Psi = i\hbar \partial_t \Psi , \quad (3.23)$$

donde el subíndice 'op' denota operador diferencial. En presencia de una interacción, la que queda definida por un potencial V , postulamos a la extensión

$$\left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \right)_{\text{op}} \rightarrow \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V \right)_{\text{op}} , \quad (3.24)$$

con lo que obtenemos

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} . \quad (3.25)$$

Para el estudio de un sistema debemos identificar sus características físicas relevantes, en particular las interacciones a las cuales sus constituyentes están sometidas. Clásicamente

ello nos conduce a la construcción de un hamiltoniano: $H_{cl} = H(q, p)$. La cuantización del sistema se puede lograr sustituyendo $p \rightarrow p_{op}$, $q \rightarrow q_{op}$, de modo que el hamiltoniano cuántico se puede plantear como $H_{op} = H(q_{op}, p_{op})$. Las soluciones estacionarias, muy útiles para construir bases de autofunciones, son soluciones del tipo

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar},$$

que satisfacen la ecuación de valores propios

$$H_{op}\psi = E\psi. \quad (3.26)$$

Examinemos, en este contexto, lo que ocurre en el caso de un átomo de hidrógeno. En tal caso la interacción entre el centro de fuerzas (un protón) y el electrón está dada por $V(r) = e^2/r$, de modo que la ecuación de Schrödinger queda expresada por

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \frac{e^2}{r}\right)\psi = E\psi. \quad (3.27)$$

La solución más sencilla es aquella esféricamente simétrica, donde $\psi(\mathbf{r}) \equiv f(r)$. Sustituyendo y representando el laplaciano en coordenadas esféricas, obtenemos

$$\frac{d^2(rf)}{dr^2} + \frac{2me^2}{\hbar^2}f = -\frac{2mE}{\hbar^2}rf. \quad (3.28)$$

Si probamos una solución del tipo $f \sim e^{-\beta r}$, su reemplazo en la ecuación anterior conduce a las siguientes identidades:

$$\beta = \frac{me^2}{\hbar^2} \quad (3.29)$$

$$\beta^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2}, \quad (3.30)$$

de las cuales se infiere

$$E = -\frac{me^4}{2\hbar^2}, \quad (3.31)$$

en total concordancia con el resultado para la energía del estado fundamental del modelo de Bohr. Este resultado fué sorprendente, constituyendo un gran estímulo para el estudio de fenómenos a escala atómica mediante la ecuación de ondas propuesta por Schrödinger.

En este ejemplo introductorio hemos obviado el análisis de soluciones no esféricamente simétricas, correspondientes a soluciones de momentum angular no nulo. Tal estudio se verá en detalle más adelante.

3.5. Interpretación física de la función de onda

Hacia fines de 1926, Max Born interpreta el cuadrado del módulo de la función de onda, $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$, como la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula en \mathbf{r} en el instante t . Entonces, la probabilidad de encontrar una partícula descrita por una función de onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ en un entorno volumétrico $d^3r \equiv d\tau$ de \mathbf{r} está dada por

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau .$$

En ese contexto, $\Psi(\mathbf{r}, t)$ representa la *amplitud de probabilidad* de la partícula, una función compleja dependiente de la posición y del tiempo, es decir un campo. Esta interpretación se hace más evidente luego de obtener una ecuación de continuidad asociada a la ecuación de Schrödinger. Consideremos una partícula sometida a un potencial escalar real $V(\mathbf{r})$. Tomando la Ec. de Schrödinger asociada y multiplicamos por Ψ^* se sigue el siguiente desarrollo

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\nabla \Psi) + V\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} / \Psi^* \times \quad (3.32)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Psi^* \nabla \cdot (\nabla \Psi) + V\Psi^* \Psi = i\hbar \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} . \quad (3.33)$$

Tomamos la ecuación compleja conjugada y restamos,

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} [\Psi \nabla \cdot (\nabla \Psi^*) - \Psi^* \nabla \cdot (\nabla \Psi)] &= i\hbar \left(\Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} + \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) \Rightarrow \\ \frac{\hbar}{2mi} \nabla \cdot [\Psi^* (\nabla \Psi) - (\nabla \Psi^*) \Psi] + \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 &= 0 . \end{aligned} \quad (3.34)$$

Esta última ecuación tiene la estructura

$$\nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 , \quad (3.35)$$

en total analogía a la ecuación de continuidad de la carga eléctrica en electromagnetismo. La interpretación física a este resultado es directa si identificamos la densidad de probabilidad ρ y densidad de flujo de probabilidad \mathbf{J} por

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (3.36)$$

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2mi} [\Psi^* (\nabla \Psi) - (\nabla \Psi^*) \Psi] = \frac{\hbar}{m} \text{Im} \{ \Psi^* (\nabla \Psi) \} \quad (3.37)$$

Con esta construcción, si $\rho(\mathbf{r}, t)$ representa la densidad de probabilidad, entonces $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t)$ se interpreta como la corriente de probabilidad.

Examinemos este resultado en el caso de una onda plana, $\Psi(\mathbf{r}, t) = A e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$. Claramente $\rho(\mathbf{r}, t) = |A|^2$. Para obtener la densidad de corriente notamos que $\nabla \Psi = i\mathbf{k} A e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$, con lo cual

$$\mathbf{J} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} |A|^2 = \frac{\mathbf{p}}{m} |A|^2 .$$

Resulta evidente la estructura $\mathbf{J} = \rho \mathbf{v}$ para la densidad de corriente de probabilidad.

3.6. La norma de la función de ondas

Si Ψ representa la función de onda de una partícula en un dominio Ω , entonces $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau = \rho(\mathbf{r}, t) d\tau$ expresa la probabilidad de encontrar la partícula en un volumen infinitesimal $d\tau$ en torno a \mathbf{r} . Con esta interpretación exigimos que la norma

$$\mathcal{N} = \iiint_{\Omega} \rho(\mathbf{r}, t) d\tau, \quad (3.38)$$

exista y sea independiente del tiempo. Para ello es necesario que $\rho(\mathbf{r}, t)$ no tenga patologías. En particular, si Ω abarca todo el espacio, exigimos que

$$\rho \rightarrow \frac{1}{r^{3+\epsilon}} \quad \text{para } |\mathbf{r}| \rightarrow \infty,$$

con ϵ real positivo. Para la función de onda esta exigencia se traduce en que ella debe decaer, a lo menos, más fuerte que

$$\Psi \rightarrow \frac{1}{r^{3/2+\eta}} \quad \text{para } |\mathbf{r}| \rightarrow \infty.$$

Si esta condición no se cumple entonces la función de onda no es normalizable.

Examinemos ahora la conservación de la norma. Para ello escribamos la ecuación de Schrödinger de la forma general

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi. \quad (3.39)$$

Al igual que como se hizo anteriormente, multiplicamos Ψ^* por la izquierda y consideramos la ecuación conjugada:

$$\begin{aligned} i\hbar \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= \Psi^*(H\Psi) \quad \rightarrow \\ -i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \Psi &= (H\Psi)^* \Psi \end{aligned}$$

Entonces,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\Psi^* \Psi) = \Psi^*(H\Psi) - (H\Psi)^* \Psi. \quad (3.40)$$

Integramos sobre todo el espacio Ω y utilizamos la definición de \mathcal{N} dada en Ec. (3.38), obteniendo

$$i\hbar \frac{\partial \mathcal{N}}{\partial t} = \iiint_{\Omega} [\Psi^*(H\Psi) - (H\Psi)^*\Psi] d\tau . \quad (3.41)$$

Si la integral al lado derecho es nula, entonces $\partial \mathcal{N} / \partial t = 0$, lo que es efectivo si H_{op} es hermítico. En particular, si descomponemos $H_{op} = K_{op} + V_{op}$, la condición de hermiticidad recae sobre V_{op} . En casos en que la interacción es descrita mediante un potencial $V(\mathbf{r})$, esta condición equivale a exigir que éste sea real.

Ejercicio 3.2 Obtenga la ecuación de continuidad asociada a la ecuación de Schrödinger para un potencial $V = U + iW$, con U y W funciones reales de la posición. Interprete los casos $W > 0$ y $W < 0$.

En resumen, la conservación de la norma está garantizada con la hermiticidad del hamiltoniano. A la inversa, no hermiticidad del hamiltoniano conduce a no conservación de la norma. Una interacción no hermítica representa una fuente o sumidero de densidad de probabilidad. Si bien al comienzo ésto puede parecer exótico, existen diversos sistemas físicos que exhiben tal comportamiento. Todo depende de que defina uno como *el sistema*, análogo a los sistemas mecánicos donde intervienen fuerzas de roce. En este último el roce constituye un canal mediante el cual el *sistema* intercambia energía con el resto del universo. En un sistema cuántico, la no hermiticidad del hamiltoniano constituye un mecanismo (canales) mediante el cual el sistema intercambia partículas con el resto del universo. El *modelo óptico* en física nuclear se basa en un potencial no hermítico que da cuenta de la pérdida de flujo de un haz de partículas cuando interactúa con el núcleo atómico. Esa pérdida de flujo tiene su origen en la existencia de múltiples canales por donde se puede perder parte del flujo incidente. Lo interesante es que existen formalismos basados en primeros principios mediante los cuales se puede dar cuenta de estos efectos.

Ejercicio 3.3 Obtenga y normalice la función de onda $\psi(r)$ del átomo de hidrógeno en su estado fundamental. Determine la probabilidad de que el electrón se localice a distancias $r < 2$ fm del centro de fuerzas. ¿Cuántos átomos se necesitan para que uno de sus electrones sea sorprendido dentro de 2 fm del núcleo, con una probabilidad de 10%?

3.7. La función delta de Dirac

La función δ fué introducida por Paul Adrien Maurice Dirac en los años 20 como una herramienta para manejar ciertos tipos de infinitos recurrentes en sus estudios sobre los principios de la mecánica cuántica³. En ella se define la cantidad $\delta(x)$, que depende de la variable real x y que cumple con las condiciones

$$\delta(x) = 0 \quad \text{para } x \neq 0, \quad (3.42)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1. \quad (3.43)$$

Para visualizar $\delta(x)$, ella se trata de una función nula en todo el dominio de x , excepto en una vecindad muy pequeña alrededor de $x = 0$ y cuyo ancho es $\sim \epsilon$, donde $\delta(x)$ crece como $1/\epsilon$. La forma exacta de esta función no importa mientras cumpla con la condición 3.43. En este sentido $\delta(x)$ no representa una función en su forma usual, razón por la cual Dirac la denomina 'función impropia'. Actualmente es un estándar referirse a esta función como *delta de Dirac*. De la definición dada en las Ecs. (3.42) y (3.43) surgen las propiedades

$$\delta(x) = \delta(-x), \quad (3.44)$$

$$x\delta(x) = 0, \quad (3.45)$$

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x), \quad (3.46)$$

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2|a|} [\delta(x - a) + \delta(x + a)], \quad (3.47)$$

$$\delta(f(x)) = \sum_k \frac{\delta(x - x_k)}{|f'(x_k)|}, \quad \text{con } x_k \text{'s las raíces de } f(x) = 0, \quad (3.48)$$

$$f(x)\delta(x - a) = f(a)\delta(x - a), \quad (3.49)$$

Una identidad particularmente útil es la llamada *identidad de Sokhotski–Plemelj*, donde

$$\frac{1}{x + i\epsilon} = P \frac{1}{x} - i\pi\delta(x). \quad (3.50)$$

En esta ecuación se subentiende que $\epsilon \rightarrow 0$, mientras que P se denota *valor principal* en el sentido de Cauchy.

Hay situaciones donde resulta conveniente el uso de formas explícitas, denominadas *representaciones* de la delta de Dirac. Se trata de construcciones basadas en un parámetro

³P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford Science Publications, 4ta Ed. (1991).

auxiliar, cuyo límite a un valor adecuado cumpla con las condiciones en las Ecs. (3.42) y (3.43). Listamos algunas de ellas, cuyas demostraciones son relativamente sencillas.

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\varepsilon\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2\varepsilon}, \quad (3.51)$$

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{\varepsilon^2 + x^2}, \quad (3.52)$$

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\sin(x/\varepsilon)}{\pi x}, \quad (3.53)$$

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\varepsilon} e^{-|x|/\varepsilon}, \quad (3.54)$$

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\varepsilon \cosh^2(x/\varepsilon)}. \quad (3.55)$$

Estas cinco representaciones son ilustradas en la Fig. 3.2, donde también se incluye una gráfica de un escalón de anchura 2ε y altura $1/2\varepsilon$.

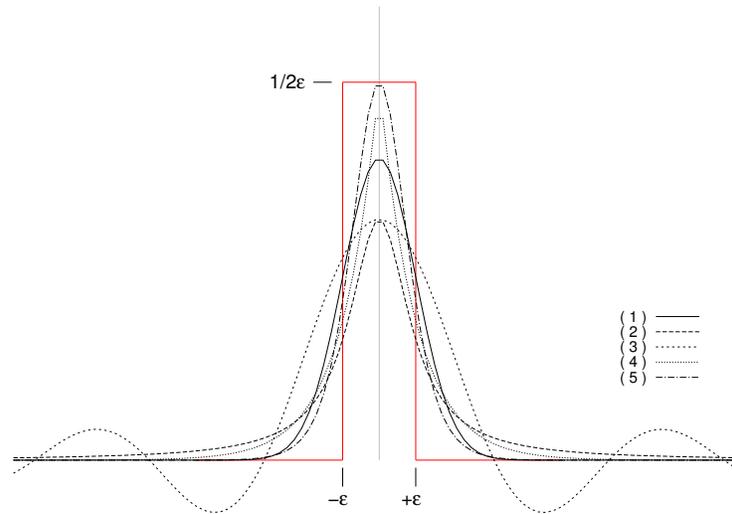


Figura 3.2: Representaciones de la δ de Dirac. La rotulación de las curvas guardan correspondencia con las Ecs. (3.51-3.55). En todos estos casos se ha usado $\varepsilon = 0,1$.

Otras dos propiedades convenientes de tener presentes son

$$\delta(x) = \frac{d\Theta(x)}{dx}, \quad (3.56)$$

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk. \quad (3.57)$$

En la primera de ellas Θ corresponde a la función escalón de Heaviside. La extensión de la δ a tres dimensiones, cuando $\mathbf{r} = (x, y, z)$, se define

$$\delta(\mathbf{r}) \equiv \delta(x) \delta(y) \delta(z). \quad (3.58)$$

Si bien es usual hacer explícita la tri-dimensionalidad en la δ mediante la notación $\delta^{(3)}(\mathbf{r})$, es frecuente omitir el superíndice '(3)'. El carácter 3D de la δ queda tácito en la dimensionalidad del argumento. Es directo comprobar que la definición en la Ec. (3.58) conduce a la identidad

$$\delta(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}},$$

donde $d^3k = dk_x dk_y dk_z$, con la integración en todo el espacio.

3.8. La función de onda en espacio de momentum

Antes de abordar el tema sobre valores de expectación asociados a operadores (observables) busquemos una interpretación física a la función de onda en representación de momentum, que en terminología matemática se entiende como espacio de Fourier. Consideremos un paquete de ondas libre, el que como hemos visto, se puede representar como una superposición de ondas planas de momentum k y energía $\omega = k^2/2m$. Aquí hemos tomado $\hbar = 1$ a fin de simplificar el álgebra; al final reconstituiremos los resultados dimensionalmente. Por simplicidad consideremos propagación a lo largo del eje x , de modo que

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k) e^{i(kx - k^2 t/2m)} dk. \quad (3.59)$$

Observemos que

$$kx - \frac{k^2 t}{2m} = -\frac{t}{2m} \left[\left(k - \frac{mx}{t} \right)^2 - \left(\frac{mx}{t} \right)^2 \right],$$

con lo cual podemos reescribir $\psi(x, t)$,

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \underbrace{\exp(imx^2/2t)}_{\text{fase}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k) \exp \left[i \frac{t}{2m} \left(k - \frac{mx}{t} \right)^2 \right] dk. \quad (3.60)$$

Al examinar esta expresión notamos que la fase no contribuye en el cálculo de $|\psi|^2$, por lo que nos centramos en el estudio de

$$\varphi(x, t) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k) \exp \left[i \frac{t}{2m} \left(k - \frac{mx}{t} \right)^2 \right] dk. \quad (3.61)$$

Nótese que el término mx/t tiene dimensiones de momentum, lo que motiva introducir la variable auxiliar $p = mx/t$. Además, efectuamos la traslación $k \rightarrow k + p$ en la integral de arriba, con lo cual

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(k + p) \exp \left(i \frac{tk^2}{2m} \right) dk. \quad (3.62)$$

Esta integral oscila fuertemente para $|k|$ altos, por lo que sus contribuciones importantes provienen para valores de k pequeños. Se propone demostrar que esta integral se puede aproximar a

$$\varphi \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi}} f(p) \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(i \frac{tk^2}{2m}\right) dk, \quad (3.63)$$

la que puede ser resuelta analíticamente como se muestra en el Apéndice B.2. Usando la Ec. (B.2) se tiene

$$\varphi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} f(p) (1 + i) \sqrt{\frac{m\pi}{t}}. \quad (3.64)$$

Por lo tanto

$$|\varphi|^2 = |f(p)|^2 \frac{m}{t}, \quad (3.65)$$

con lo que

$$|\psi(x, t)|^2 dx = |f(p)|^2 \frac{m dx}{t} = |f(p)|^2 dp. \quad (3.66)$$

La probabilidad de que la partícula se encuentre entre x_a y x_b en el instante t es

$$\mathcal{P}[x_a, x_b; t] = \int_{x_a}^{x_b} |\psi(x, t)|^2 dx = \int_{mx_a/t}^{mx_b/t} |f(p)|^2 dp. \quad (3.67)$$

En el esquema izquierdo de la figura de más abajo se ilustra un paquete de ondas en espacio de coordenadas. El paquete se propaga hacia la derecha con poca deformación. En esta ilustración se observa que en el instante t_1 , gran parte del paquete se encuentra entre x_a y x_b , lo que sugiere que $\mathcal{P}[x_a, x_b; t_1]$ es cercana a 1.

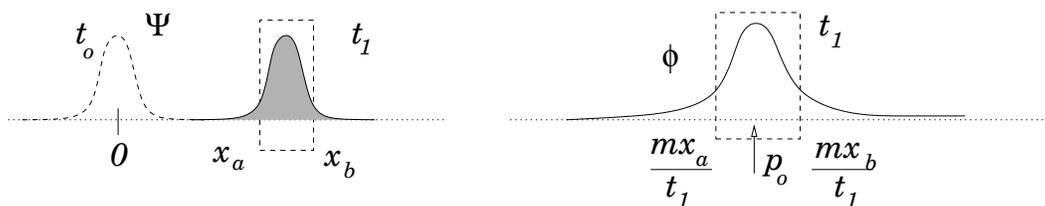


Figura 3.3: Paquete de ondas en coordenadas y momentum.

Del término derecho de la Ec. (3.67) notamos que

$$\int_{mx_a/t_1}^{mx_b/t_1} |f(p)|^2 dp,$$

también es cercana a 1, implicando que gran parte de su distribución (esquema derecho) está contenida entre los límites inferior y superior de la integral, vale decir, entre $p_a = mx_a/t_1$ y $p_b = mx_b/t_1$. El momentum dominante p_0 lo podemos estimar con la semisuma de p_a y p_b , i.e. $p_0 = m(x_a + x_b)/2$, coincidente con una estimación del momentum lineal en el sentido clásico. Este análisis sugiere una interpretación de la función de ondas en espacio de momentum como la amplitud de probabilidad de que la partícula tenga un momentum entre p y $p + dp$.

Antes de concluir esta sección es oportuno hacer un par de alcances. Si la función $\psi(\mathbf{r}, t)$ es cuadrado integrable, entonces su transformada de Fourier $\tilde{\psi}(\mathbf{k}, t)$ queda definida por

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \tilde{\psi}(\mathbf{k}, t). \quad (3.68)$$

De esta definición se infiere

$$\tilde{\psi}(\mathbf{k}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi(\mathbf{r}, t). \quad (3.69)$$

Además, la transformada de Fourier preserva la norma, vale decir,

$$\int \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = \int \tilde{\psi}^*(\mathbf{k}, t) \tilde{\psi}(\mathbf{k}, t) d\mathbf{k}.$$

Es frecuente que se aluda a $\tilde{\psi}(\mathbf{k})$ como $\psi(\mathbf{r})$ en espacio de Fourier. Como hemos visto recientemente, la función de onda $\tilde{\psi}(\mathbf{p})$ tiene un significado bien específico en relación a la distribución de los momenta, por lo que nos referiremos a ella como *función de onda en representación de momentum*. Así entonces, la propiedad de inversión de la transformada de Fourier garantiza que toda la información física contenida en $\psi(\mathbf{r}, t)$ lo está también en $\tilde{\psi}(\mathbf{k}, t) \rightarrow \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t)$, donde hemos hecho uso de la hipótesis de de Broglie $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$. Esta observación es muy relevante puesto que sugiere que $\psi(\mathbf{r})$ y $\tilde{\psi}(\mathbf{p})$ constituyen representaciones de un mismo objeto que en un sentido abstracto lo podemos simbolizar mediante

$$|\psi\rangle.$$

Sus proyecciones en espacio de coordenadas o de momentum representan a funciones propiamente tal y se expresan por

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \langle \mathbf{r} | \psi \rangle, \\ \tilde{\psi}(\mathbf{p}) &= \langle \mathbf{p} | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (3.70)$$

3.9. Valores de expectación

Se define el *valor de expectación* de un observable como el valor medio de los valores observados luego de muchas mediciones del mismo. Ello supone un número muy grande de

mediciones bajo idénticas condiciones. Si denotamos por p_i la probabilidad de que al medir un observable Ω éste arroje el valor ω_i , entonces el valor de expectación de Ω es

$$\langle \Omega \rangle = \sum_i p_i \omega_i .$$

Aquí hemos supuesto que las probabilidades p_i están normalizadas, vale decir $\sum_i p_i = 1$.

Es importante señalar que el valor de expectación *no corresponde* al valor más probable. Por ejemplo, consideremos un dado y sus seis caras, cada una de ellas con un número asociada del 1 al 6 (observable). La probabilidad de que al lanzar el dado resulte cualquiera de estos seis observables es $1/6$. Entonces, el valor de expectación del observable 'cara del dado' es

$$\langle \text{Cara de dado} \rangle = \frac{1}{6} \times 1 + \frac{1}{6} \times 2 + \frac{1}{6} \times 3 + \frac{1}{6} \times 4 + \frac{1}{6} \times 5 + \frac{1}{6} \times 6 = 3,5$$

Como se observa, este valor de expectación no corresponde a uno de los valores medibles.

La equivalencia entre las funciones de onda en representación de coordenadas y de momentum, sus respectivas interpretaciones probabilísticas y la hipótesis de de Broglie, justifican las siguientes definiciones de los valores de expectación de la posición, $\langle \mathbf{r} \rangle$, y del momentum, $\langle \mathbf{p} \rangle$,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} \rangle &\equiv \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) \mathbf{r} \Psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} , \\ \langle \mathbf{p} \rangle &\equiv \int \tilde{\Psi}^*(\mathbf{p}, t) \mathbf{p} \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} . \end{aligned}$$

La relación entre ambas representaciones está dada por

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d\mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \tilde{\psi}(\mathbf{p}, t) . \quad (3.71)$$

Utilizando en forma explícita esta transformación y su relación inversa, además de la propiedad

$$\iiint d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} = (2\pi)^3 \delta^{(3)}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) ,$$

se propone verificar algunas de las siguientes propiedades

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r}, t) (-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}) \Psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} , \quad (3.72)$$

$$\langle \mathbf{r} \rangle = \int \tilde{\Psi}^*(\mathbf{p}, t) (+i\hbar\nabla_{\mathbf{p}}) \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) d\mathbf{p} . \quad (3.73)$$

Estos resultados sugieren introducir la noción de *representación* para los operadores de *posición* y de *momentum*, donde

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{r}_{op} \Psi(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{r} \Psi(\mathbf{r}, t) \\ \mathbf{p}_{op} \Psi(\mathbf{r}, t) &= -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \right\} \text{Representación de coordenadas ,} \quad (3.74)$$

y además

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{r}_{op} \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) &= +i\hbar \nabla_{\mathbf{p}} \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) \\ \mathbf{p}_{op} \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) &= \mathbf{p} \tilde{\Psi}(\mathbf{p}, t) \end{aligned} \right\} \text{Representación de momentum .} \quad (3.75)$$

NOTA: A fin de simplificar la escritura denotaremos los operadores mediante símbolos con 'tongo' o 'hat'. Así, $A_{op} \rightarrow \hat{A}$. Las componentes del operador posición se denotan por \hat{x} , \hat{y} y \hat{z} , o genéricamente por \hat{x}_i , con $i = 1, 2$ ó 3 . Análogamente, los momenta respectivos se denotan por \hat{p}_x , \hat{p}_y y \hat{p}_z , o genéricamente por \hat{p}_i .

Una consecuencia notable de las definiciones anteriores es la propiedad de no conmutatividad de los operadores asociados a la posición (\hat{x}_i) y al momentum en la misma dirección (\hat{p}_i). En efecto, se propone verificar que

$$(\hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{p}_j \hat{x}_i) \Psi = i\hbar \delta_{ij} \Psi ,$$

independientemente de Ψ y su representación. Esto sugiere postular que los operadores \hat{x} y \hat{p}_x satisfacen, en un sentido general,

$$\hat{x}_i \hat{p}_j - \hat{p}_j \hat{x}_i \equiv [\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar \delta_{ij} .$$

Aquí $[\cdot, \cdot]$ simboliza el *conmutador* de los operadores separados por la coma, de modo que si \hat{A} y \hat{B} son dos operadores, entonces $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$.

Ejercicio 3.4 Sean \hat{A} , \hat{B} y \hat{C} operadores lineales que satisfacen $\hat{A}(\hat{B} + \hat{C}) = \hat{A}\hat{B} + \hat{A}\hat{C}$, y $(\hat{A}\hat{B})\hat{C} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C})$. Demuestre las siguientes propiedades para conmutadores:

- $[\hat{A}, \hat{B} + \hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}] + [\hat{A}, \hat{C}]$;
- $[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}] = [\hat{A}, \hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}]$;
- $[\hat{A}, \hat{B}^n] = \sum_{k=0}^{n-1} \hat{B}^k [\hat{A}, \hat{B}] \hat{B}^{n-k-1}$;
- $[\hat{x}, \hat{p}^n] = i\hbar n \hat{p}^{n-1}$;
- $[\hat{p}, \hat{x}^n] = -i\hbar n \hat{x}^{n-1}$.

Observar que las propiedades (d) y (e) implican

$$[\hat{x}, F(\hat{p})] = i\hbar \frac{\partial F}{\partial \hat{p}} ; \quad [\hat{p}, G(\hat{x})] = -i\hbar \frac{\partial G}{\partial \hat{x}} ,$$

donde suponemos que tanto $F(\hat{p})$ como $G(\hat{x})$ se expresan como series de potencias de la forma $F = \sum_k a_k \hat{p}^k$; y $G = \sum_k b_k \hat{x}^k$. Además, se subentiende

$$\frac{\partial}{\partial \hat{p}} \hat{p}^n = n \hat{p}^{n-1} ; \quad \frac{\partial}{\partial \hat{x}} \hat{x}^m = m \hat{x}^{m-1} .$$

Ejercicio 3.5 Para $\Psi(\mathbf{r}, t)$ normalizable, demuestre que el valor de expectación de la energía cinética es siempre positiva, vale decir $\langle K_{op} \rangle = \int \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2\right) \Psi d^3r > 0$.

Solución. Dado que $\Psi^*(\nabla^2)\Psi = \nabla \cdot (\Psi^*\nabla\Psi) - |\nabla\Psi|^2$, entonces

$$\int d^3r \Psi^* (-\nabla^2) \Psi = - \int d^3r \nabla \cdot (\Psi^* \nabla \Psi) + \int d^3r |\nabla \Psi|^2.$$

La primera integral del lado derecho se evalúa usando el teorema de Gauss y suponiendo que $\Psi^*\nabla\Psi \rightarrow 0$ más rápido que $1/r^2$. En tal caso esta integral es nula, por lo que $\int d^3r \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2\right) \Psi = \frac{\hbar^2}{2m} \int d^3r |\nabla\Psi|^2 > 0$. Por lo tanto el valor de expectación de la energía cinética para estados confinados es siempre positiva.

Ejercicio 3.6 Obtenga y normalice la función de onda $\psi(r)$ del átomo de hidrógeno en su estado fundamental. Con ella calcule su radio cuadrático medio $\sqrt{\langle r^2 \rangle}$, el valor de expectación de su energía $\langle \hat{K} + \hat{V} \rangle$ y su representación en espacio de momentum ($\hbar = 1$), $\tilde{\psi}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \psi(r)$.

Ejercicio 3.7 El átomo de tritio (${}^3\text{H}$) está formado por un electrón ligado a un núcleo constituido por 1 protón y 2 neutrones, de cargas $+e$ y nula, respectivamente. Denotemos su hamiltoniano por \mathcal{H} . El decaimiento β de uno de los neutrones del núcleo, $n \rightarrow p + e + \bar{\nu}_e$, hace que el núcleo se transmute súbitamente a 2 protones y 1 neutrón. El electrón creado abandona muy rápidamente el átomo, quedando como resultado un átomo ionizado de helio-3 (${}^3\text{He}^+$). Denotamos su hamiltoniano \mathcal{H}' . Si inicialmente el átomo de tritio se encuentra en el estado fundamental, calcule el valor de expectación de la energía $\langle \mathcal{H}' \rangle$. Evalúe numéricamente y compare con el estado fundamental del tritio. Suponga que la transmutación es muy súbita, de modo que la función de onda del electrón en órbita no cambia ante el decaimiento β .

Ejercicio 3.8 Un electrón se encuentra en el estado fundamental ϕ_0 en un pozo infinito unidimensional de ancho $2b$ ($b \approx 1$ nm), donde $V(|x| < b) = 0$, y $V(|x| > b) = \infty$.

- Obtenga $\phi(x)$ y estime la fuerza (en unidades de energía/distancia) que el electrón ejerce sobre las paredes. Calcule y grafique $\tilde{\phi}(k)$. Interprete.
- Súbitamente el potencial desaparece y la partícula queda libre. Explícite las expresiones que permitan evaluar $\rho(x, t)$.
- Explique porque en este sistema se debiera esperar que $\langle \hat{p}_x \rangle = 0$, y $\langle \hat{p}_x^2 \rangle \neq 0$.

3.10. La ecuación de Schrödinger en espacio de momentum

Si bien es común centrarse en el estudio y aplicación de la ecuación de Schrödinger en espacio de coordenadas, su estudio en espacio de momentum ofrece una forma alternativa que puede ser particularmente útil. Esta idea se afinará más adelante, y posiblemente en tratamientos más avanzados sobre el tema.

Para fijar ideas, consideremos un caso unidimensional donde una partícula de masa m es sometida a un potencial $V(x)$. La ecuación para la función de onda $\psi(x)$ en estado estacionario en espacio de coordenadas está dada por

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x)\psi = E\psi$$

Consideremos la representación

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \phi(k) dx .$$

Observar que

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (-k^2) e^{ikx} \phi(k) dx .$$

Sustituimos en la ecuación de Schrödinger, multiplicamos por $e^{-ik'x}$ e integramos en la variable x . Además hacemos uso de la identidad $\int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x} dx = 2\pi\delta(k' - k)$, donde δ denota la función delta de Dirac, para obtener

$$\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \phi(k') + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{-ik'x} V(x) e^{ikx} \phi(k) = E\phi(k')$$

Definamos ahora la transformada de Fourier del potencial $\tilde{V}(k)$,

$$\tilde{V}(k) \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} V(x) e^{ikx} dx ,$$

con la cual obtenemos, luego de efectuar el intercambio de variables $k \rightleftharpoons k'$,

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \phi(k) + \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{V}(k - k') \phi(k') dk' = E\phi(k) . \quad (3.76)$$

Esta es la forma que adopta la ecuación de Schrödinger 1D en espacio de coordenadas.

Ejercicio 3.9 Considere una partícula de masa m sometida a un potencial atractivo de

rango nulo, $V(x) = -\lambda\delta(x)$, con $\lambda > 0$. Calcule $\tilde{V}(k)$, obtenga función de onda del estado ligado $\phi(k)$ y su autoenergía. A partir de lo anterior obtenga $\psi(x)$.

Solución. La autoenergía E es negativa, por lo que la denotamos por conveniencia como $E = -\hbar^2 b^2/2m$, con b una variable auxiliar equivalente. De la definición de \tilde{V} obtenemos $\tilde{V} = -\lambda/2\pi$. Denotemos entonces $a = -m\lambda/\pi\hbar^2$. Con estas definiciones la Ec. (3.76) para la función de onda se reduce a

$$k^2\phi(k) - a \int \phi(k')dk' = -b^2\phi(k).$$

Denotando $\Phi = \int \phi(k)dk$, la ecuación anterior permite obtener

$$\phi(k) = \frac{a\Phi}{k^2 + b^2}.$$

Sustituyendo ϕ en $\Phi = \int \phi dk$, obtenemos

$$1 = a \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk}{k^2 + b^2} = \pi \frac{a}{b}.$$

De aquí inferimos $b = a\pi$. Volviendo a las variables originales,

$$E = -\frac{\hbar^2 b^2}{2m} = \frac{m\lambda^2}{2\hbar^2}.$$

Este resultado para la energía del estado ligado coincide con el que obtendremos más adelante resolviendo el sistema en representación de coordenadas.

La obtención de la función de onda (no normalizada) en espacio de coordenada procede evaluando la integral

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx} dk}{k^2 + b^2}, \quad (3.77)$$

la que se lleva a cabo en forma sencilla en el plano complejo. Como se muestra en el Apéndice B.3, el análisis requiere considerar por separado los casos $x > 0$ y $x < 0$, conduciendo en la evaluación de ψ

$$\psi(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{e^{-b|x|}}{b}.$$

Se trata de una función simétrica en x , que decae exponencialmente para $|x| \rightarrow \infty$. Notar que esta función de onda no está normalizada. Su forma normalizada se obtiene al evaluar $N = \int |\psi|^2 dx$ y hacer

$$\psi(x) \rightarrow \frac{1}{\sqrt{N}} \psi(x).$$

3.11. La ecuación de Schrödinger para un sistema binario

En el marco de la mecánica clásica, el problema de un sistema de dos cuerpos interactuando *via* fuerzas internas, vale decir potenciales que sólo dependen de la coordenada relativa, se puede reducir al problema de un cuerpo en el centro de masas del sistema. Este resultado se replica en el problema de dos cuerpos descrito en el marco de la ecuación de Schrödinger.

Supongamos que \mathbf{r}_1 y \mathbf{r}_2 denotan las coordenadas de las partículas 1 y 2, las que interactúan mediante un potencial $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$. Las masas de las partículas son m_1 y m_2 , respectivamente. La función de onda asociada a esta dos partículas la denotamos mediante $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$ que satisface

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla_1^2}{2m_1} - \frac{\hbar^2 \nabla_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)}{\partial t}. \quad (3.78)$$

Observar que

$$\nabla_1^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_1^2}; \quad \nabla_2^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_2^2}.$$

Guiados por las transformaciones clásicas, consideremos el siguiente cambio de coordenadas ortogonales

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad \mathbf{R} = \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2},$$

y denominemos $\Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t)$. Expresaremos los laplacianos ∇_1^2 y ∇_2^2 en términos de las nuevas coordenadas. Denotamos la masa total del sistema por $M = m_1 + m_2$, y su masa reducida por $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$. Convengamos además en que ∂_X representa derivada parcial con respecto a la coordenada X de \mathbf{R} . Análogamente, ∂_x representa derivada parcial con respecto a la coordenada x de \mathbf{r} . Así entonces,

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \left(\frac{\partial x}{\partial x_1} \right) \frac{\partial}{\partial x} + \left(\frac{\partial X}{\partial x_1} \right) \frac{\partial}{\partial X} = -\frac{\partial}{\partial x} + \left(\frac{m_1}{M} \right) \frac{\partial}{\partial X}.$$

En forma análoga,

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \left(\frac{2m_1}{M} \right) \frac{\partial^2}{\partial x \partial X} + \left(\frac{m_1^2}{M^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial X^2}.$$

Por otro lado, con respecto a la coordenada x_2 tenemos

$$\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \left(\frac{2m_2}{M} \right) \frac{\partial^2}{\partial x \partial X} + \left(\frac{m_2^2}{M^2} \right) \frac{\partial^2}{\partial X^2}.$$

Combinando estos resultados se observa

$$\frac{1}{m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{1}{m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \frac{1}{M} \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{1}{\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} .$$

Este resultado se extiende a las componentes y y z , por lo que la Ec. (3.78) se re-escrive

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(r) \right] \Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t)}{\partial t} .$$

Esta ecuación separa el comportamiento del sistema en la coordenada relativa entre las partículas interactuantes, y el movimiento translacional de este. Las soluciones estacionarias son del tipo

$$\Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = e^{-iEt/\hbar} \Phi_0(\mathbf{R}, \mathbf{r}) ,$$

la que en la Ec. de Schrödinger conduce a

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(r) \right] \Phi_0(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E \Phi_0(\mathbf{R}, \mathbf{r}) .$$

Además, puesto que el potencial no depende de \mathbf{R} entonces la función de onda se puede separar en una parte que sólo depende de \mathbf{R} y otra de \mathbf{r} . Aquella que depende de \mathbf{R} es autofunción de ∇_R^2 , por lo que corresponde a una onda plana. Por lo tanto,

$$\Phi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} \psi(\mathbf{r}) .$$

Al sustituir y simplificar en la Ec. anterior se obtiene

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(r) \right] \psi(\mathbf{r}) = \left(E - \frac{\hbar K^2}{2M} \right) \psi(\mathbf{r}) \equiv E_{c.m.} \psi(\mathbf{r}) .$$

Esta es una ecuación diferencial de valores propios, donde el factor que multiplica ψ al lado derecho representa la autoenergía $E_{c.m.}$ en el centro de masas del sistema. Entonces,

$$E = E_{c.m.} + \frac{\hbar K^2}{2M} ,$$

lo que se traduce en que la energía del sistema binario es la suma de la energía cinética en el centro de masas del sistema, más la energía debido a la translación del centro de masas. El problema cuántico de dos cuerpos en el centro de masas involucra la masa reducida del sistema. En muchas de las aplicaciones que veremos en las secciones siguientes trabajaremos en el centro de masas. Ello equivale a considerar $K = 0$, por lo que $E_{c.m.} = E$. En adelante omitiremos el rótulo 'c.m.'.

Ejercicio 3.10 Compare porcentualmente la energía de transición desde los niveles $3 \rightarrow 2$ para el hidrógeno y deuterio. ¿Cuán diferentes son las longitudes de onda de tales emisiones? ¿Es ésta una diferencia medible?

Capítulo 4

Aplicaciones unidimensionales

La ecuación de Schrödinger unidimensional (1D) en estado estacionario para una partícula de masa m , en presencia de un potencial local $V(x)$, se puede escribir

$$-\phi''(x) + U(x)\phi(x) = \varepsilon \phi(x) , \quad (4.1)$$

donde simbolizamos $U(x) = 2mV(x)/\hbar^2$, y $\varepsilon = 2mE/\hbar^2$. Típicamente, una vez dado un potencial interesa buscar soluciones a esta ecuación, las que se pueden dar ante dos escenarios. Por una parte están los estados ligados, para los que buscamos sus autoenergías y autofunciones. Esto se traduce en encontrar valores ε , los cuales permitan soluciones confinadas, con sus correspondientes funciones de onda ϕ_ε . Por otro lado están las soluciones correspondientes a estados no ligados, también denominados estados de scattering, donde el problema se traduce en encontrar las funciones de onda ϕ_ε asociadas a un haz incidente. Este es el caso típico de colisiones con un centro de potencial. La energía $\varepsilon = 2mE/\hbar^2$ da cuenta de la energía E en el centro de masas del par interactuante, con m la masa reducida.

Genéricamente, las características del potencial van a condicionar el tipo de espectro que uno obtiene. En la figura (4.1) se ilustran en forma esquemática cuatro casos comunes. El primero de ellos (i) corresponde a un potencial confinante el que conduce a autovalores discretos. Tal es el caso de un pozo infinito o el oscilador armónico. El segundo ejemplo (ii) corresponde a un potencial atractivo en cierta región pero de alcance finito, lo que bien puede quedar descrito exigiendo $V(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$. El espectro en este caso es mixto, donde los autovalores negativos se dan en forma discreta y los positivos son continuos. El tercer ejemplo (iii) ilustra un potencial repulsivo de alcance finito. En tal caso el espectro permite autovalores positivos en espectro continuo. El cuarto ejemplo (iv) ilustra un potencial periódico. En este caso el espectro es continuo por segmentos, exhibiendo *estructura de bandas* para las soluciones de estados permitidos y prohibidos. Esto ocurre en las estructuras cristalinas, foco de estudio en física del estado sólido.

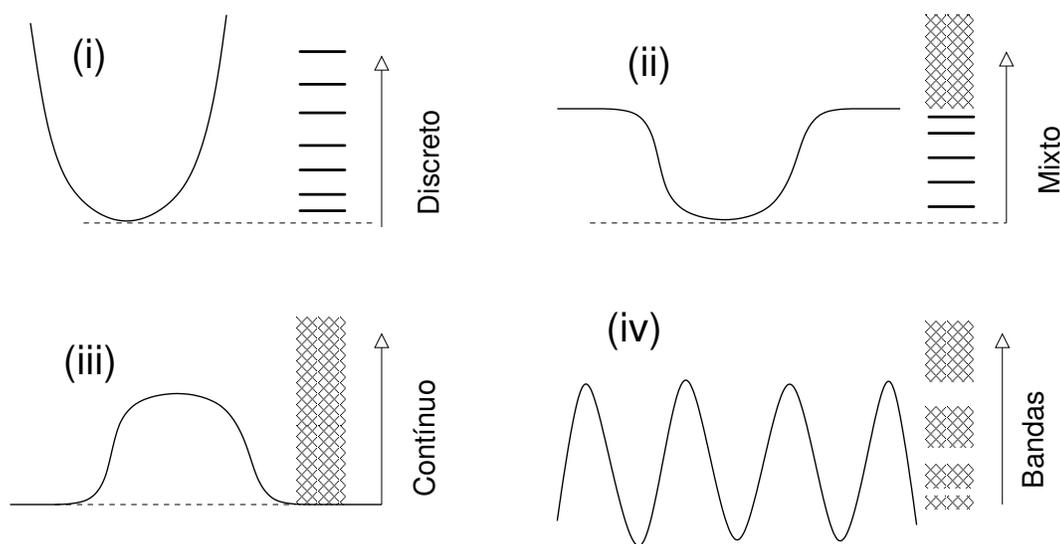


Figura 4.1: Espectro de energías según el tipo de potencial.

4.1. Condiciones sobre la función de onda

La función de onda $\phi(x)$ representa la amplitud de probabilidad de encontrar la partícula en la coordenada x . Es físicamente razonable exigir que tal función de onda sea univaluada. Además, la continuidad de ella también es necesaria dado que de otro modo tendríamos corrientes de probabilidad infinitas, lo que es físicamente inaceptable. Con estas consideraciones examinemos el comportamiento de la derivada de la función de onda. Para ello integramos la ecuación (4.1) en torno a un punto x_0 , donde consideramos que el potencial pueda exhibir alguno de los comportamientos ilustrados en la Fig. (4.2). En (a) el potencial y sus derivadas son continuos. En (b) el potencial es continuo en x_0 pero no así su derivada. En (c) tanto el potencial como su derivada en x_0 son discontinuos. En (d) el potencial es del tipo $V_0\delta(x - x_0)$, con $\delta(x - x_0)$ la delta de Dirac, lo que representa un potencial infinito de rango nulo (*zero-range potential*).

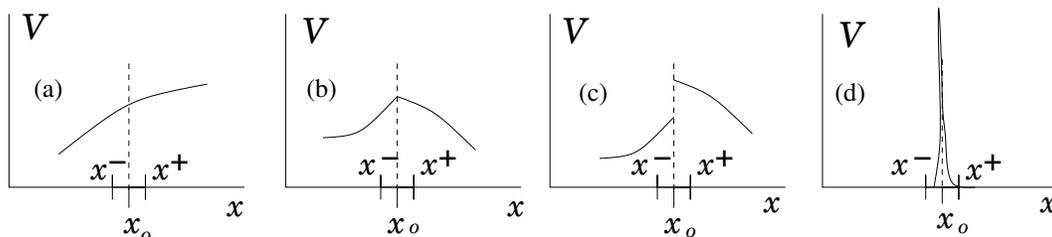


Figura 4.2: Posibles comportamientos del potencial en torno a x_0 .

Estudiemos como se comporta la derivada de la función de onda a ambos lados de x_0 .

Para ello denotemos $x^\pm = x_0 \pm \frac{1}{2}\Delta$, con $\Delta \rightarrow 0^+$. Al integrar la Ec. (4.1) entre x^- y x^+ obtenemos

$$- [\phi'(x^+) - \phi'(x^-)] + \int_{x^-}^{x^+} dx U(x)\phi(x) = \varepsilon \int_{x^-}^{x^+} dx \phi(x). \quad (4.2)$$

Analicemos ahora el límite $\Delta \rightarrow 0$ contemplando dos posibles escenarios. En el primero de ellos consideramos U finito en el intervalo $[x^-, x^+]$, lo que se da para los casos (a), (b) y (c). En estos tres casos la integral que incluye el potencial se puede acotar mediante el teorema del valor medio, por términos del tipo $\overline{U\phi} \times \Delta$, el que tiende a cero si $\Delta \rightarrow 0$. De igual forma, hacemos uso del teorema del valor medio para evaluar la integral del lado derecho de la ecuación, lo que permite expresarla como $\varepsilon \overline{\phi} \times \Delta$, que también se anula al hacer $\Delta \rightarrow 0$. Con lo anterior obtenemos

$$\phi'(x^+) = \phi'(x^-),$$

de modo que la derivada de la función de onda es continua aun si el potencial exhibe una discontinuidad finita.

El caso (d) merece atención especial. La continuidad de la función de onda conduce a que la integral del lado derecho de la Ec. (4.2) se anule luego de tomar el límite $\Delta \rightarrow 0$. Sin embargo, la integral que involucra el potencial se evalúa en forma exacta debido al término $\delta(x - x_0)$. Ello se traduce en la discontinuidad de la derivada de la función de onda

$$\phi'(x^+) - \phi'(x^-) = U(x_0)\phi(x_0) = \frac{2m}{\hbar^2}V(x_0)\phi(x_0). \quad (4.3)$$

En resumen, la derivada de la función de onda es siempre continua salvo en puntos donde el potencial tenga una *discontinuidad infinita*. Tal es el caso de barreras infinitas de potencial, como veremos más adelante.

Otros dos casos de interés son sistemas que exhiban simetría esférica o cilíndrica. Examinemos el comportamiento de la función de onda ψ en situaciones simplificadas para ambos casos. Para ello escribiremos el laplaciano en las coordenadas correspondientes.

(a) *Simetría esférica*. En coordenadas esféricas utilizamos los parámetros geométricos (r, θ, φ) para fijar un punto. La función de onda depende, en general, de estas tres coordenadas. Examinemos el comportamiento de la función de onda cuando ella sólo depende de la coordenada radial. Entonces,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right] (r\psi) + V(r)\psi = E\psi. \quad (4.4)$$

Denotando $u(r) \equiv r\psi(r)$, entonces el problema se reduce a una ecuación para $u(r)$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u'' + V(r)u = Eu. \quad (4.5)$$

Las condiciones de continuidad para u son las mismas analizadas para el caso unidimensional. Sin embargo hay un caso de cuidado que ocurre cuando el origen ($r = 0$) es una coordenada permitida en el intervalo de análisis. Puesto que la *función de onda* ψ debe ser finita en todo el espacio, entonces la condición $u(r) = r\psi(r)$, exige que

$$u(r)|_{r \rightarrow 0} = 0.$$

(b) *Simetría cilíndrica*. En coordenadas cilíndricas utilizamos los parámetros geométricos (ρ, ϕ, z) para fijar un punto. Es más, supongamos un sistema bidimensional donde la coordenada z no participa. Examinamos el comportamiento de la función de onda cuando ella sólo depende de la coordenada radial ρ , conducente al estado de mínima energía. Entonces,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial \psi}{\partial \rho} \right) + V(\rho)\psi = E\psi. \quad (4.6)$$

Esta es una ecuación diferencial que involucra primeras y segundas derivadas de ψ . Sin embargo, al introducir

$$\psi(\rho) = \rho^s R(\rho),$$

se encuentra que al escoger $s = -1/2$, la ecuación para la función de onda se reduce a

$$R'' + \frac{R}{4\rho^2} = (U - \varepsilon)R.$$

Aquí hemos denotado $U = 2mV/\hbar^2$ y $\varepsilon = 2mE/\hbar^2$. Dado que $\psi = R/\sqrt{\rho}$, el hecho de que ψ sea finita en el origen conlleva a exigir

$$R(\rho)|_{\rho \rightarrow 0} = 0.$$

4.2. Propiedades de soluciones en sistemas unidimensionales

Al abordar el análisis de un sistema unidimensional descrito por un potencial $V(x)$ nos planteamos la búsqueda de soluciones para la función de onda, la cual satisface

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\phi}{dx^2} + V(x)\phi = E\phi. \quad (4.7)$$

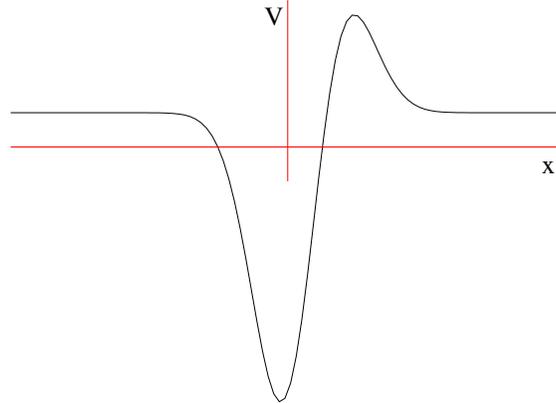


Figura 4.3: Potencial que tiende a V_∞ para $x \rightarrow \pm\infty$.

Comunmente se dan dos tipos de soluciones: estados ligados y estados de *scattering*. Por ahora excluirémos el caso de potenciales periódicos, los que conllevan a *soluciones de bandas*. Denotemos por V_{min} al mínimo del potencial y supondremos que $V(x)$ tiende asintóticamente a V_∞ para $x \rightarrow \pm\infty$. En la Fig. 4.3 se ilustra un potencial con las características descritas.

I.- Estados ligados

Los estados ligados son soluciones cuyas autoenergías cumplen con $V_{min} < E < V_\infty$. Los autovalores E resultan cuantizados y se pueden ordenar de menor a mayor, con $E_0 < E_1 < E_2 < \dots$. Los autoestados se denotan por $\phi_0, \phi_1, \phi_2, \dots$, respectivamente. Se observan las siguientes propiedades:

- Las autofunciones $\phi_0(x), \phi_1(x), \dots$ pueden representarse como funciones reales.
- Las autofunciones se anulan para $x \rightarrow \pm\infty$ y son normalizables: $\int_{-\infty}^{\infty} \phi_i^* \phi_j = \delta_{ij}$.
- La energía del estado fundamental cumple $E_0 > V_{min}$.
- La autofunción $\phi_0(x)$ para el estado fundamental no tiene nodos.
- $\phi_n(x)$ tiene n nodos, cada uno de ellos ubicado entre nodos consecutivos de ϕ_{n-1} .
- Los autoestados ϕ_n son no-degenerados.
- Si $V(x)$ es simétrico, entonces las autofunciones son simétricas o antisimétricas.

II.- Estados de scattering (continuo)

Cuando $E > V_\infty$, la energía no está cuantizada. Sin embargo para cada energía se encuentran autofunciones de la Ec. (4.7). Resumimos algunas de sus propiedades.

- Para toda energía $E > V_\infty$, las soluciones $\phi \rightarrow \phi_k$ de la Ec. (4.7) se comportan como $e^{\pm ikx}$, donde $\hbar^2 k^2 / 2m = E - V_\infty$. Aquí $\hbar k$ representa el momentum asintótico del haz incidente, con k su número de onda.

- b) Si consideramos una onda incidente de energía E desde la izquierda, las condiciones de borde para la solución son

$$\begin{aligned}\phi_k(x) &\rightarrow e^{ikx} + r(k)e^{-ikx}, & x \rightarrow -\infty, \\ \phi_k(x) &\rightarrow t(k)e^{ikx}, & x \rightarrow \infty.\end{aligned}\tag{4.8}$$

Aquí r y t definen las amplitudes de reflexión y transmisión, respectivamente. La probabilidad de reflexión está dada por $R = |r|^2$, mientras que la de transmisión por $T = |t|^2$.

- c) Si $k \neq k'$, entonces ϕ_k y $\phi_{k'}$ son ortogonales, es decir $\int_{-\infty}^{\infty} \phi_k^* \phi_{k'} = 0$.

Ejercicio 4.1 Demostrar que la energía del estado fundamental para un hamiltoniano del tipo $H = K + V$, es siempre mayor que el mínimo del potencial.

Solución. Consideramos la ecuación de Schrödinger para el estado fundamental, $\hat{K}\phi_0 + \hat{V}\phi_0 = E_0\phi_0$. Multiplicamos por la izquierda por ϕ^* e integramos en dx :

$$\int dx \phi^* \hat{K}\phi + \int dx \phi^* V(x)\phi = E_0 \int dx \phi^* \phi$$

Puesto que $\langle \hat{K} \rangle = \int dx \phi^* \hat{K}\phi > 0$, entonces

$$E_0 \int dx \phi^* \phi - \int dx \phi^* V(x)\phi > 0.$$

Además, $\int dx \phi^* V(x)\phi \geq V_{min} \int dx \phi^* \phi$, con lo cual $E_0 > V_{min}$.

Ejercicio 4.2 Demuestre que los autoestados de $-\phi'' + U\phi = \varepsilon\phi$, son no-degenerados.

Solución. Degeneración significa que existen dos o más funciones linealmente independientes que comparten un mismo autovalor, en este caso la energía. Para demostrar la no degeneración procedamos por reducción al absurdo, donde suponemos la existencia de dos soluciones ϕ_α y ϕ_β linealmente independiente con la misma autoenergía ε . Entonces desarrollamos

$$\begin{aligned}-\phi_\alpha'' + U\phi_\alpha &= \varepsilon\phi_\alpha & / \times \phi_\beta \\ -\phi_\beta'' + U\phi_\beta &= \varepsilon\phi_\beta & / \times \phi_\alpha\end{aligned}$$

Restando ambas ecuaciones y reordenando las derivadas se obtiene

$$\frac{d}{dx} [\phi_\alpha \phi_\beta' - \phi_\beta \phi_\alpha'] = 0.\tag{4.9}$$

Con ello $\phi_\alpha \phi'_\beta - \phi_\beta \phi'_\alpha = Cte$. Como los estados son ligados, tanto ϕ como sus derivadas se anulan para $x \rightarrow \pm\infty$, por lo que la constante debe ser nula. Así,

$$\frac{\phi'_\alpha}{\phi_\alpha} = \frac{\phi'_\beta}{\phi_\beta}. \quad (4.10)$$

Integrando ambos lados se obtiene $\phi_\alpha = k \phi_\beta$, con k una constante de proporcionalidad. Esto significa que ϕ_α es linealmente dependiente de ϕ_β , lo que contradice el supuesto de partida. Por lo tanto el espectro es no-degenerado.

Ejercicio 4.3 Demuestre que si $U(x)$ es simétrico, entonces las autofunciones de $-\psi'' + U\psi = \varepsilon\psi$, son simétricas o antisimétricas.

Solución. Consideremos

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + U(x)\psi(x) = \varepsilon\psi(x),$$

y hacemos un cambio de variable $x \rightarrow -x$. Puesto que $U(x) = U(-x)$, entonces

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(-x) + U(x)\psi(-x) = \varepsilon\psi(-x).$$

Denotemos $\psi(-x) = \chi(x)$, con lo cual la ecuación de arriba se reduce a

$$-\frac{d^2}{dx^2}\chi(x) + U(x)\chi(x) = \varepsilon\chi(x),$$

idéntica a la ecuación para ψ , con la misma autoenergía. Como el sistema es no-degenerado entonces necesariamente ψ y χ son proporcionales, es decir

$$\psi(x) = \lambda\chi(x) = \lambda\psi(-x),$$

con λ la constante de proporcionalidad. De esta misma ecuación se obtiene que $\psi(-x) = \lambda\psi(x)$, por lo que $\psi(x) = \lambda^2\psi(x)$. Las soluciones no triviales se dan para $\lambda = \pm 1$, conducentes a autofunciones pares ($\lambda = +1$) e impares ($\lambda = -1$).

Ejercicio 4.4 Obtenga las autofunciones $\phi_n(x)$ para una partícula de masa m en un pozo infinito simétrico de ancho a . Demuestre que $\langle \hat{x} \rangle_n = 0$ y que $(\Delta x)_n^2 = (a^2/12)(1 - 6/n^2\pi^2)$. Verifique que este resultado coincide con el límite clásico al hacer $n \rightarrow \infty$.

Ejercicio 4.5 Considere una partícula de masa m confinada en una región esférica de radio R . El potencial está dado por

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < R \\ \infty & r \geq R \end{cases}$$

- Encuentre y grafique la función de onda del estado fundamental $\phi_0(r)$.
- Calcule la presión que ejerce la partícula sobre las paredes y estímla para el caso de un electrón, cuando $R \sim 10$ nm. Considere $\hbar c \approx 200$ eV nm.
- Haga la misma estimación para una región cúbica de aristas de longitud igual al diámetro de la esfera.

4.3. Potencial de alcance nulo: 'zero-range potential'

El siguiente ejemplo constituye un potencial ficticio caracterizado por ser de alcance nulo. El hecho de que sea un modelo ficticio no es un impedimento para su uso en sistemas físicos reales. De hecho, su simplicidad permite en muchos casos explorar propiedades mediante resultados analíticos controlables. En física nuclear por ejemplo, cierta clase de interacciones tipo δ de Dirac llevan el nombre de interacciones efectivas de Skyrme. Estas son utilizadas como un recurso muy efectivo para hacer factibles ciertos cálculos de alta complejidad, los que de otro modo serían totalmente inviables aun con las capacidades computacionales de esta década.

En el caso unidimensional, escogido a lo largo del eje z , representemos un potencial de alcance nulo mediante

$$V(z) = g\delta(z),$$

donde $\delta(z)$ corresponde a la delta de Dirac. De acuerdo a esta definición, $V(z) = 0$ para $z \neq 0$. La magnitud de g denota la intensidad de la interacción, mientras que su signo determina si ella es atractiva ($g < 0$), o repulsiva ($g > 0$). Notar que $\delta(z)$ tiene unidades de $1/z$, de modo que si z representa una coordenada, entonces $\delta(z)$ acarrea unidades de L^{-1} . Por lo tanto, $[g] = \text{Energía} \times \text{Longitud}$.

- Estado ligado.* Para este caso consideramos $g < 0$. Distinguiamos dos regiones en el eje z : a) $z < 0$, y b) $z > 0$, cada una de las cuales lleva asociada funciones de onda ϕ_a y ϕ_b , respectivamente. Antes de resolver explícitamente es conveniente tener presente algunas características de la función de onda. Primero, puesto que el potencial es simétrico, al estado fundamental le corresponde una función de onda simétrica con respecto al origen. Además, puesto que se trata de un estado ligado ($E < 0$), la función de onda debe anularse para $z \rightarrow \pm\infty$.

Resolvemos para $z > 0$, $-\phi_b'' = (2mE/\hbar^2)\phi_b \equiv -\kappa^2\phi_b$, donde $\kappa^2 = -2mE/\hbar^2 > 0$. La solución ϕ_b es una combinación lineal de $e^{-\kappa z}$ y $e^{\kappa z}$. Sin embargo, la segunda de ellas

es descartada pues conlleva a soluciones divergentes para $z \rightarrow \infty$. Con lo anterior,

$$\phi_b = A e^{-\kappa z} .$$

Para el caso $z < 0$ la ecuación para ϕ_a es la misma que para ϕ_b , conducente a soluciones exponenciales del tipo $e^{\pm\kappa z}$. Sin embargo podemos afirmar que

$$\phi_a = A e^{\kappa z} ,$$

solución que se anula para $z \rightarrow -\infty$ y da cuenta de la simetría de la solución. Además se satisface continuidad de la función de onda en $z = 0$: $\phi_a(z \rightarrow 0^-) = \phi_b(z \rightarrow 0^+)$. El comportamiento de la derivada en de la función de onda en $z = 0^\pm$ queda determinada por la Ec. (4.3) de donde $\phi'_b - \phi'_a = (2mg/\hbar^2)\phi(0)$. Sustituyendo y simplificando obtenemos

$$-2\kappa = \frac{2mg}{\hbar^2} ,$$

de donde se obtiene $E = -\frac{mg^2}{2\hbar^2}$.

- b) *Estado de scattering*. En este caso la energía de la función de onda es un dato del problema, quedando por determinar la función de onda. A ambos lados del origen el potencial es nulo, por lo que la ecuación a resolver en cualquiera de estos casos es $-\phi'' = (2mE/\hbar^2)\phi \equiv k^2\phi$. Suponiendo onda incidente desde la izquierda, entonces

$$\phi_a = e^{ikz} + r e^{-ikz} , \quad \phi_b = t e^{ikz} .$$

Continuidad de la función de onda en el origen ($z = 0$) conduce a

$$1 + r = t .$$

Al igual que en el caso anterior, imponemos condición sobre la derivada de la función de onda, $\phi'_b - \phi'_a = (2mg/\hbar^2)\phi(0)$. Derivando se obtiene

$$ik[t - 1 + r] = \frac{2mg}{\hbar^2} t .$$

Definamos la magnitud $a = \hbar^2/mg$, con unidades de longitud y que denominaremos *longitud de scattering*. Con ello la ecuación anterior se escribe

$$ika(t + r - 1) = 2t .$$

Resolvemos y obtenemos

$$r = -\frac{1}{1 - ika} , \quad t = -\frac{ika}{1 - ika} .$$

Conviene hacer notar que la onda transmitida experimenta un desfase en relación a la onda incidente. Ello se hace evidente al notar que el coeficiente de transmisión se puede expresar como el producto de una magnitud (módulo) y una fase, del tipo $e^{i\delta}$. Del resultado para t observamos que

$$t = \frac{ka}{\sqrt{1+k^2a^2}} e^{i\delta},$$

con $\tan \delta = -1/ka$. La onda emergente se escribe

$$\phi_b(x) = |t|e^{i(kx+\delta)}$$

donde δ denota el *corrimiento de fase* de la onda emergente relativa a la incidente, o no perturbada.

Ejercicio 4.6 Un electrón de masa m está sometido a una fuerza atractiva de alcance nulo ubicada a una distancia b de una pared infinita. Así, el potencial queda dado por

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x \leq 0 \\ -\lambda\delta(x-b) & x > 0 \end{cases}.$$

Si $b \sim 5$ nm, estime numéricamente λ para que exista un estado ligado.

Ejercicio 4.7 Considere una partícula de masa m sometida a dos potenciales de rango nulo $V(x) = -b[\delta(x+a) + \delta(x-a)]$, con $b > 0$. Determine la probabilidad de encontrar la partícula en el intervalo $[-a, a]$.

Ejercicio 4.8 Haciendo uso de la ecuación de continuidad para la densidad de flujo de probabilidad, demuestre que las soluciones en Ec. (4.8) satisfacen $|r|^2 + |t|^2 = 1$.

Solución. Supongamos que la zona de interacción, donde el potencial es no despreciable, ocurre al interior del rango $[a, b]$ en el eje x . La ecuación de continuidad para estado estacionario, donde $\partial\rho/\partial t = 0$, se traduce en $\nabla \cdot \mathbf{J} = 0$. Aplicamos el teorema de Gauss considerando una superficie cerrada que sea cruzada perpendicularmente por el eje x en las coordenadas a y b . Obtenemos entonces $\mathbf{J}_a \cdot \hat{n}_a + \mathbf{J}_b \cdot \hat{n}_b = 0$, con $\hat{n}_a = -\hat{x}$, y $\hat{n}_b = \hat{x}$. Por lo tanto

$$\mathbf{J}_a \cdot \hat{x} = \mathbf{J}_b \cdot \hat{x}. \quad (4.11)$$

Evaluamos las corrientes. En $x = b$, donde $\psi = te^{ikx}$, tenemos para $\psi^*\nabla\psi$

$$\psi^*\nabla\psi = (t^*e^{-ikx})(ik\hat{x}te^{ikx}) = ik|t|^2\hat{x}.$$

Puesto que $\mathbf{J} = \frac{\hbar}{m} \text{Im}\{\psi^* \nabla \psi\}$, entonces

$$\mathbf{J}_b \cdot \hat{x} = \frac{\hbar k}{m} |t|^2. \quad (4.12)$$

Análogamente, para $x = a$, donde $\psi = e^{ikx} + r e^{-ikx}$, obtenemos

$$\psi^* \nabla \psi = (e^{-ikx} + r^* e^{ikx}) ik \hat{x} (e^{ikx} - r e^{-ikx}) = ik \hat{x} (1 - |r|^2 + 2i \text{Im}\{r^* e^{2ikx}\})$$

Entonces

$$\mathbf{J}_a \cdot \hat{x} = \frac{\hbar k}{m} (1 - |r|^2). \quad (4.13)$$

Observe que el flujo neto en la dirección x da cuenta del entrante menos el reflejado, dado por $|r|^2$. Reemplazando los resultados (4.13) y (4.12) en la Ec. (4.11) obtenemos $|r|^2 + |t|^2 = 1$.

4.4. Pozo finito 1D

Estudiamos una partícula de masa m confinada unidimensionalmente por un pozo de potencial finito. Este sistema bien pudiera constituir un modelo rudimentario para describir un electrón confinado por un metal, donde los bordes del metal se modelan con un potencial de altura finita. Definamos

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| \leq a \\ V_0 & \text{si } |x| > a \end{cases} \quad (4.14)$$

Ante este potencial la función de onda ϕ la representamos por segmentos: $u_1(x)$ para

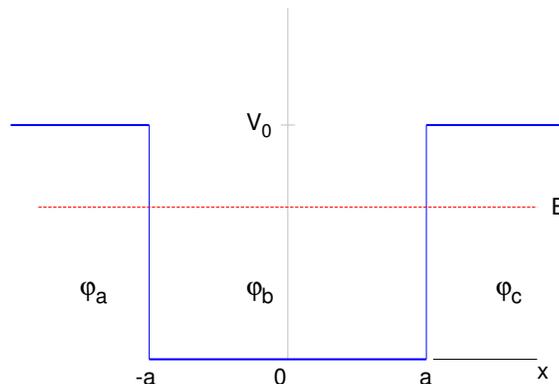


Figura 4.4: Pozo de potencial finito.

$x < -a$, $u_2(x)$ para $|x| \leq a$, y $u_3(x)$ para $x > a$. Entonces,

$$\begin{aligned} -u_1'' + \frac{2mV_0}{\hbar^2}u_1 &= \frac{2mE}{\hbar^2}u_1 \\ -u_2'' &= \frac{2mE}{\hbar^2}u_2 \\ -u_3'' + \frac{2mV_0}{\hbar^2}u_3 &= \frac{2mE}{\hbar^2}u_3 \end{aligned}$$

Denotemos

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}, \quad b^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}, \quad K^2 = b^2 - k^2. \quad (4.15)$$

Con lo anterior

$$u_1'' - K^2u_1 = 0; \quad u_2'' + k^2u_2 = 0; \quad u_3'' - K^2u_3 = 0.$$

Dado que el potencial es simétrico con respecto a x , entonces las soluciones deben ser simétricas y antisimétricas. Por lo anterior, para el rango $|x| \leq a$ las soluciones son del tipo $u_2 \sim \cos kx$ y $u_2 \sim \sin kx$. Para $x > a$ la solución debe ser exponencial decreciente, es decir $u_3 \sim e^{-Kx}$. En el caso de $x < -a$ las soluciones son del tipo $u_1 \sim e^{Kx}$, que garantiza $u_1 \rightarrow 0$ cuando $x \rightarrow -\infty$. Observe las siguientes construcciones para soluciones pares e impares:

$$\text{Pares: } \begin{cases} u_1 = Ae^{K(x+a)} & x < -a \\ u_2 = B \cos(kx) & |x| \leq a \\ u_3 = Ae^{-K(x-a)} & x > a \end{cases} \quad \text{Impares: } \begin{cases} u_1 = -Ae^{K(x+a)} & x < -a \\ u_2 = B \sin(kx) & |x| \leq a \\ u_3 = Ae^{-K(x-a)} & x > a \end{cases} \quad (4.16)$$

La condición de continuidad de la función y su derivada para todo x equivale a exigir continuidad de la derivada logarítmica u'/u . Imponemos esta condición para las soluciones pares en $x = a$

$$\left. \frac{u_2'}{u_2} \right|_a = \left. \frac{u_3'}{u_3} \right|_a \quad \Rightarrow \quad k \tan(ka) = K.$$

Usando $K^2 = b^2 - k^2$, obtenemos la ecuación que determina los valores permitidos para k , y por ende las energías de los estados ligados. Se obtiene

$$\tan(ka) = \sqrt{\frac{(ba)^2}{(ka)^2} - 1}. \quad (4.17)$$

Esta es una ecuación trascendental cuyas soluciones se obtienen numéricamente. Al imponer continuidad para las soluciones impares obtenemos una ecuación similar:

$$-\cot(ka) = \sqrt{\frac{(ba)^2}{(ka)^2} - 1}. \quad (4.18)$$

Notar que $-\cot x = \tan(x - \pi/2)$, equivalente a $\tan(x)$ trasladada en $\pi/2$ hacia la derecha. Estas ecuaciones se representan en la Fig. 4.5, donde las intersecciones entre $y_1(x)$ con $z(x) = \sqrt{\nu^2/x^2 - 1}$ (donde $\nu = 6,5$), e $y_2(x)$ con $z(x)$, denotadas con cuadrados rojos dan cuenta de las soluciones a las ecuaciones trascendentales. Las soluciones numéricas a estas

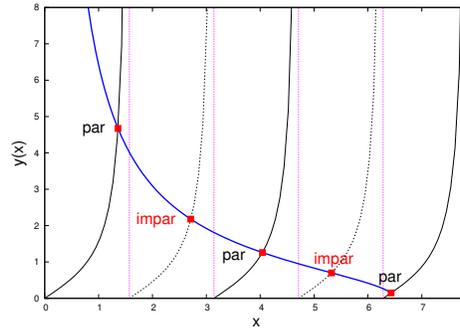


Figura 4.5: Las funciones $y_1(x) = \tan(x)$ (continúa), $y_2(x) = -\cot(x)$ (punteada), y $z(x) = \sqrt{\nu^2/x^2 - 1}$ (continúa gruesa), con $\nu = 6,5$.

ecuaciones ($y_1(x) = z(x)$; $y_2(x) = z(x)$) se tabulan en la Tabla 1. En ella se identifican las cinco soluciones, de las cuales tres corresponden a funciones de onda pares y dos impares. El primer estado ($n = 1$) es el el fundamental.

Orden n	Raiz x_n	Paridad
1	1.36001	+
2	2.71131	-
3	4.04101	+
4	5.32351	-
5	6.43004	+

A cada x_n le corresponde un número de onda k_n , donde $x_n = k_n a$. La energía resultante es

$$E_n = \frac{\hbar k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2ma^2} x_n^2 .$$

Normalización. Tratándose de estados ligados, determinamos las constantes A y B en las soluciones dadas por las Ecs. (4.16). Exigimos que

$$\int_{-\infty}^{-a} |u_1|^2 dx + \int_{-a}^a |u_2|^2 dx + \int_a^{\infty} |u_3|^2 dx = 1$$

En el caso de las soluciones pares, sustituimos de (4.16) e integramos explícitamente, obteniendo

$$\frac{1}{K} |B|^2 + a \left(1 + \frac{\sin(2ka)}{2ka} \right) |A|^2 = 1 . \tag{4.19}$$

Por otro lado, continuidad de $\phi(x)$ en $x = a$ implica

$$B \cos(ka) = A. \quad (4.20)$$

Combinando estas dos ecuaciones se obtienen

$$|A|^2 = \frac{k \tan(ka)}{1 + ka \tan(ka)}; \quad |B|^2 = \frac{k \sin(ka) \cos(ka)}{1 + ka \tan(ka)}.$$

Mediante un procedimiento análogo se encuentran las constantes A y B correspondientes a las soluciones impares. Ello nos permite obtener las funciones de onda, las que se grafican en la Fig. 4.6, indicadas por $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_5$. Estas soluciones evidencian algunas propiedades

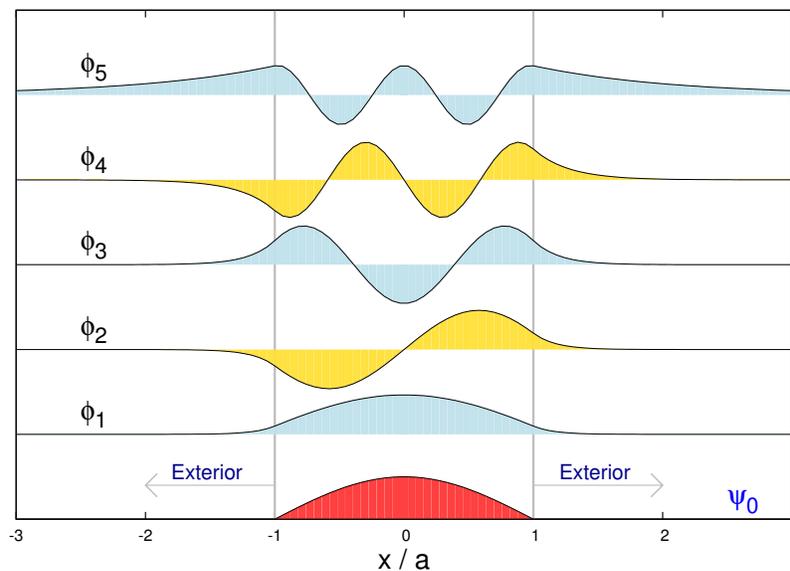


Figura 4.6: Funciones de onda permitidas para un pozo finito con $\nu = ba = 6,5$. La función rotulada ψ_0 representa el estado fundamental para una barrera infinita, donde la probabilidad de encontrar la partícula al exterior del pozo es nula.

importantes de resaltar. i) A mayor energía del estado ligado mayor es el número de nodos de la función de onda. El estado fundamental (ϕ_1) no tiene nodos. ii) La función de onda de los estados ligados es siempre confinada, extendiéndose hacia el exterior. iii) A menor profundidad del estado ligado, mayor es la probabilidad de encontrar la partícula en el exterior del pozo.

La probabilidad de que la partícula se encuentre fuera de la barrera está dada por

$$P_{Ext} = 2 \int_a^\infty |u_3|^2 dx = |B|^2 \frac{1}{2K}.$$

Sustituyendo los resultado para $|B|^2$ y Ka en el caso de soluciones pares, se obtiene

$$P_{Ext} = \frac{\cos^2(ka)}{1 + ka \tan(ka)}.$$

Un resultado análogo se obtiene para el caso de las soluciones impares. Si bien estas curvas son continuas como función de k , el hecho de que sólo existan valores discretos para k_n , dados por $k_n a = x_n$, las probabilidades de encontrar la partícula en el exterior es específica para cada k_n . En la Fig. 4.7 se muestran estas probabilidades, donde se evidencia que ella aumenta mientras menos profundo es el estado ligado. En el caso del estado menos ligado, tal probabilidad bordea el 50 %.

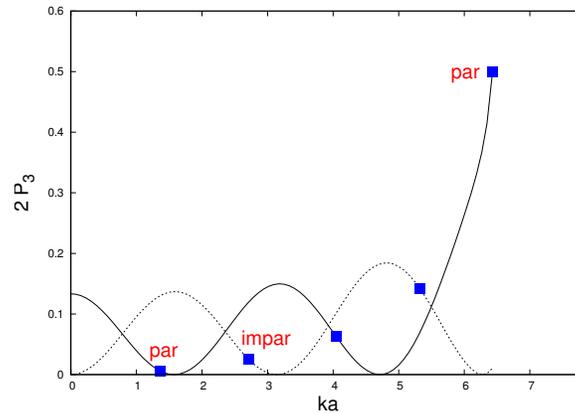


Figura 4.7: Probabilidad de encontrar la partícula en el exterior del pozo finito para los distintos estados.

Ejercicio 4.9 Calcule y examine el comportamiento de Δx para soluciones pares en las siguientes dos situaciones: (a) Para el último estado ligado, cuando su energía de ligazón está levemente bajo V_0 , la altura del pozo; y (b) Cuando V_0 es muy pequeño (¿con respecto a qué energía?). En su análisis utilice formas aproximadas para $\tan x$.

4.5. Pozo finito en 3D

En el caso de un pozo de potencial en 1D que estudiamos recientemente se obtuvo que, independientemente de la profundidad del potencial, el sistema permite un estado ligado. Es interesante hacer notar que tal no es el caso si consideramos un pozo de potencial finito en 3D. Veremos que para que el sistema permita un estado ligado, el potencial debe tener una profundidad mínima.

Consideremos una partícula de masa m sometido a un potencial esférico atractivo dado por $V(r) = -V_0 \Theta(R-r)$, con $r \geq 0$, y Θ la función escalón de Heaviside. Expresando la Ec. de Schrödinger en coordenadas esféricas para $r < R$ (zona 1), y $r \geq R$ (zona 2), obtenemos

las siguientes ecuaciones para la componente radial de la función de onda en cada zona

$$\begin{aligned} u_1''(r) &= -k^2 u_1(r), \\ u_2''(r) &= K^2 u_2(r). \end{aligned}$$

Aquí estamos considerando estados ligados ($E < 0$), por lo que definimos

$$b^2 = \frac{2mV_0}{\hbar^2}; \quad K^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2}; \quad k^2 = b^2 - K^2.$$

Al resolver estas ecuaciones y empalmar en $r = R$, se obtiene la siguiente ecuación que relaciona E con V_0 :

$$-\cot(kR) = \sqrt{\frac{(bR)^2}{(kR)^2} - 1}.$$

Esta ecuación es idéntica a (4.18) para las soluciones impares en el caso de un pozo 1D. Se propone demostrar que, para que exista al menos un estado ligado, necesariamente se debe cumplir que

$$\frac{2mV_0R^2}{\hbar^2} > \frac{\pi}{2}.$$

Este resultado implica que, dado un potencial esférico y atractivo en 3D, existe un valor mínimo para su profundidad a fin de que permita la formación de un estado ligado. Visto de otra forma, el hecho de que un potencial sea atractivo no es condición suficiente para permitir un estado ligado.

4.6. Efecto túnel

Estudiemos esta vez el comportamiento de un haz de partículas incidiendo sobre una barrera de potencial definida por

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 & \text{Región 1} \\ V_0 & 0 \leq x \leq d & \text{Región 2} \\ 0 & d < x & \text{Región 3} \end{cases} \quad (4.21)$$

Veremos que, al igual que en el caso anterior, existe una probabilidad no nula de que la partícula se encuentre al interior de la barrera, aun estando prohibido desde el punto de vista clásico. No solo eso, sino además existe una probabilidad finita de que las partículas incidentes

crucen la barrera de potencial, dando cuenta de flujo no nulo al otro lado de la barrera. A este fenómeno se le denomina *efecto túnel*,

El haz es de energía E e incide desde la izquierda. Analizaremos el caso $E < V_0$, dejando propuesto el estudio del caso $E > V_0$. Escribimos la ecuación de Schrödinger ($\hbar = 1$)

$$-\frac{1}{2m}\phi'' + V\phi = E\phi.$$

En la Fig. (4.4) se ilustra el perfil del potencial, ante el cual consideraremos una onda de partículas proveniente desde la izquierda con energía $E < V_0$. Clásicamente una partícula

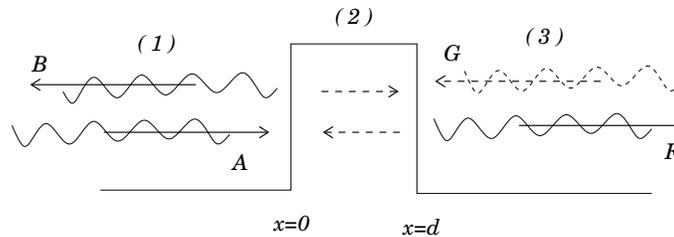


Figura 4.8: Ondas de partículas ante una barrera de potencial.

está impedida de cruzar la barrera de potencial, conllevando a un rebote perfecto. El cruce sólo resulta posible si la energía de la partícula es mayor que el potencial, el cual sólo atenúa la energía cinética del movimiento mientras transita por la barrera. Ninguno de estos dos comportamientos se da desde un punto de vista cuántico. Veremos que, cuando la energía cinética es menor que la potencial, existe una probabilidad finita de que la partícula cruce la barrera. Este es el denominado *efecto túnel*, el que permite explicar la sistemática de los decaimientos α de núcleos atómicos radiactivos. Más recientemente, este conocimiento constituye la base para el desarrollo de microscopios de efecto túnel. Este último ha sido de enorme importancia en el estudio de la superficie de conductores a escalas atómicas.

Dadas las discontinuidades del potencial en $x = 0$, y $x = d$, conviene escribir la ecuación diferencial por sectores cuyas funciones respectivas se denotan por ϕ_1 , ϕ_2 y ϕ_3 . Obtenemos

$$\text{Sector 1)} \quad \phi_1'' + 2mE\phi_1 = 0 \quad \Rightarrow \quad \phi_1(x) = \underbrace{A e^{ikx}}_{(\rightarrow)} + \underbrace{B e^{-ikx}}_{(\leftarrow)}; \quad (4.22)$$

$$\text{Sector 2)} \quad \phi_2'' - 2m \underbrace{(V_0 - E)}_{>0} \phi_2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \phi_2(x) = \underbrace{C e^{Kx}}_{(\nearrow)} + \underbrace{D e^{-Kx}}_{(\searrow)}. \quad (4.23)$$

$$\text{Sector 3)} \quad \phi_3'' + 2mE\phi_3 = 0 \quad \Rightarrow \quad \phi_3(x) = \underbrace{F e^{ikx}}_{(\rightarrow)} + \underbrace{G e^{-ikx}}_{(\leftarrow)}. \quad (4.24)$$

En este desarrollo hemos definido $k = \sqrt{2mE}$, y $K = \sqrt{2m(V_0 - E)}$. Además, puesto que las ondas inciden desde la izquierda, entonces la constante G debe ser nula, de otro modo

estamos permitiendo la propagación de ondas desde la izquierda, lo que no es el caso a menos que se modele una fuente para tal propósito.

Imponemos continuidad de la función de onda y su derivada en todo el dominio. En $x = 0$, $\phi_1 = \phi_2$; $\phi'_1 = \phi'_2$. Denotando $\eta = k/K$, obtenemos

$$\left. \begin{aligned} A + B &= C + D \\ ik(A - B) &= K(C - D) \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} A(1 + i\eta) + B(1 - i\eta) &= 2C \\ A(1 - i\eta) + B(1 + i\eta) &= 2D \end{aligned} \quad (4.25)$$

También exigimos continuidad de la función de onda y su derivada en $x = d$, lo que involucra a ϕ_2 y ϕ_3 . Se obtiene

$$\left. \begin{aligned} C e^{Kd} + D e^{-Kd} &= F e^{ikd} \\ K(C e^{Kd} - D e^{-Kd}) &= ik F e^{ikd} \end{aligned} \right\} \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} 2C e^{Kd} &= F e^{ikd} (1 + i\eta) \\ 2D e^{-Kd} &= F e^{ikd} (1 - i\eta) \end{aligned} \quad (4.26)$$

Combinando las Ecs. (4.25) y (4.26) para eliminar las constantes C y D , y además denotando $r = B/A$, y $t = F/A$, se obtienen

$$\begin{aligned} (1 + i\eta) + r(1 - i\eta) &= t e^{ikd} e^{-Kd} (1 + i\eta), \\ (1 - i\eta) + r(1 + i\eta) &= t e^{ikd} e^{Kd} (1 - i\eta). \end{aligned}$$

Este sistema de ecuaciones permite obtener las soluciones para t y r , dadas por

$$t = \frac{e^{-ikd}}{\cosh Kd + i \frac{1-\eta^2}{2\eta} \sinh Kd} \quad (4.27)$$

$$r = \frac{(1 + i\eta)}{(1 - i\eta)} (t e^{ikd} e^{-Kd} - 1). \quad (4.28)$$

En la práctica interesan las probabilidades de transmisión $T = |t|^2$ y reflexión $R = |r|^2$. Para éstos es directo verificar que

$$T = \frac{\Gamma}{\Gamma + \sinh^2(Kd)}, \quad R = \frac{\sinh^2(Kd)}{\Gamma + \sinh^2(Kd)}, \quad (4.29)$$

donde $\Gamma = 4E(V_0 - E)/V_0^2$. Observe que $R + T = 1$.

Examinemos el comportamiento de T para distintos valores de la energía y características de la barrera de potencial. En este análisis es conveniente introducir el parámetro adimensional $s = E/V_0$, que caracteriza la energía del haz en relación a la altura del potencial. Para la

situación descrita, $0 < s < 1$. Con esta definición $\Gamma = 4s(1 - s)$. La otra variable a considerar es Kd , la cual descomponemos como $Kd = \sqrt{2m(V_0 - E)} d \equiv b\sqrt{1 - s}$, con $b = \sqrt{2mV_0}d^2$, un parámetro adimensional. Lo útil de esta descomposición es que b resume información sobre el potencial: su altura y ancho. Con esto el coeficiente de transmisión se reduce a una función de b y s , o sea $T = T(b, s)$,

En la Fig. (4.9) se muestran curvas para T como función de s , para cinco valores de b entre 0.5 y 2.5. Observemos que para todos los valores de b el coeficiente de transmisión aumenta con la energía expresada en s . Por otro lado notamos que a medida que b aumenta, las curvas para T denotan disminución de la transmisión. Este resultado es también esperable, puesto que mientras más ancho o alto es el potencial b aumenta, dando cuenta de la disminución de la probabilidad de cruzar la barrera.

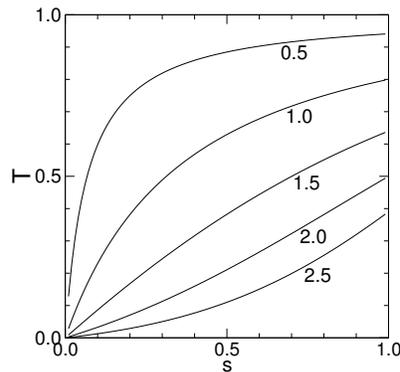


Figura 4.9: Coeficiente de transmisión como función de s para distintos valores de b .

Teniendo en mente estos resultados, si las partículas incidentes fuesen electrones la corriente hacia la derecha será proporcional al coeficiente de transmisión. Entonces, una medición de la corriente permite obtener información sobre la geometría de la barrera. El microscopio de efecto túnel se basa en esta idea, donde la barrera de potencial da cuenta del espacio entre la superficie de un metal a estudiar y una punta conductora conectada a un circuito eléctrico. El desplazamiento de la punta es controlado. La corriente de electrones será función de la separación entre la punta y el metal. Mediante el barrido de la punta sobre el metal, manteniendo sus desplazamientos sobre un plano, es posible dar cuenta de la topografía del metal en estudio.

El efecto túnel también fué utilizada por George Gamow para explicar el decaimiento radiactivo α de algunos núcleos atómicos. En su modelo, para que partículas α (helio-4 doblemente ionizado) abandonen el núcleo atómico ellas deben cruzar una barrera consistente en una cresta de repulsión coulombiana. Desde un punto de vista clásico estas partículas estarían totalmente impedidas de abandonar el núcleo. Sin embargo el efecto túnel permite el

escape de estas partículas al exterior, dando cuenta de una manera sorprendente la sistemática detrás de este fenómeno.

4.7. El oscilador armónico

Clásicamente representamos la energía potencial de un oscilador mediante $V(x) = kx^2/2$, donde k representa la constante elástica del resorte. Si la masa constreñida por el resorte es m , la frecuencia natural del sistema es $\omega = \sqrt{k/m}$. Entonces, una forma alternativa para representar la energía potencial para el mismo sistema es mediante $V = m\omega^2 x^2/2$. Desde el punto de vista de la mecánica clásica la energía E del sistema es controlable externamente. Una vez fija esta cantidad, el cuerpo constreñido por el resorte experimenta oscilaciones de amplitud $\sqrt{2E/m\omega^2}$, sin pérdida de energía si el sistema es ideal. En la Fig. 4.10 los puntos P y Q denotan los puntos de retorno para el movimiento de un cuerpo afectado por una fuerza elástica. La energía del sistema es controlable externamente mediante condiciones iniciales

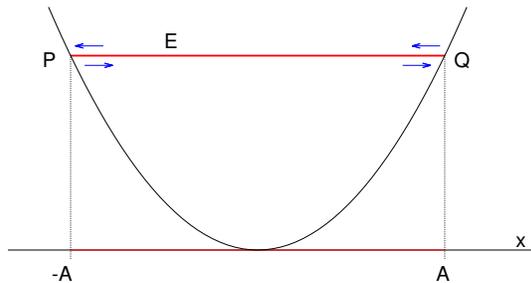


Figura 4.10: Movimiento clásico de un cuerpo constreñido por una fuerza elástica.

adecuadas para el sistema. Una vez definida la energía, el cuerpo queda absolutamente imposibilitado de alcanzar cualquier punto más allá de los puntos de retorno. Veremos que en el caso del oscilador cuántico la energía del oscilador no la controlamos absolutamente, y que existe una probabilidad finita de encontrar la partícula más allá de los límites clásicos de oscilación.

Para construir un oscilador cuántico comenzamos considerando el potencial clásico $V = m\omega^2 x^2/2$, a partir del cual definimos el operador potencial en espacio de coordenadas

$$\hat{V} = \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{x}^2 .$$

Un resultado notable para este modelo es que el espectro de energía del sistema es discreto. En otras palabras, la energía que aporta (emite) o recibe (absorbe) el sistema no es continua (gradual) sino en unidades, 'paquetes' o *cuanta* ($\kappa\beta\alpha\nu\tau\alpha$). Se obtiene también que la energía

de separación entre niveles es $\hbar\omega$, que el mínimo de energía es no nulo, y que la función de onda del estado fundamental es una gaussiana.

4.7.1. Cota para la energía del estado fundamental

Antes de entrar en el terreno de las ecuaciones diferenciales, establezcamos una cota para la energía base del espectro. Para ello consideremos la ecuación de Schrödinger en estado estacionario

$$\begin{aligned} \hat{H}\phi_0 = E_0\phi_0 &= \frac{1}{2m}\hat{p}_x^2\phi_0 + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2\phi_0 & / \int dx \phi_0^* \times \\ \int dx \phi_0^* E_0\phi_0 &= \frac{1}{2m} \int dx \phi_0^* \hat{p}_x^2 \phi_0 + \frac{1}{2} m \omega^2 \int dx \phi_0^* \hat{x}^2 \phi_0 \end{aligned}$$

Denotando $\int dx \phi_0^* \cdots \phi_0 = \langle \cdots \rangle$ y considerando ϕ_0 normalizada, entonces

$$E_0 = \frac{1}{2m} \langle \hat{p}_x^2 \rangle + \frac{1}{2} m \omega^2 \langle \hat{x}^2 \rangle \quad (4.30)$$

Recordamos además que si \hat{A} es un operador, entonces la dispersión ΔA está dada por

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

Con ésto,

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{1}{2m} [(\Delta p_x)^2 + \langle \hat{p}_x \rangle^2] + \frac{1}{2} m \omega^2 [(\Delta x)^2 + \langle \hat{x} \rangle^2] & \Rightarrow \\ E_0 &\geq \frac{1}{2m} (\Delta p_x)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 (\Delta x)^2 . \end{aligned} \quad (4.31)$$

Pero sabemos que $(\Delta x)^2 (\Delta p_x)^2 \geq \hbar^2/4$, con lo cual $(\Delta x)^2 \geq \hbar^2/4 (\Delta p_x)^2$. Sustituyendo en la desigualdad para E_0 tenemos

$$E_0 \geq \frac{1}{2m} (\Delta p_x)^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \frac{\hbar^2}{4 (\Delta p_x)^2} . \quad (4.32)$$

El comportamiento de E_0 como función de $(\Delta p_x)^2$ se ilustra en la figura (4.11), cuyo mínimo se puede obtener imponiendo derivada nula para la igualdad. Ello conduce a

$$E_0 \geq \frac{1}{2} \hbar \omega .$$

Ejercicio 4.10 Siguiendo el procedimiento anterior, estime una cota para la energía del estado fundamental del átomo de hidrógeno.

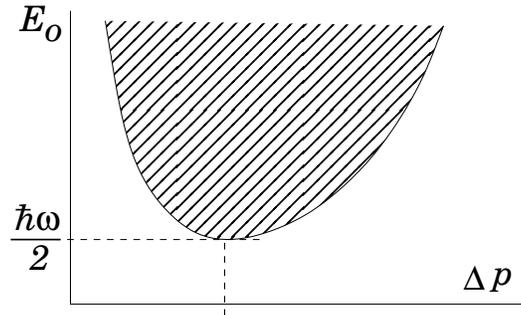


Figura 4.11: Dominio de energía permitida para el estado fundamental.

4.7.2. Espectro del oscilador y los polinomios de Hermite

Buscamos ahora soluciones a la ecuación de Schrödinger para el oscilador mediante técnicas para ecuaciones diferenciales ordinarias. En representación de coordenadas resolvemos

$$-\phi'' + \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} x^2 \phi = \frac{2mE}{\hbar^2} \phi. \quad (4.33)$$

Hacemos un cambio de variables en x a un parámetro adimensional. Así, sean

$$\begin{aligned} \xi &= \sqrt{m\omega/\hbar} x, \\ \phi(x) &= u(\xi), \\ \alpha &= 2E/\hbar\omega, \end{aligned}$$

entonces tenemos

$$-u'' + \xi^2 u = \alpha u. \quad (4.34)$$

Intentemos $u = e^\lambda H$, con λ y H funciones de ξ . Derivando, sustituyendo y reagrupando términos se obtiene

$$H'' + 2\lambda'H' + (\lambda'^2 + \lambda'' - \xi^2 + \alpha) H = 0. \quad (4.35)$$

Por ahora λ es una función arbitraria. Sin embargo la podemos escoger de modo que en el tercer término del lado izquierdo de la ecuación anterior no aparezcan términos en ξ . O sea,

$$\lambda'^2 + \lambda'' - \xi^2 = \text{Cte.}$$

Por inspección observamos que $\lambda_\pm = \pm\xi^2/2$, son soluciones. Optemos por $\lambda = -\xi^2/2$, con lo que la ecuación para H se reduce a

$$H'' - 2\xi H' + (\alpha - 1) H = 0. \quad (4.36)$$

A este punto planteamos una solución en serie de Taylor de la forma

$$H(\xi) = \sum_{k=0} C_k \xi^k .$$

Derivando, sustituyendo y reordenando términos se obtiene la siguiente relación de recurrencia para los coeficientes de la serie

$$C_{k+2}(k+1)(k+2) = C_k(2k+1-\alpha) . \quad (4.37)$$

De ésta surgen dos secuencias que dan origen a las soluciones pares e impares.

- Pares: $C_0 = 1$ y $C_1 = 0$, conducente a $\sum_n C_{2n} \xi^{2n}$.
- Impares: $C_0 = 0$ y $C_1 = 1$, conducente a $\sum_n C_{2n+1} \xi^{2n+1}$.

Reescribamos entonces la relación de recurrencia según la paridad. Para aquella que involucra términos pares hacemos $k = 2n$, con $n = 0, 1, 2, \dots$ y $C_k = C_{2n} \equiv c_n$; para los términos impares hacemos $k = 2n + 1$, con $n = 0, 1, 2, \dots$ y $C_k = C_{2n+1} \equiv \bar{c}_n$. Así, las relaciones de recurrencia respectivas quedan expresadas por

$$\begin{aligned} \frac{C_{k+2}}{C_k} = \frac{2k+1-\alpha}{(k+1)(k+2)} &\rightarrow \frac{c_{n+1}}{c_n} = \frac{4n+1-\alpha}{(2n+1)(2n+2)}, & \text{Pares} \\ &\rightarrow \frac{\bar{c}_{n+1}}{\bar{c}_n} = \frac{4n+2-\alpha}{(2n+2)(2n+3)}. & \text{Impares} \end{aligned}$$

En ambos casos los términos de orden superior de la serie, para n grande, escalan como

$$\frac{c_{n+1}}{c_n} \sim \frac{\bar{c}_{n+1}}{\bar{c}_n} \sim \frac{1}{n},$$

lo que da cuenta de coeficientes del tipo $1/n!$ para los términos altos de la serie. Esto indica un comportamiento exponencial del tipo $H \sim e^{+\xi^2}$ para H . Aun multiplicando por $e^{-\xi^2/2}$ el comportamiento de $\phi = e^\lambda H$ resulta exponencialmente divergente y por lo tanto físicamente inaceptable.

No obstante lo anterior, es factible impedir tal crecimiento exponencial si la secuencia en la Ec. (4.37) se interrumpe para algún k . Esto es posible si α toma valores del tipo $2N + 1$, con N un entero positivo, deteniendo la secuencia en $k = N$. Planteamos entonces, $\alpha \rightarrow \alpha_N = 2N + 1$ para las soluciones físicamente aceptables. Haciendo contacto con las variables originales, donde $\alpha = 2E/\hbar\omega$, se obtiene el espectro para el oscilador armónico

$$E_N = \left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega .$$

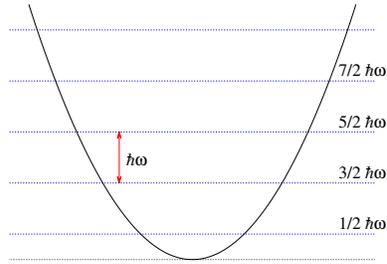


Figura 4.12: El espectro del oscilador armónico.

Como se observa, el espectro de energías para el oscilador armónico es discreto, con separación uniforme e igual a $\hbar\omega$ entre niveles consecutivos. Además, la energía del estado fundamental es $\frac{1}{2}\hbar\omega$, consistente con la estimación hecha en la sección anterior.

Las relaciones de recurrencia, correspondientes a autovalores $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$, definen los polinomios $H_n(\xi)$ de Hermite. Ellos satisfacen la ecuación

$$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + 2nH_n(\xi) = 0. \quad (4.38)$$

En particular, los polinomios H_n para los niveles más bajos,

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1 \\ H_1(\xi) &= 2\xi \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2 \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi \\ H_4(\xi) &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12 \end{aligned}$$

Los polinomios de Hermite satisfacen las siguientes propiedades,

$$H_n(-\xi) = (-1)^n H_n(\xi), \quad (4.39)$$

$$H_n' = 2n H_{n-1}, \quad (4.40)$$

$$H_{n+1} = 2\xi H_n - 2n H_{n-1}. \quad (4.41)$$

Su función generatriz está dada por

$$e^{-t^2+2tx} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(x), \quad (4.42)$$

de la cual se obtiene

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \left(\frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2}, \quad (4.43)$$

$$= e^{x^2/2} \left(x - \frac{d}{dx} \right)^n e^{-x^2/2}. \quad (4.44)$$

Así, se obtiene la relación de ortogonalidad

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} dx = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{nm} . \quad (4.45)$$

Con estas funciones construimos las funciones de onda, usando por conveniencia $\hbar = 1$,

$$\phi_n(x) = c_n e^{-m\omega x^2/2} H_n(\sqrt{m\omega} x) . \quad (4.46)$$

Normalizamos, $\int |\phi|^2 dx = 1 \rightarrow$

$$1 = |c_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-m\omega x^2} H_n^2(\sqrt{m\omega} x) dx = \frac{|c_n|^2}{\sqrt{m\omega}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi}_{2^n n! \sqrt{\pi}} . \quad (4.47)$$

Con ello

$$|c_n| = \left[\frac{m\omega}{2^{2n} \pi (n!)^2} \right]^{1/4} , \quad (4.48)$$

por lo cual,

$$\phi_n(x) = \left[\frac{m\omega}{2^{2n} \pi (n!)^2} \right]^{1/4} e^{-m\omega x^2/2} H_n(\sqrt{m\omega} x) . \quad (4.49)$$

De las propiedades de los polinomios de Hermite y su función generatriz, es posible demostrar las siguientes propiedades para el oscilador armónico

$$E_n = 2 \langle \hat{K} \rangle_n = 2 \langle \hat{V} \rangle_n = \hbar \omega (n + 1/2) \quad (4.50)$$

$$(\Delta x)_n^2 = \frac{\hbar}{m\omega} (n + 1/2) \quad (4.51)$$

$$(\Delta p)_n^2 = \hbar m\omega (n + 1/2) \quad (4.52)$$

$$\langle x^4 \rangle_n = \frac{3}{4} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^2 (2n^2 + 2n + 1) . \quad (4.53)$$

Haciendo uso de estas identidades es interesante notar las siguientes propiedades.

- a) $E_n/(\Delta x)_n^2 = m\omega^2$, o bien $E_n = \frac{1}{2}m\omega^2 (\sqrt{2}\Delta x_n)^2$. Esta expresión para la energía es análoga al resultado clásico, donde la energía del sistema es $E_{cl} = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2$. Por lo tanto $\sqrt{2}\Delta x_n$ guarda correspondencia con la amplitud clásica. Hay que tener presente, sin embargo, que en el sentido cuántico el concepto de amplitud del movimiento oscilatorio carece de significado.

- b) $\Delta p_n \Delta x_n = (\frac{1}{2} + n)\hbar \geq \frac{1}{2}\hbar$. Es decir, el producto de las incertezas en medir posición y momentum simultáneamente aumenta con la energía. Sólo el estado fundamental ($n = 0$) coincide con la incerteza mínima dada por el principio de incerteza de Heisenberg.
- c) $\Delta p_n = m\omega\Delta x_n$. Es decir, la dispersión espacial es proporcional a la dispersión del momentum.

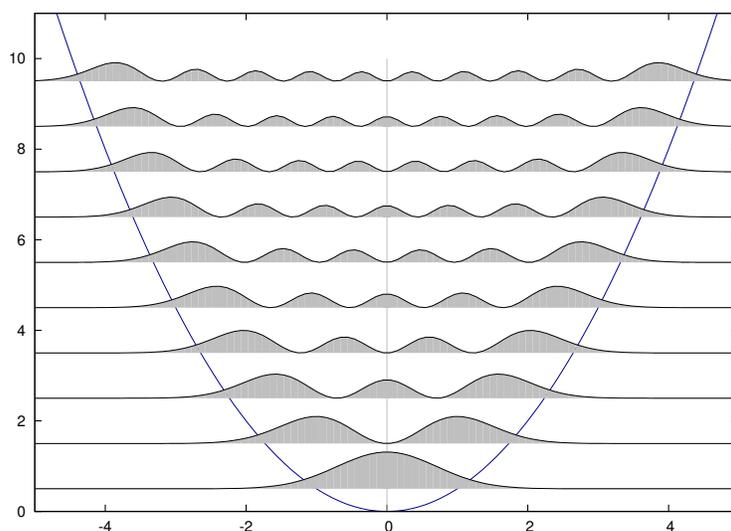


Figura 4.13: Densidad de probabilidad para los diez primeros autoestados del oscilador armónico.

Ejercicio 4.11 Para una partícula de masa m en un oscilador armónico clásico oscilando con amplitud A , demuestre que la densidad de probabilidad de encontrar la partícula entre x y $x + dx$ es $P(x) = 1/\pi\sqrt{A^2 - x^2}$. Contraste este resultado con el del oscilador cuántico para el estado fundamental $n = 0$, y para un nivel muy alto de energía, $n \rightarrow \infty$. Grafique tales funciones de onda para $n = 10$. Estime el valor de n para un bloque de 100 g de masa, oscilando con una frecuencia de 1 Hz y una amplitud de 10 cm.

Capítulo 5

Formalismo

5.1. Espacios vectoriales

Es conveniente a este punto revisar algunas nociones sobre espacios vectoriales a fin de explotar de mejor forma aspectos formales de la mecánica cuántica. Esta revisión no es exhaustiva ni rigurosa. Sólo se centra en aspectos más atinentes a las discusiones de más adelante. Introduciremos definiciones y discutiremos algunas propiedades.

- I.- *Espacio vectorial*. Un espacio vectorial lineal \mathcal{V} corresponde a un conjunto de elementos tales que cualquier combinación lineal de sus elementos resulta un elemento en \mathcal{V} . En otras palabras, si $\phi, \psi \in \mathcal{V} \Rightarrow (a\phi + b\psi) \in \mathcal{V}, \forall a, b \in \mathbb{C}$.

En lo que nos concierne hay dos espacios vectoriales que centrarán nuestra atención. Por una parte están los de funciones diferenciables y por otra los espacios de vectores discretos (de dimensión finita o infinita) de la forma

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

- II.- *Independencia lineal*. El conjunto $\{\phi_n\}$ es linealmente independiente si $\sum_n c_n \phi_n = 0 \Leftrightarrow c_n = 0 \forall n$.
- III.- *Dimensión del espacio*. Corresponde al número máximo de vectores linealmente independientes.

- IV.- *Base*. Consiste en un espacio maximal de vectores linealmente independientes.
- V.- *Completitud*. Significa que todo vector en \mathcal{V} puede ser expresado como combinación lineal de los elementos de la base.
- VI.- *Producto interno (o escalar)*. Si $\phi, \psi \in \mathcal{V}$, entonces (ψ, ϕ) representa un producto escalar entre ϕ y ψ cuando se satisfacen las siguientes cuatro condiciones:

- $(\psi, \phi) \in \mathbb{C}$;
- $(\psi, \phi) = (\phi, \psi)^*$;
- $(\psi, c_1 \phi_1 + c_2 \phi_2) = c_1 (\psi, \phi_1) + c_2 (\psi, \phi_2)$;
- $(\phi, \phi) \geq 0$.

Notar que la condición (b) implica que $(\phi, \phi) = (\phi, \phi)^*$, o sea que (ϕ, ϕ) es real. Puesto que $(\phi, \phi) \geq 0$, entonces se puede definir la norma de ϕ mediante

$$\|\phi\| = |\phi| = (\phi, \phi)^{1/2}.$$

Por otra parte, combinando (b) y (c) se obtiene la relación de antilinealidad,

$$(c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2, \phi) = c_1^* (\psi_1, \phi) + c_2^* (\psi_2, \phi).$$

- VII.- *Desigualdades*. De la definición de norma y propiedades del producto interno se obtienen las siguientes desigualdades,

- Desigualdad triangular: $|\phi| + |\psi| \geq |(\phi + \psi)|$;
- Variante de la desigualdad triangular, $|\phi| \times |\psi| \geq \frac{1}{2} [(\phi, \psi) + (\psi, \phi)]$;
- Desigualdad de Cauchy-Schwarz, $(\psi, \psi) (\phi, \phi) \geq |(\psi, \phi)|^2$;
- Variante de la desigualdad de Cauchy-Schwarz, $|\phi| \times |\psi| \geq \frac{1}{2} |(\phi, \psi) + (\psi, \phi)|$;

Esta última se puede demostrar siguiendo los siguientes pasos. Sea $z = (\psi, \phi)$, de modo que $z^* = (\phi, \psi)$. La desigualdad triangular aplicada a números complejos conduce a

$$|z| = \frac{1}{2} (|z| + |z^*|) \geq \frac{1}{2} |z + z^*|.$$

- VIII.- *Definiciones de productos internos*. Para los espacios vectoriales que nos interesan tomamos las siguientes definiciones de producto interno. En el caso de vectores discretos, donde

$$A = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix},$$

definimos

$$(B, A) = b_1^* a_1 + b_2^* a_2 + \dots \tag{5.1}$$

Para el caso de funciones $\psi(x)$ y $\phi(x)$, contínuas y derivables en el intervalo $[a, b]$, definimos

$$(\psi, \phi) = \int_a^b \psi^*(x) w(x) \phi(x) dx , \tag{5.2}$$

donde $w(x)$ es una función de peso real y positiva. Esta definición es extensible a funciones en 3D.

IX.- *Ortonormalidad.* El conjunto $\{\phi_i\}$ es ortonormal si $(\phi_i, \phi_j) = \delta_{ij}$.

X.- *Operadores lineales.* También referidas como transformaciones lineales. Se trata de aplicaciones L que toman como argumentos vectores de un espacio \mathcal{V} resultando en otro vector en el mismo espacio. Si ϕ_1 y ϕ_2 son elementos de \mathcal{V} , con λ un número complejo, entonces la linealidad se establece si

$$\begin{aligned} L[\phi_1 + \phi_2] &= L[\phi_1] + L[\phi_2] , \\ L[\lambda \phi_1] &= \lambda L[\phi_1] . \end{aligned} \tag{5.3}$$

En adelante, a una transformación lineal se le denotará como un operador, por ejemplo \hat{M} . Su acción sobre un vector lo denotamos $\hat{M}\phi$. La linealidad de \hat{M} se expresa

$$\hat{M}(\lambda_1\phi_1 + \lambda_2\phi_2) = \lambda_1\hat{M}\phi_1 + \lambda_2\hat{M}\phi_2 .$$

Un operador \hat{M} puede (aunque no siempre) tener inversa, la que se denota por \hat{M}^{-1} y que cumple $\hat{M}^{-1}\hat{M} = \hat{M}\hat{M}^{-1} = I$.

XI.- *Espacio dual.* Sea \mathcal{V} un espacio vectorial, entonces existe un *espacio dual* de funcionales lineales sobre \mathcal{V} los cuales le asignan un escalar (en general complejo) a cada ϕ en \mathcal{V} . Denotamos ésto por $F[\phi]$.

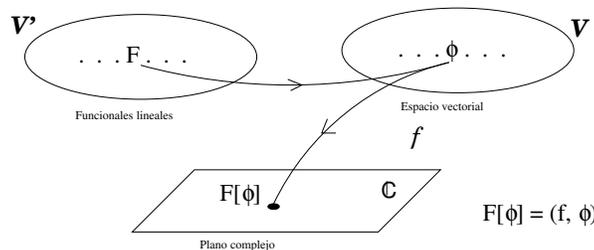


Figura 5.1: Funcionales del espacio dual.

La condición de linealidad implica que si a y b son escalares, entonces

$$F[a\phi + b\psi] = aF[\phi] + bF[\psi].$$

Los funcionales lineales también forman un espacio vectorial, que denominaremos \mathcal{V}' , si definimos la suma de dos funcionales como

$$(F_1 + F_2)[\psi] = F_1[\psi] + F_2[\psi].$$

XII.- *Teorema de Riesz.* Existe una correspondencia uno a uno entre los funcionales F en \mathcal{V}' y vectores f en \mathcal{V} , de modo que todo funcional lineal toma la forma $F[\psi] = (f_F, \psi)$. Esto muestra que hay un isomorfismo entre \mathcal{V} y \mathcal{V}' .

La demostración de este teorema, una equivalencia, va en dos direcciones. Primero demostramos que para todo f en V , la construcción $(f, \phi) \equiv F_f[\phi]$ es lineal. Esto es directo puesto que el producto interno (f, ϕ) es lineal. Falta probar el inverso, vale decir que a todo funcional F se le puede asociar un vector f_F en \mathcal{V} . Para ello consideremos una base ortonormal ϕ_n , de modo que cualquier vector en \mathcal{V} se expresa

$$\psi = \sum_n c_n \phi_n.$$

Entonces, haciendo uso de la linealidad del funcional F y ortonormalidad de ϕ_n desarrollamos,

$$\begin{aligned} F[\psi] &= \sum_n c_n F[\phi_n] \\ &= \sum_{n,j} c_j \delta_{nj} F[\phi_n] \\ &= \sum_{n,j} c_j (\phi_n, \phi_j) F[\phi_n] && \text{usando ortogonalidad} \\ &= \sum_j c_j \left(\sum_n F^*[\phi_n] \phi_n, \phi_j \right) && \text{usando antilinealidad} \\ &= \left(\sum_n F^*[\phi_n] \phi_n, \sum_j c_j \phi_j \right) && \text{usando linealidad} \\ &\equiv (f_F, \psi) \end{aligned}$$

En esta última línea identificamos $f_F = \sum_n F^*[\phi_n] \phi_n$, probando la existencia de f .

XIII.- *Espacio de Hilbert.* Un espacio vectorial \mathcal{H} se denomina espacio de Hilbert cuando está dotado de un producto interno (f, g) entre sus elementos, cumpliendo las cuatro condiciones listadas en VI, es decir

a) Linealidad: $(f, ag + bh) = a(f, g) + b(f, h)$, con $a, b \in \mathbb{C}$;

- b) Nexo dual/conjugado: $(f, g)^* = (g, f)$;
- c) Norma definida-positiva: $(f, f) \geq 0$; y
- d) Completitud: existe un conjunto de vectores linealmente independientes $\{f_n\}$, tal que todo elemento $f \in H$ se expresa como una combinación lineal los f_i

$$f = \sum_n c_n f_n .$$

5.2. Notación de Dirac: bras y kets

La notación de los *bra* y *ket* fué introducida por Paul Dirac en los años 20s y su uso es bastante generalizado en mecánica cuántica. En un sentido general, a los vectores en \mathcal{V} se les denomina *ket*, y se les denota por $|\psi\rangle$. A los funcionales lineales en el espacio dual se les identifica con los *bra*, y se les denota $\langle F|$. El escalar formado por el funcional aplicado a un vector ψ se denota por

$$F[\psi] = \langle f_F|\psi\rangle .$$

notación que no acarrea ambigüedad gracias al teorema de Riesz. La linealidad del funcional F se sintetiza de la forma

$$\langle \psi| \{ \alpha|\phi_1\rangle + \beta|\phi_2\rangle \} = \alpha \langle \psi|\phi_1\rangle + \beta \langle \psi|\phi_2\rangle$$

La antilinealidad, en tanto, conduce a la siguiente correspondencia

$$c_1|\phi_1\rangle + c_2|\phi_2\rangle \quad \rightarrow \quad c_1^* \langle \phi_1| + c_2^* \langle \phi_2| .$$

En el caso de un operador \hat{A} actuando sobre elementos del espacio vectorial, entonces,

$$\hat{A}(c_1|\phi_1\rangle + c_2|\phi_2\rangle) = c_1 \hat{A}|\phi_1\rangle + c_2 \hat{A}|\phi_2\rangle .$$

Es interesante observar como se representa la condición de completitud con la notación de Dirac. En ella todo vector del espacio vectorial se representa como combinación lineal de elementos de su base, vale decir

$$|\Psi\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle . \tag{5.4}$$

Los coeficiente se obtienen de la condición de ortonormalidad $\langle \phi_i|\phi_j\rangle = \delta_{ij}$. Al multiplicar por la izquierda $\langle \phi_m|$ tenemos

$$\langle \phi_m|\Psi\rangle = \sum_n c_n \langle \phi_m|\phi_n\rangle = c_m ,$$

donde hemos denotado $\langle x|y\rangle = \langle x|y\rangle$. Con ello $c_n = \langle \phi_n|\Psi\rangle$, que al ser reemplazado en la Ec. (5.4) conduce a

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_n \langle \phi_n|\Psi\rangle |\phi_n\rangle \\ &= \sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n|\Psi\rangle \Rightarrow \\ |\Psi\rangle &= \left(\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \right) |\Psi\rangle. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Puesto que esta identidad es válida para todo $|\Psi\rangle$, entonces la completitud se expresa por

$$\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| = \mathbb{1}. \quad (5.6)$$

Ejercicio 5.1 Expresar la ecuación $\hat{M}|\psi\rangle = |\phi\rangle$, en la base ortonormal $\{|u_n\rangle\}$.

Solución: Expandimos $|\psi\rangle$ y $|\phi\rangle$ en términos de los elementos de la base $\{|u_n\rangle\}$,

$$|\psi\rangle = \sum_j a_j |u_j\rangle, \quad |\phi\rangle = \sum_j b_j |u_j\rangle.$$

Sustituimos ambas expansiones en $\hat{M}|\psi\rangle = |\phi\rangle$ y multiplicamos por la izquierda $\langle u_k|$. Haciendo uso de ortogonalidad, $\langle u_k|u_j\rangle = \delta_{kj}$, obtenemos

$$\sum_j \langle u_k|\hat{M}|u_j\rangle a_j = b_k. \quad (5.7)$$

Con ello identificamos la ecuación matricial $\sum_j M_{kj} a_j = b_k$, donde $M_{kj} = \langle u_k|\hat{M}|u_j\rangle$.

Operador adjunto. Sea \hat{A} un operador y consideremos el producto vectorial $(\phi, \hat{A}\psi)$. Nos preguntamos por la existencia de un operador asociado a \hat{A} , que denotamos por \hat{A}^\dagger , que cumpla con la igualdad

$$(\phi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}^\dagger\phi, \psi). \quad (5.8)$$

A tal operador se le denomina *adjunto* de \hat{A} . En general, si \hat{A} está representada por sus componentes en cierta base, entonces su adjunto está dado por el transpuesto conjugado. En notación de Dirac observemos

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\phi\rangle \rightarrow \langle\psi|\hat{A}^\dagger = \langle\phi| \quad (5.9)$$

Las siguientes son algunas propiedades del adjunto

- a) $(\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A}$;
 b) $(c\hat{A})^\dagger = c^* \hat{A}^\dagger$;
 c) $(\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger$;
 d) $(\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger \hat{A}^\dagger$.

Ejercicio 5.2 Demuestre que $(\hat{A}\hat{B}\dots\hat{Y}\hat{Z})^\dagger = \hat{Z}^\dagger\hat{Y}^\dagger\dots\hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger$.

Operadores hermíticos. Cuando el adjunto de un operador \hat{A} coincide con el mismo operador, vale decir $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$, se dice que \hat{A} es hermítico o auto-adjunto. Los elementos diagonales de estos operadores son reales al igual que sus autovalores.

Transformaciones unitarias. Un operador \hat{M} representa una transformación cuando al ser aplicado sobre un elemento $|\psi\rangle$ del espacio vectorial resulta otro, $|\psi'\rangle = \hat{M}|\psi\rangle$, dentro del mismo espacio. En el caso de transformaciones unitarias ellas tienen la propiedad adicional de preservar la norma del vector transformado. Denotamos por U una transformación unitaria, entonces ella satisface

$$U^{-1} = U^\dagger.$$

En efecto, sea

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle,$$

entonces

$$\langle\psi'|\psi'\rangle = \langle\psi|\underbrace{U^\dagger U}_1|\psi\rangle = \langle\psi|\psi\rangle,$$

que demuestra la invariancia de la norma.

Examinemos el efecto de una transformación unitaria sobre operadores. Para ello consideremos el ket formado por $\hat{A}|\psi\rangle$ y le aplicamos una transformación unitaria U . Tenemos

$$U(\hat{A}|\psi\rangle) = U(\hat{A}U^\dagger U|\psi\rangle) = (U\hat{A}U^\dagger)U|\psi\rangle \equiv \hat{A}'|\psi'\rangle,$$

donde hemos denotado

$$|\psi'\rangle = U|\psi\rangle, \quad (5.10)$$

$$\hat{A}' = U\hat{A}U^\dagger. \quad (5.11)$$

Se puede verificar fácilmente que el producto de dos operadores unitarios es unitario. También se cumple que si \hat{A} es un operador hermítico y U unitario, entonces $U \hat{A} U^\dagger$ también es hermítico.

Una clase de transformaciones unitarias de interés la constituyen las transformaciones continuas. En general ellas dependen de un parámetro continuo, que podemos denotar λ . Entonces, $U = U(\lambda)$, conviniendo que

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} U(\lambda) = \mathbb{1}. \quad (5.12)$$

Podemos escribir a primer orden

$$U(\lambda) = \mathbb{1} + i\lambda \hat{G} + \dots,$$

donde \hat{G} da cuenta del primer término de la serie y que denominaremos, por razones que se verán más adelante, *generador*. Imponiendo unitariedad, $U^\dagger U = \mathbb{1}$, entonces

$$(\mathbb{1} - i\lambda \hat{G}^\dagger + \dots)(\mathbb{1} + i\lambda \hat{G} + \dots) = \mathbb{1},$$

de donde se infiere la hermiticidad del generador

$$\hat{G} = \hat{G}^\dagger. \quad (5.13)$$

En términos del generador, la transformación infinitesimal ($\lambda \rightarrow \epsilon$) de vectores $|\psi\rangle$ y operadores \hat{A} quedan expresadas

$$|\psi'\rangle = (\mathbb{1} + i\epsilon \hat{G})|\psi\rangle \rightarrow \delta|\psi\rangle = i\epsilon \hat{G}|\psi\rangle, \quad (5.14)$$

$$\hat{A}' \approx (\mathbb{1} + i\epsilon \hat{G}) \hat{A} (\mathbb{1} - i\epsilon \hat{G}) \rightarrow \delta \hat{A} = i\epsilon [\hat{G}, \hat{A}]. \quad (5.15)$$

Consideremos el caso de una transformación unitaria cuyo generador está dado por un operador \hat{G} , hermítico. Además, sea λ un parámetro real finito el cual es subdividido en N segmentos idénticos de longitud $\epsilon = \lambda/N$. De acuerdo a la Ec. (5.14), la acción del operador infinitesimal $(\mathbb{1} + i\epsilon \hat{G})$ sobre $|\psi_0\rangle$ genera un nuevo vector que denominaremos $|\psi_1\rangle$, de modo que

$$|\psi_1\rangle = (\mathbb{1} + i\epsilon \hat{G})|\psi_0\rangle \equiv \hat{U}_\epsilon |\psi_0\rangle.$$

Al aplicar N veces la misma transformación, suponiendo \hat{G} independiente del parámetro λ , entonces

$$|\psi_N\rangle = \left(\mathbb{1} + i \frac{\lambda \hat{G}}{N} \right)^N |\psi_0\rangle.$$

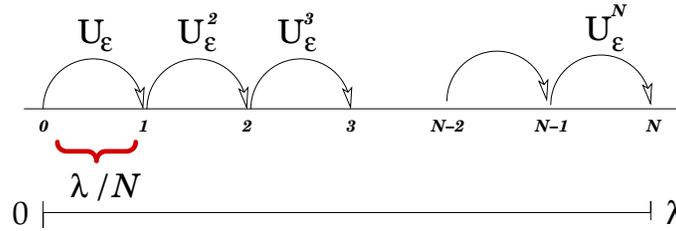


Figura 5.2: Aplicación sucesiva de N transformaciones $U_{\lambda/N}$.

Estas N aplicaciones se ilustran en la Fig. (5.2), las cuales compuestas N veces resultan en U_ϵ^N . Hacemos ahora $N \rightarrow \infty$ y rotulamos $|\psi_N\rangle \rightarrow |\psi_\lambda\rangle$, de modo que identificamos

$$|\psi_\lambda\rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\mathbb{1} + i \frac{\lambda \hat{G}}{N} \right)^N |\psi_0\rangle \equiv e^{i\lambda \hat{G}} |\psi_0\rangle. \tag{5.16}$$

resultado que explicita la correspondencia entre el operador unitario U y su generador \hat{G}

$$U = e^{i\lambda \hat{G}}. \tag{5.17}$$

En general, la identificación anterior para la exponencial de un operador lineal \hat{A} es consistente con la expansión (conviniendo $\hat{A}^0 = I$)

$$e^{\hat{A}} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \hat{A}^k.$$

Productos externos. En la notación de Dirac ellos corresponden a construcciones de la forma $\hat{M} = |\Psi\rangle\langle\phi|$. Claramente se trata de un operador, pues al actuar sobre un vector $|\sigma\rangle$ se tiene

$$\hat{M}|\sigma\rangle = |\Psi\rangle\langle\phi|\sigma\rangle = |\Psi\rangle\langle\phi|\sigma\rangle,$$

que claramente es un vector. Este producto recibe el nombre de *outer product* en inglés.

Ejercicio 5.3 Demuestre que $e^{\hat{U}\hat{A}\hat{U}^{-1}} = \hat{U} e^{\hat{A}} \hat{U}^{-1}$.

Ejercicio 5.4 Demuestre que $\hat{A} e^{\hat{B}\hat{A}} = e^{\hat{A}\hat{B}} \hat{A}$.

Ejercicio 5.5 Si $[\hat{A}, \hat{B}]$ conmuta con \hat{A} y con \hat{B} , entonces $e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}+[\hat{A},\hat{B}]/2}$.

Teorema I.-

Si $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^*$, con $|\psi\rangle$ arbitrario, entonces $\langle \phi_1 | \hat{A} | \phi_2 \rangle = \langle \phi_2 | \hat{A} | \phi_1 \rangle^*$, $\forall |\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle$, por lo tanto $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$.

Demostración.- Expresemos $|\psi\rangle$ como una combinación lineal de dos vectores arbitrarios, $|\phi_1\rangle$ y $|\phi_2\rangle$: $|\psi\rangle = a|\phi_1\rangle + b|\phi_2\rangle$, con a y b dos complejos también arbitrarios. Sustituyendo y expandiendo obtenemos las siguientes ecuaciones

$$\begin{aligned}\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle &= |a|^2 \langle \phi_1 | \hat{A} | \phi_1 \rangle + |b|^2 \langle \phi_2 | \hat{A} | \phi_2 \rangle + a^* b \langle \phi_1 | \hat{A} | \phi_2 \rangle + ab^* \langle \phi_2 | \hat{A} | \phi_1 \rangle, \\ \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^* &= |a|^2 \langle \phi_1 | \hat{A} | \phi_1 \rangle + |b|^2 \langle \phi_2 | \hat{A} | \phi_2 \rangle + ab^* \langle \phi_1 | \hat{A} | \phi_2 \rangle^* + a^* b \langle \phi_2 | \hat{A} | \phi_1 \rangle^*.\end{aligned}$$

Imponiendo $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^*$, considerando $(a = 1; b = 1)$ y $(a = 1; b = i)$, se tienen

$$\begin{aligned}\langle \phi_1 | \hat{A} | \phi_2 \rangle + \langle \phi_2 | \hat{A} | \phi_1 \rangle &= \langle \phi_1 | \hat{A} | \phi_2 \rangle^* + \langle \phi_2 | \hat{A} | \phi_1 \rangle^* \\ \langle \phi_1 | \hat{A} | \phi_2 \rangle - \langle \phi_2 | \hat{A} | \phi_1 \rangle &= -\langle \phi_1 | \hat{A} | \phi_2 \rangle^* + \langle \phi_2 | \hat{A} | \phi_1 \rangle^*\end{aligned}$$

Sumando ambas igualdades se obtiene $\langle \phi_1 | \hat{A} | \phi_2 \rangle = \langle \phi_2 | \hat{A} | \phi_1 \rangle^*$. Puesto que $|\phi_1\rangle$ y $|\phi_2\rangle$ son arbitrarios, entonces $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$. Notar que la condición impuesta sobre $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ es más restrictiva que la que se obtiene para $\langle \phi_1 | \hat{A} | \phi_2 \rangle$.

5.3. Autovalores y autovectores

Sea \hat{A} un operador lineal. Entonces la ecuación

$$\hat{A}|\phi\rangle = a|\phi\rangle,$$

representa una ecuación de valores propios. Al escalar a se le denomina valor propio (o autovalor) y a $|\phi\rangle$ el vector propio correspondiente. A fin de hacer explícita esta correspondencia entre a y $|\phi\rangle$ rotulamos ϕ con el subíndice a : $|\phi\rangle \rightarrow |\phi_a\rangle$. Esta notación puede hacerse aun más compacta si prescindimos de ϕ , un símbolo que no tiene rol en el problema. Así, denotamos $|\phi_a\rangle \equiv |a\rangle$. Entonces, la ecuación de valores propios se expresa

$$\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle,$$

Teorema II.-

Si \hat{A} es hermítico, entonces sus autovalores son reales.

La demostración a este teorema es muy sencilla. Sea $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$ y multipliquemos $\langle a|$ por la izquierda. Entonces,

$$\langle a|\hat{A}|a\rangle = a\langle a|a\rangle.$$

Tomando conjugado, $\langle a|\hat{A}^\dagger|a\rangle = a^*\langle a|a\rangle$, usando $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, se obtiene $a = a^*$.

Teorema III.-

Los autovectores asociados a autovalores diferentes son ortogonales.

Demostramos considerando las ecuaciones de valores propios $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$, y $\hat{A}|b\rangle = b|b\rangle$. Proyectamos por la izquierda con $\langle b|$ y $\langle a|$, respectivamente. Notando que $\langle b|\hat{A}|a\rangle = \langle a|\hat{A}|b\rangle^*$, además de que a y b son reales por el hecho de que \hat{A} es hermítico, obtenemos

$$0 = (a - b)\langle a|b\rangle,$$

De esta igualdad se ve que si $a \neq b$, entonces $\langle a|b\rangle = 0$, vale decir $|a\rangle$ y $|b\rangle$ son ortogonales.

5.4. Representaciones

En nuestra revisión de la mecánica ondulatoria vimos que el momentum y la posición desempeñan un rol especial. En particular, ambos observables llevan asociados los operadores hermíticos \hat{p}_x y \hat{x} , respectivamente, con sus respectivas extensiones a 3D. Analicemos el caso 1D y consideremos la siguiente ecuación de valores propios para el operador posición \hat{x}

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle.$$

Sin perder generalidad podemos suponer autovalores discretos, $\{|x_n\rangle\}$ cumpliendo ortogonalidad y completitud,

$$\langle x_n|x_m\rangle = \delta_{nm}, \quad \sum_n |x_n\rangle\langle x_n| = \mathbb{1}.$$

Consideremos entonces un estado $|\Psi\rangle$ y lo expresamos en términos de los elementos de la base, vale decir $\{|x_n\rangle\}$, $|\Psi\rangle = \sum_n C_n |x_n\rangle$. Los coeficientes de esta expansión están dados por $C_n = \langle x_n|\Psi\rangle$. Sustituyendo C_n en la expansión para $|\Psi\rangle$

$$|\Psi\rangle = \sum_n \langle x_n|\Psi\rangle |x_n\rangle = \sum_n |x_n\rangle\langle x_n|\Psi\rangle.$$

Lo anterior en virtud a que $\langle x_n | \Psi \rangle$ es un escalar. El paso al continuo logra hacerse haciendo $\sum_n \rightarrow \int$, con lo cual

$$|\Psi\rangle = \sum_n |x_n\rangle \langle x_n | \Psi \rangle \quad \longrightarrow \quad |\Psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle dx \langle x | \Psi \rangle .$$

Con esto identificamos la relación de completitud

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle dx \langle x| = \mathbb{1} , \quad (5.18)$$

donde $\mathbb{1}$ denota la identidad. A fin de inferir $\langle x' | x \rangle$, consideremos la identidad

$$|\Psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |x\rangle dx \langle x | \Psi \rangle ,$$

Proyectando $\langle x' |$ por la izquierda y denotando $\langle x | \Psi \rangle \equiv \Psi(x)$ obtenemos,

$$\Psi(x') = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x' | x \rangle \Psi(x) ,$$

relación válida para todo Ψ , por lo que necesariamente $\langle x' | x \rangle$ corresponde delta de Dirac,

$$\langle x' | x \rangle = \delta(x' - x) . \quad (5.19)$$

Un procedimiento idéntico conduce a las relaciones análogas en representación de momentum,

$$\begin{aligned} \langle p' | p \rangle &= \delta(p' - p) , \\ \int_{-\infty}^{\infty} |p\rangle dp \langle p| &= \mathbb{1} \end{aligned}$$

En la Ec. (3.71) establecimos la relación entre las funciones de onda en espacio de coordenadas y de momentum. Esta relación resulta consistente en el formalismo de Dirac si identificamos $\langle p | \Psi \rangle = \tilde{\Psi}(p)$, y $\langle x | \Psi \rangle = \Psi(x)$, donde introducimos una *tilde* en $\tilde{\Psi}(p)$ a fin de indicar que tal función se expresa en representación de momentum.

Buscamos ahora una forma explícita para $\langle x | p \rangle$. A fin de simplificar la notación, en adelante omitiremos los límites de integración $\pm\infty$ en $\int_{-\infty}^{\infty} \dots$, a menos que sea necesario explicitarlos. Consideremos

$$\begin{aligned} \int |p\rangle dp \langle p | \Psi \rangle &= |\Psi\rangle & / & \quad \langle x | \\ \int \langle x | p \rangle dp \tilde{\Psi}(p) &= \Psi(x) . \end{aligned} \quad (5.20)$$

Utilizando

$$\tilde{\Psi}(p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int dx e^{-ipx'/\hbar} \Psi(x'),$$

entonces,

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int dp \int dx' \langle x|p\rangle e^{-ipx'/\hbar} \Psi(x') = \Psi(x).$$

Reordenando términos,

$$\int dx' \left[\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int dp \langle x|p\rangle e^{-ipx'/\hbar} \right] \Psi(x') = \Psi(x),$$

de donde identificamos la delta de Dirac en el integrando,

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \int dp \langle x|p\rangle e^{-ipx'/\hbar} = \delta(x' - x). \quad (5.21)$$

Multiplicando por $e^{ip'x'/\hbar}$ e integrando en x' , luego de utilizar $\int dz e^{i(p'-p)z/\hbar} = 2\pi\hbar\delta(p' - p)$, se obtiene

$$\langle x|p\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{1/2}} e^{ipx/\hbar}, \quad (5.22)$$

cuya extensión a 3D es

$$\langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}. \quad (5.23)$$

Claramente se cumple

$$\langle \mathbf{p}|\mathbf{r}\rangle = \langle \mathbf{r}|\mathbf{p}\rangle^* = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}. \quad (5.24)$$

Ejercicio 5.6 Suponga las siguientes condiciones de ortogonalidad y completitud en espacio de coordenadas: $\langle x'|x\rangle = \delta(x' - x)$; $\int |x\rangle dx \langle x| = 1$. Además se adopta la convención $\langle x|k\rangle = e^{ikx}$. Determine para este caso $\langle k'|k\rangle$ y $\int |k\rangle dk \langle k|$.

Ejercicio 5.7 Considere la función de onda $|\phi\rangle$ definida en espacio de momentum (3D) mediante $\langle \mathbf{p}|\phi\rangle = B/(1 + p^2/m^2)^2$. Normalice la función de onda y determine $\langle \mathbf{r}|\phi\rangle$. Calcule los valores de expectación $\langle \hat{p}^2 \rangle_\phi$ y $\langle \hat{r}^2 \rangle_\phi$. Analice como cambia la forma de las funciones de onda (en espacio de coordenadas y momentum) ante incrementos de m .

5.5. Representación de operadores

Si bien ya hemos visto la forma que toman los operadores de posición y momentum en representación de coordenadas y de momentum, es instructivo utilizar la notación de Dirac para reexaminarlos. Nuestro punto de partida está dado en la sección anterior, con las relaciones de ortogonalidad y completitud en 3D,

$$\langle \mathbf{r}' | \mathbf{r} \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}), \quad \int |\mathbf{r}\rangle d\mathbf{r} \langle \mathbf{r}| = \mathbb{1}, \quad (5.25)$$

$$\langle \mathbf{p}' | \mathbf{p} \rangle = \delta^{(3)}(\mathbf{p}' - \mathbf{p}), \quad \int |\mathbf{p}\rangle d\mathbf{p} \langle \mathbf{p}| = \mathbb{1}, \quad (5.26)$$

además de la Ec. (5.23) para $\langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle$. Recordar la notación $d\mathbf{r} \equiv d^3r$ y $d\mathbf{p} \equiv d^3p$

a) Momentum y energía cinética

Buscamos $\hat{\mathbf{p}}$ en representación de coordenadas. Para ello tendremos presente la ecuación de autovalores para la componente i del momentum,

$$\hat{p}_i |\mathbf{p}\rangle = p_i |\mathbf{p}\rangle.$$

Obsérvese el siguiente desarrollo autoexplicativo

$$\begin{aligned} \hat{p}_i |\mathbf{r}\rangle &= \hat{p}_i \left(\int |\mathbf{p}\rangle d\mathbf{p} \langle \mathbf{p}| \right) |\mathbf{r}\rangle \\ &= \int \hat{p}_i |\mathbf{p}\rangle d\mathbf{p} \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle \quad (\text{Linealidad}) \\ &= \int p_i |\mathbf{p}\rangle d\mathbf{p} \mathcal{N} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \quad (\text{Autovalor y } \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle) \\ &= \int |\mathbf{p}\rangle d\mathbf{p} p_i \mathcal{N} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \quad (\text{Reordenando}) \\ &= \int |\mathbf{p}\rangle d\mathbf{p} (+i\hbar \partial_i) \mathcal{N} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar} \quad (\text{Identidad}) \\ &= \int |\mathbf{p}\rangle d\mathbf{p} (+i\hbar \partial_i) \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle \\ &= (+i\hbar \partial_i) \int |\mathbf{p}\rangle d\mathbf{p} \langle \mathbf{p} | \mathbf{r} \rangle \\ &= (+i\hbar \partial_i) |\mathbf{r}\rangle, \end{aligned}$$

con lo cual

$$\hat{p}_i |\mathbf{r}\rangle = (+i\hbar \partial_i) |\mathbf{r}\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{\mathbf{p}} |\mathbf{r}\rangle = (+i\hbar \nabla) |\mathbf{r}\rangle. \quad (5.27)$$

Mediante un procedimiento totalmente análogo se puede demostrar que

$$\langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} = (-i\hbar\nabla) \langle \mathbf{r} | , \quad (5.28)$$

identidad de la cual inferimos

$$\langle \mathbf{r} | \hat{\mathbf{p}} | \Psi \rangle = -i\hbar\nabla \langle \mathbf{r} | \Psi \rangle = -i\hbar\nabla \Psi(\mathbf{r}) . \quad (5.29)$$

Este último resultado también se obtiene considerando la Ec. (5.27) y usando $\langle \Psi | \mathbf{r} \rangle = \Psi^*(\mathbf{r})$. Podemos entonces representar el operador energía cinética en espacio de coordenadas, para el que se obtiene

$$\langle \mathbf{r} | \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{2m} | \Psi \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) . \quad (5.30)$$

b) El potencial

Cuando presentamos la ecuación de Schrödinger observamos que el término de energía potencial se presenta de la forma $V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r})$. Examinemos el término de energía potencial con la notación de Dirac. Para simplificar notación consideremos un caso 1D y estudiemos el término $\hat{V}|\Psi\rangle$ en representación de coordenadas, para lo cual proyectamos $\langle x | \hat{V} | \Psi \rangle$. Se resalta el hecho de que \hat{V} no es una función sino un operador. Ahora, entre \hat{V} y el ket $|\Psi\rangle$ expandimos $\int |x'\rangle dx' \langle x'|$, sustituimos $\langle x' | \Psi \rangle = \Psi(x')$ y obtenemos

$$\langle x | \hat{V} | \Psi \rangle = \int \langle x | \hat{V} | x' \rangle \Psi(x') dx' . \quad (5.31)$$

El término $\langle x | \hat{V} | x' \rangle$ representa elementos de matriz del potencial, los que dependen en principio de las dos coordenadas x y x' . Tal dependencia se puede expresar por

$$\langle x | \hat{V} | x' \rangle \equiv \mathcal{V}(x, x') ,$$

Si uno retiene esta doble dependencia entonces estamos frente a un potencial *no local*. Tales tipos de potenciales ocurren en la naturaleza. Sin embargo, en los sistemas más simples y comunes el potencial es local, lo que típicamente se expresa de la forma

$$\mathcal{V}(x, x') = \delta(x' - x) v(x) ,$$

con $v(x)$ una función de la coordenada x . En este caso entonces

$$\langle x | \hat{V} | \Psi \rangle = \int \delta(x' - x) v(x) \Psi(x') dx' = v(x) \Psi(x) . \quad (5.32)$$

Resulta conveniente, entonces, explicitar la condición de localidad de un potencial \hat{V} mediante

$$\hat{V} | \mathbf{r} \rangle = V(\mathbf{r}) | \mathbf{r} \rangle ,$$

con $V(\mathbf{r})$ una función sólo de \mathbf{r} .

Ejercicio 5.8 Considere el vector $|\chi\rangle$ definido en representación de coordenadas (3D) mediante $\langle \mathbf{r}|\chi\rangle = e^{-\beta r^2}$, con β un parámetro real. Considere además el operador $\hat{W} = |\chi\rangle\Gamma\langle\chi|$. Determine los elementos de matriz de \hat{W} y \hat{W}^2 en las representaciones de coordenada y momentum.

5.6. La ecuación de Schrödinger revisitada

Con la notación de Dirac la ecuación de Schrödinger se expresa de la forma

$$\hat{H}|\Psi\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle. \quad (5.33)$$

El operador \hat{H} corresponde al hamiltoniano del sistema, que en el caso de una partícula de masa m interactuando con un campo queda formado por la suma de su energía cinética con el potencial, vale decir,

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}. \quad (5.34)$$

Los resultados de las secciones anteriores permiten el siguiente desarrollo, si el potencial es local,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}\right)|\Psi\rangle &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle & / & \langle \mathbf{r}| \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\langle \mathbf{r}|\Psi\rangle &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle \mathbf{r}|\Psi\rangle, & \Rightarrow & \\ \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\Psi(\mathbf{r}, t) &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}, t). & & \end{aligned}$$

En cuanto a la evolución temporal de Ψ , consideremos $|\Psi_0\rangle$ solución de la ecuación de Schrödinger en $t = 0$. Entonces,

$$|\Psi\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\Psi_0\rangle, \quad (5.35)$$

es solución de la misma ecuación $\forall t \geq 0$. A este punto resulta de interés considerar la ecuación de valores propios para el hamiltoniano

$$\hat{H}|\phi_n\rangle = E_n|\phi_n\rangle.$$

Si \hat{H} es hermítico, entonces podemos construir una base $|\phi_n\rangle$ ortornormal y completa. Resolviendo este problema, y dada la forma inicial de la función de onda, entonces

$$\langle \mathbf{r} | \Psi \rangle = \langle \mathbf{r} | \left(\sum_n |\phi_n\rangle \langle \phi_n| \right) e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\Psi_0\rangle. \quad (5.36)$$

Puesto que $\langle \phi_n | e^{-i\hat{H}t/\hbar} = \langle \phi_n | e^{-iE_n t/\hbar}$, resulta evidente que

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n C_n \phi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar} \quad (5.37)$$

donde $C_n = \langle \phi_n | \Psi_0 \rangle$, representa la amplitud de probabilidad de que en $t = 0$ la función de onda $|\Psi_0\rangle$ ocupe el estado $|\phi_n\rangle$.

Ejercicio 5.9 Considere el estado normalizado $|\Psi\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\Psi_0\rangle$, solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Demuestre que $\sum_n |c_n|^2 = 1$, donde $c_n = \langle \Psi_0 | n \rangle$, con $|n\rangle$ un autoestado del hamiltoniano.

Ejercicio 5.10 Demuestre que $\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \sum_n E_n |c_n|^2$, donde $\hat{H} | n \rangle = E_n | n \rangle$.

Ejercicio 5.11 Considere un electrón atrapado en un pozo de potencial de anchura a . En $t = 0$ su función de onda tiene forma armónica sin nodos en la mitad izquierda, con amplitud nula en la mitad de la derecha. Determine el instante en que la función de onda toma la forma ilustrada a la derecha del esquema de más abajo. Determine la frecuencia con que esta situación se repite y compárela con la frecuencia del estado fundamental.



5.7. El oscilador armónico en representación de energía

Consideremos nuevamente el oscilador armónico, pero esta vez diagonalizaremos el hamiltoniano mediante una técnica más formal. En ella haremos uso explícito del álgebra de los operadores que intervienen. Comencemos escribiendo el hamiltoniano,

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{p}_x^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2,$$

y definamos los operadores adimensionales \hat{P} y \hat{Q} ,

$$\hat{P} = \sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} \hat{p}_x, \quad \hat{Q} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x}. \quad (5.38)$$

Con estas definiciones,

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega \left(\hat{P}^2 + \hat{Q}^2 \right) .$$

Claramente los operadores \hat{P} y \hat{Q} satisfacen la regla de conmutación

$$\left[\hat{Q}, \hat{P} \right] = i . \quad (5.39)$$

Construyamos ahora los operadores a (bajada) y a^\dagger (subida) mediante

$$\begin{aligned} a &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{Q} + i\hat{P} \right) , \\ a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\hat{Q} - i\hat{P} \right) , \end{aligned}$$

los que cumplen con la regla de conmutación

$$a a^\dagger - a^\dagger a = [a, a^\dagger] = 1 . \quad (5.40)$$

Por otro lado, podemos expresar \hat{P} y \hat{Q} en términos de los operadores de subida y bajada

$$\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}}(a^\dagger + a) , \quad (5.41)$$

$$\hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}}(a^\dagger - a) . \quad (5.42)$$

Sustituyendo en el hamiltoniano y aplicando las reglas de conmutación para a y a^\dagger obtenemos

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega(a a^\dagger + a^\dagger a) = \hbar\omega(a^\dagger a + \frac{1}{2}) . \quad (5.43)$$

Esta estructura del hamiltoniano es muy sugerente a la luz del resultado obtenido para el espectro del oscilador armónico. Resulta conveniente entonces prestar atención al operador

$$\hat{N} \equiv a^\dagger a , \quad (5.44)$$

con el cual

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right) . \quad (5.45)$$

Por lo tanto el problema de la diagonalización de \hat{H} se reduce al de la diagonalización de \hat{N} . En esa línea, analicemos algunos resultados interesantes. Para ello construimos la ecuación de valores propios

$$\hat{N}|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle , \quad (5.46)$$

de la cual se infieren las siguientes propiedades.

a) Los autovalores satisfacen $\nu \geq 0$.

En efecto, consideremos $|\mu\rangle \equiv a|\nu\rangle$, entonces $\langle\mu| = \langle\nu|a^\dagger$. Multiplicando ambos lados se observa

$$\underbrace{\langle\mu|\mu\rangle}_{\geq 0} = \langle\nu|a^\dagger a|\nu\rangle = \nu \underbrace{\langle\nu|\nu\rangle}_{\geq 0}, \quad (5.47)$$

a partir de lo cual necesariamente $\nu \geq 0$.

b) El vector $a|\nu\rangle$ es proporcional a $|\nu - 1\rangle$.

Consideremos nuevamente $|\mu\rangle \equiv a|\nu\rangle$ y calculemos $\hat{N}|\mu\rangle$. Haciendo uso de $[a, a^\dagger] = 1$, desarrollamos explícitamente,

$$\begin{aligned} \hat{N}|\mu\rangle &= (a^\dagger a) a|\nu\rangle \\ &= (a a^\dagger - 1) a|\nu\rangle \\ &= a (a^\dagger a) |\nu\rangle - a|\nu\rangle \\ &= a \nu |\nu\rangle - a|\nu\rangle \\ &= (\nu - 1) a |\nu\rangle \quad \Rightarrow \\ \hat{N}|\mu\rangle &= (\nu - 1) |\mu\rangle \end{aligned}$$

Con ésto podemos escribir $|\mu\rangle = a|\nu\rangle = c_\nu |\nu - 1\rangle$ y buscamos c_ν a fin de normalizar los autovectores. Exigiendo $\langle\nu|\nu\rangle = 1$, entonces

$$\underbrace{\langle\nu|a^\dagger a|\nu\rangle}_\nu = |c_\nu|^2 \underbrace{\langle\nu - 1|\nu - 1\rangle}_1,$$

Resolviendo c_ν y considerando la raíz real positiva, obtenemos

$$a|\nu\rangle = \sqrt{\nu} |\nu - 1\rangle. \quad (5.48)$$

La lectura a esta ecuación es directa. La acción del operador a sobre un vector $|\nu\rangle$ se traduce en ‘bajarlo’ de nivel en una unidad, generando el autovector $|\nu - 1\rangle$. Es por tal motivo que al operador a se le denomina *operador de bajada*. En inglés, ‘down operator’.

c) El vector $a^\dagger|\nu\rangle$ es proporcional a $|\nu + 1\rangle$.

La demostración es análoga a la anterior, conduciendo a

$$a^\dagger|\nu\rangle = \sqrt{\nu + 1} |\nu + 1\rangle. \quad (5.49)$$

Análogamente al operador a , a^\dagger recibe el nombre de *operador de subida*, ‘up operator’ en inglés.

d) Los autovalores ν son enteros.

En efecto, recordemos que los autovalores de \hat{N} son positivos y que $a|\nu\rangle$ es autovector de \hat{N} . Más aún, el elemento $a^m|\nu\rangle$ es autovector de \hat{N} , el cual está dado por

$$a^m|\nu\rangle = \sqrt{\nu(\nu-1)\cdots(\nu-m+1)}|\nu-m\rangle.$$

Notar que si ν es no entero, siempre existirá un m con el cual el autovalor de \hat{N} , $\nu-m$, sea negativo. Esto contradice la propiedad *i*, de modo que ν debe necesariamente ser entero. Con ello reacomodamos la notación, haciendo $\nu \rightarrow n$, con $n \geq 0$.

e) El espectro de energía es $\hbar\omega(n + \frac{1}{2})$.

En la base en que \hat{N} fué diagonalizada, tenemos

$$\begin{aligned}\hat{H}|n\rangle &= \hbar\omega(\hat{N} + \frac{1}{2})|n\rangle \\ &= \hbar\omega(n + \frac{1}{2})|n\rangle.\end{aligned}$$

La introducción de los operadores de subida y bajada permite un enfoque interesante para la obtención de las formas explícitas de la funciones de onda. Recordar que al aplicar el operador de bajada al estado fundamental $|0\rangle$ el resultado es nulo, como lo expresa la Ec. (5.48). Por otro lado el operador de bajada se está dado por $a = (\hat{Q} + i\hat{P})/\sqrt{2}$, con \hat{P} y \hat{Q} definidos en las Ecs. (5.38), por lo que podemos proyectar en espacio de coordenadas y obtener una ecuación diferencial para $\phi_0(x) \equiv \langle x|0\rangle$. Entonces,

$$\begin{aligned}a|0\rangle &= 0 \quad / \langle x| \\ \langle x| \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{m\hbar\omega}} \hat{p}_x \right) |0\rangle &= 0 \\ (m\omega x + \hbar\partial_x) \phi_0(x) &= 0.\end{aligned}$$

Resolvemos,

$$\phi_0' = -\frac{m\omega}{\hbar} x \phi_0 \quad \Rightarrow \quad \phi_0(x) = C e^{-m\omega x^2/2\hbar}. \quad (5.50)$$

La constante $C = [m\omega/\hbar\pi]^{1/4}$ se obtiene al imponer $\langle 0|0\rangle = 1$.

Una vez obtenido el estado fundamental podemos aplicar el operador de subida para obtener las soluciones $\phi_n(x) = \langle x|n\rangle$. Dado que $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$, entonces

$$\begin{aligned}|n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger|n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \frac{1}{\sqrt{n-1}} a^\dagger|n-2\rangle = \dots \quad \Rightarrow \\ |n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle.\end{aligned}$$

Por otra parte, es fácil comprobar que

$$\langle x|a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \left(x - \frac{1}{m\omega} \frac{d}{dx} \right) \langle x| \quad (5.51)$$

con lo cual

$$\begin{aligned} \phi_n(x) = \langle x|n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{n/2} \left(x - \frac{1}{m\omega} \frac{d}{dx} \right)^n \langle x|0\rangle \rightarrow \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \left(\frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \left(\frac{m\omega}{\hbar} \right)^{n/2} \left(x - \frac{1}{m\omega} \frac{d}{dx} \right)^n e^{-m\omega x^2/2\hbar}. \end{aligned} \quad (5.52)$$

Ejercicio 5.12 Encuentre la función de onda del estado fundamental para una partícula de masa m atrapada por un oscilador armónico cuya energía entre niveles es $\hbar\Omega$. Súbitamente el potencial es alterado, duplicándose la energía de separación entre los niveles. Determine la probabilidad de que la partícula se encuentre en el estado fundamental del nuevo potencial.

Ejercicio 5.13 Sean $|0\rangle$ y $|1\rangle$ los niveles más bajos del oscilador armónico unidimensional de frecuencia ω y masa m . Construya el estado $|\phi\rangle = C_0|0\rangle + C_1|1\rangle$ tal que el valor de expectación $\langle\phi|\hat{x}|\phi\rangle$ sea máximo. Para tal estado calcule entonces $\langle\phi|\hat{x}|\phi\rangle$ y $\langle\phi|\hat{p}|\phi\rangle$.

Ejercicio 5.14 Considere el hamiltoniano $\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p} - \beta\hat{x})^2$. Expresé este operador en términos de operadores de subida y bajada definidos adecuadamente. Explique porqué el término no cinético de este hamiltoniano corresponde a un potencial no local. Calcule los elementos de matriz $\langle n|\hat{H}|n\rangle$, en la base de autofunciones del operador $a^\dagger a$. ¿Qué puede decir acerca de los elementos no diagonales?

Ejercicio 5.15 Considere los operadores a_α definidos por la siguiente álgebra:

$$\{a_\alpha, a_\beta\} = 0, \quad \{a_\alpha^\dagger, a_\beta^\dagger\} = 0, \quad \{a_\alpha, a_\beta^\dagger\} = \delta_{\alpha\beta},$$

donde $\{a, b\} = ab + ba$. Se define el estado base por $|0\rangle$. El estado $|\alpha\rangle \equiv a_\alpha^\dagger|0\rangle$, representa la ocupación del estado α por sobre el estado base.

- Dado $\hat{N}_\alpha = a_\alpha^\dagger a_\alpha$, demuestre $\hat{N}_\alpha^2 = \hat{N}_\alpha$. Determine los valores propios de \hat{N}_α .
- Determine las constantes de proporcionalidad en las relaciones

$$\hat{N}_\alpha(a_\alpha|0\rangle) \propto |0\rangle; \quad \hat{N}_\alpha(a_\alpha^\dagger|0\rangle) \propto |\alpha\rangle.$$

Los operadores de subida y bajada permiten una forma muy expedita del cálculo de elementos de matrix de \hat{x}^m y \hat{p}_x^m , o alternativamente \hat{Q}^m y \hat{P}^m . Notar que

$$\hat{Q} = \sqrt{\frac{1}{2}} (a^\dagger + a), \quad (5.53)$$

$$\hat{P} = i\sqrt{\frac{1}{2}} (a^\dagger - a), \quad (5.54)$$

$$(5.55)$$

Observemos el cálculo de $\langle \hat{Q} \rangle_n$,

$$\begin{aligned} \langle \hat{Q}^2 \rangle_n &= \frac{1}{2} \langle n | (a^\dagger + a)^2 | n \rangle \\ &= \frac{1}{2} \langle n | a^\dagger a^\dagger + a^\dagger a + a a^\dagger + a a | n \rangle \\ &= \frac{1}{2} [0 + n + (n + 1) + 0], \end{aligned}$$

donde se usaron

$$\begin{aligned} \langle n | a^\dagger a^\dagger | n \rangle &\sim \langle n | n + 2 \rangle = 0, \\ \langle n | a a | n \rangle &\sim \langle n + 2 | n \rangle = 0, \\ \langle n | a^\dagger a | n \rangle &= n, \\ a a^\dagger &= a^\dagger a + 1. \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$\langle \hat{Q}^2 \rangle_n = \frac{2n + 1}{2} \quad \rightarrow \quad \frac{1}{2} \langle \hat{Q}^2 \rangle_n = \frac{1}{2} (n + \frac{1}{2}). \quad (5.56)$$

El procedimiento para el cálculo de $\langle \hat{P}^2 \rangle_n$ es similar y conduce a

$$\langle \hat{P}^2 \rangle_n = \frac{2n + 1}{2} \quad \rightarrow \quad \frac{1}{2} \langle \hat{P}^2 \rangle_n = \frac{1}{2} (n + \frac{1}{2}). \quad (5.57)$$

Notemos que

$$\frac{1}{2} \langle \hat{P}^2 \rangle_n + \frac{1}{2} \langle \hat{Q}^2 \rangle_n = (n + \frac{1}{2}), \quad (5.58)$$

un resultado esperado.

Los resultados expresados en las Ecs. (5.48) y (5.49) permiten obtener

$$\begin{aligned} \langle m | a | n \rangle &= \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \\ \langle m | a^\dagger | n \rangle &= \sqrt{n + 1} \delta_{m,n+1}. \end{aligned}$$

En forma matricial,

$$a = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \sqrt{4} & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \end{pmatrix}, \quad a^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \sqrt{1} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 0 & \sqrt{4} & 0 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & 0 & \cdot & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.59)$$

de donde

$$\hat{Q} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \sqrt{3} & 0 & \sqrt{4} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \sqrt{4} & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.60)$$

y

$$\hat{P} = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \sqrt{3} & 0 & -\sqrt{4} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \sqrt{4} & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.61)$$

Ejercicio 5.16 Haciendo uso de los operadores a y a^\dagger , calcule los elementos de matriz $\langle i|\hat{x}\hat{p}|j\rangle$ y $\langle i|\hat{p}\hat{x}|j\rangle$. Con ello verifique que $\langle i|[\hat{x}, \hat{p}]|j\rangle = i\hbar\delta_{ij}$

Ejercicio 5.17 Para el oscilador armónico de frecuencia angular ω demuestre las siguientes propiedades:

$$E_n = 2\langle \hat{K} \rangle_n = 2\langle \hat{V} \rangle_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$(\Delta x)_n^2 = \frac{\hbar}{m\omega} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$(\Delta p)_n^2 = m\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

$$\langle x^4 \rangle_n = \frac{3}{4} \left(\frac{\hbar}{m\omega} \right)^2 (2n^2 + 2n + 1)$$

Ejercicio 5.18 Demuestre que si a^\dagger es el operador de subida, con $[a, a^\dagger] = 1$, entonces $a(a^\dagger)^n|0\rangle = n(a^\dagger)^{n-1}|0\rangle$. A partir de lo anterior demuestre $e^{\lambda a}F(a^\dagger)|0\rangle = F(a^\dagger + \lambda)|0\rangle$.

Ejercicio 5.19 Considere un electrón sometido a un campo externo descrito por cierto potencial que tiene un sólo mínimo. Para simplificar ideas, considere que éste se encuentra en el estado fundamental. La región donde el potencial presenta un mínimo se modela mediante un oscilador armónico tal como se procede en mecánica clásica al tratar oscilaciones pequeñas en torno a un punto de equilibrio: $U_a = \frac{1}{2}m\omega_a^2x^2$.

a) Determine la función del estado fundamental asociada a este potencial.

b) Súbitamente los constituyentes que dan cuenta de este potencial son alterados, conduciendo a un nuevo potencial con un mínimo en $x = 0$, dado por $U_b = \frac{1}{2}m\omega_b^2x^2 - w$, donde $w \geq 0$. Determine la probabilidad de que el sistema se encuentre en el nuevo estado fundamental.

5.8. Evolución temporal, translaciones y 'boosts'

Como vimos anteriormente las transformaciones continuas unitarias tienen por generadores operadores hermíticos. Examinaremos los casos del hamiltoniano, momentum y posición. Como veremos, tales operadores son generadores de evolución temporal, translación espacial y cambio de momentum ('boost' en inglés).

El hamiltoniano como generador de evolución.

Comencemos considerando el vector $|\psi_t\rangle$ solución de la ecuación de Schrödinger. Entonces,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_t\rangle = \hat{H} |\psi_t\rangle, \quad (5.62)$$

de donde

$$|\psi_{t+\delta t}\rangle = \left(1 - i\delta t \frac{\hat{H}}{\hbar}\right) |\psi_t\rangle,$$

con lo que resulta evidente identificar el generador de translación temporal (evolución)

$$\hat{G} \rightarrow -\hat{H}/\hbar.$$

La transformación unitaria correspondiente al barrido de δt sobre el intervalo $[t_0, t]$ queda dada por

$$U(t - t_0) = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)}.$$

Obtenemos (y reconocemos) entonces

$$|\psi_t\rangle = e^{-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)} |\psi_{t_0}\rangle.$$

Momentum como generador de translaciones.

Examinemos el operador momentum \hat{p} como generador en 1D. Escribimos esta vez

$$U_a = e^{-i a \hat{p}/\hbar},$$

con a una constante real con dimensiones de longitud y el signo negativo en la exponencial escogido por conveniencia. Analizamos su acción sobre un vector $|\psi\rangle$,

$$\begin{aligned} |\psi'\rangle &= e^{-i a \hat{p}/\hbar} |\psi\rangle & / \quad \langle x| \times \quad \rightarrow \\ \psi'(x) &= \langle x| e^{-i a \hat{p}/\hbar} |\psi\rangle \\ &= \langle x| e^{-a \partial_x} |\psi\rangle \\ &= e^{-a \partial_x} \psi(x) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (-a \partial_x)^k \psi(x) \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (-a)^k \psi^{(k)}(x) \quad \Rightarrow \\ \psi'(x) &= \psi(x - a). \end{aligned} \tag{5.63}$$

Por lo tanto la función de onda $\psi(x)$ ha sido trasladada en a . Este resultado también se debiera ver reflejado en el autovalor del operador posición \hat{x} aplicado al estado $|x'\rangle = e^{-i a \hat{p}} |x\rangle$.

Ejercicio 5.20 Dado $|x'\rangle = e^{-i a \hat{p}/\hbar} |x\rangle$, demuestre que $\hat{x}|x'\rangle = (x + a)|x'\rangle$.

Resulta evidente entonces que el operador de momentum actúa como generador de translaciones espaciales. La extensión a 3D es directa puesto que los operadores p_i conmutan entre si, lo que permite expresar la composición de translaciones independientes a_1 , a_2 y a_3 como

$$U(\mathbf{a}) = e^{-i a_1 \hat{p}_1/\hbar} \cdot e^{-i a_2 \hat{p}_2/\hbar} \cdot e^{-i a_3 \hat{p}_3/\hbar} = e^{-i \mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{p}}}.$$

Operador posición como generador de 'boosts'.

El análisis al considerar \hat{x} como generador es análogo. Al igual que como se hizo en el caso anterior, definamos

$$\hat{U} = e^{+i p_0 \hat{x}/\hbar}$$

Verificaremos que $|p'\rangle \equiv U|p\rangle$ es un autoestado de \hat{p} y calcularemos su autovalor. Resulta útil recordar la propiedad

$$[\hat{p}, F(\hat{x})] = -i\hbar \frac{\partial F}{\partial \hat{x}},$$

En el caso particular $F \rightarrow \hat{U} = e^{+ip_0\hat{x}/\hbar}$, donde $\partial\hat{U}/\partial\hat{x} = (i/\hbar)p_0\hat{U}$, obtenemos

$$\hat{p}\hat{U} - \hat{U}\hat{p} = p_0\hat{U}.$$

Al actuar sobre $|p\rangle$ e identificando $|p'\rangle \equiv U|p\rangle$ obtenemos

$$\hat{p}|p'\rangle = (p + p_0)|p'\rangle,$$

de donde se ve que la acción de $\hat{U} = e^{+ip_0\hat{x}/\hbar}$ sobre el estado de momentum $|p\rangle$ es llevarlo al estado $p \rightarrow p + p_0$.

Ejercicio 5.21 Al operador $U = e^{-i\beta(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x})/\hbar}$ se le denomina 'squeeze operator' en inglés. Demuestre que U es unitario y obtenga el autovalor de \hat{x} al actuar sobre $|x'\rangle = U|x\rangle$. Interprete su resultado haciendo $\beta = \ln \lambda$.

5.9. Cuadros de Schrödinger y Heisenberg

El desarrollo de la mecánica cuántica contó con aportes muy significativos por parte de Schrödinger y Heisenberg, conducentes a resultados idénticos mediante el uso de formalismos aparentemente distintos. El esquema de Schrödinger se centra en el estudio de funciones de onda, mientras que el de Heisenberg en el estudio de operadores en forma matricial. Fué Schrödinger en 1926, e independientemente Dirac en 1927¹, quienes demuestran que ambos enfoques eran equivalentes y que se relacionaban entre sí mediante una transformación unitaria.

Si consideramos un sistema descrito mediante un hamiltoniano independiente del tiempo, entonces la evolución temporal de sus estados está determinada por

$$|\psi_t\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi_0\rangle \equiv U|\psi_0\rangle,$$

donde $|\psi_0\rangle$ corresponde a la función de onda en $t = 0$. El vector $|\psi_t\rangle$ representa al estado en el cuadro de Schrödinger y lo denotamos por $|\psi_S\rangle$. Al estado $|\psi_0\rangle$, que no experimenta evolución temporal, se le hace corresponder $|\psi_H\rangle$ en el cuadro de Heisenberg. Así entonces,

$$|\psi_S\rangle = U|\psi_H\rangle.$$

¹J.-L. Basdevant, *Quantum Mechanics*, Springer, The Netherlands (2002).

Bajo esta transformación, el valor de expectación de un operador \hat{A}_S en el cuadro de Schrödinger queda dado por

$$\langle \psi_S | \hat{A}_S | \psi_S \rangle = \langle \psi_H | U^\dagger \hat{A}_S U | \psi_H \rangle .$$

Examinemos entonces la evolución del operador $\hat{A}_H \equiv U^\dagger \hat{A}_S U$. Derivando con respecto al tiempo, y notando que $\partial U / \partial t = -iU \hat{H} / \hbar = -i\hat{H} U / \hbar$, se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{A}_H}{dt} &= \left(\frac{i\hat{H}}{\hbar} \right) U^\dagger \hat{A}_S U - U^\dagger \hat{A}_S U \left(\frac{i\hat{H}}{\hbar} \right) + U^\dagger \frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t} U \\ &= \frac{1}{i\hbar} \left[U^\dagger \hat{A}_S U, \hat{H} \right] + U^\dagger \frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t} U . \end{aligned}$$

Si hacemos la identificación $\partial \hat{A}_H / \partial t = U^\dagger \frac{\partial \hat{A}_S}{\partial t} U$, se obtiene

$$i\hbar \frac{d\hat{A}_H}{dt} = \left[\hat{A}_H, \hat{H} \right] + i\hbar \frac{\partial \hat{A}_H}{\partial t} , \quad (5.64)$$

la ecuación de evolución del operador \hat{A} en el cuadro de Heisenberg.

La interpretación de este resultado es directa. En el cuadro de Schrödinger la evolución temporal del sistema radica en las funciones de onda, mientras que en el de Heisenberg en los operadores. Una observación interesante a la luz de la Ec. (5.64) es su equivalencia formal con las ecuaciones canónicas de Hamilton para un sistema clásico:

$$\frac{dA_{cl}}{dt} = \{A_{cl}, H_{cl}\}_{PP} + \frac{\partial A_{cl}}{\partial t} , \quad (5.65)$$

donde

$$\{A_{cl}, H_{cl}\}_{PP} = \sum_i \left(\frac{\partial A_{cl}}{\partial q_i} \frac{\partial H_{cl}}{\partial p_i} - \frac{\partial A_{cl}}{\partial p_i} \frac{\partial H_{cl}}{\partial q_i} \right) , \quad (5.66)$$

con $H = H(q_i, \dots, p_i, \dots)$. La correspondencia es evidente,

$$\{\dots, \dots\}_{PP} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [\dots, \dots] . \quad (5.67)$$

En un sistema cuántico, las ecuaciones de movimiento para el momentum \hat{p} y coordenada \hat{x} son

$$\frac{d\hat{p}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{p}, \hat{H} \right] = -\frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}} \quad (5.68)$$

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \left[\hat{x}, \hat{H} \right] = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}} . \quad (5.69)$$

Es interesante examinar estas ecuaciones para una partícula libre, cuyo hamiltoniano está dado por $\hat{H} = \hat{p}^2/2m$, y en el caso de un oscilador armónico, donde $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + m\omega^2\hat{x}^2/2$. Tal estudio queda propuesto.

Ejercicio 5.22 Considere el hamiltoniano unidimensional $\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}^2 + V(\hat{x})$, con \hat{x} y \hat{p} los operadores de posición y momentum, respectivamente. Las autofunciones de este hamiltoniano satisfacen $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$. Demuestre las reglas de suma

$$\sum_j (E_j - E_n)^2 |\langle n|\hat{x}|j\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{m^2} \langle \hat{p}^2 \rangle_n ,$$

$$\sum_j (E_j - E_n) |\langle n|\hat{x}|j\rangle|^2 = \frac{\hbar^2}{2m} .$$

La segunda de ellas recibe el nombre de *regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn*.

5.10. Principios de la mecánica cuántica

Desde un punto de vista lógico, axiomático o secuencial, la presentación de los postulados de la mecánica cuántica debiera ir al comienzo de estas notas. He optado presentarlas a esta altura para tomar ventaja de la notación de Dirac, la que facilita en buena forma la síntesis de ideas y su relación con el formalismo.

Los postulados que a continuación se presentan corresponden a la *interpretación de Copenhague* de la Mecánica Cuántica, consistente en una serie de reglas para interpretar el formalismo en el contexto de una descripción de un sistema físico, sus variables y observables. Esta interpretación –también llamada *escuela de Copenhague*– fué desarrollada por Werner Heisenberg y Neils Bohr en los años 20, con importantes contribuciones de Max Born. Esta interpretación captó un fuerte apoyo en Wolfgang Pauli y John von Neumann. Sin embargo, ella también encontró fuertes detractores, entre los que figuran Albert Einstein, Erwin Schrödinger, Louis de Broglie, Max Planck, y David Bohm, entre muchos otros.

Revisando la literatura disponible a fin de identificar los postulados de la mecánica cuántica, sorprende constatar que un porcentaje importante de los llamados *textos clásicos* no los enuncia directamente, más bien los presentan progresivamente con el desarrollo de los temas y el formalismo. Esta característica contrasta con las conocidas *Leyes de Newton* de la mecánica, las *Leyes de la Termodinámica*, las ecuaciones de Maxwell para el electromagnetismo, o los postulados de Einstein para la *Relatividad General*. La recopilación de principios

que a continuación se presentan coinciden con los de D. R. Bes². Otros autores que también enuncian estos principios –aunque en diferente orden o con distintos énfasis– son Basdevant³, Razavy⁴, Ballentine⁵ y Shankar⁶, entre otros.

Principios:

- I.- *El estado de un sistema está descrito por un vector $|\Psi\rangle$ –denominado vector de estado, función de estado o simplemente estado– en el espacio de Hilbert. Este vector resume toda la información física accesible acerca del sistema.*
- II.- *A cada cantidad física se le hace corresponder un único operador. En particular, los operadores \hat{x} y \hat{p} , correspondientes a la coordenada y momentum de una partícula, satisfacen las regla de conmutación*

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar. \quad (5.70)$$

En general, los operadores correspondientes a variables clásicas $\Omega(x, p)$, son representados cuánticamente por operadores hermíticos construidos bajo la sustitución $x \rightarrow \hat{x}$ y $p \rightarrow \hat{p}$. Así entonces, $\Omega(x, p) \rightarrow \hat{\Omega} = \Omega(\hat{x}, \hat{p})$. Esta receta permite la extensión cuántica de variables clásicas. Sin embargo, como se verá más adelante, existen variables inherentemente cuánticas cuya contraparte clásica es inexistente.

- III.- *Si el sistema está en el estado $|\Psi\rangle$, la medición del observable $\hat{\Omega}$ arrojará sólo uno de sus autovalores ω con una probabilidad*

$$\mathcal{P}(\omega) = |\langle\omega|\Psi\rangle|^2. \quad (5.71)$$

Como resultado de la medición, el estado del sistema deja de ser $|\Psi\rangle$ y pasa a ser $|\omega\rangle\langle\omega|\Psi\rangle$

Es importante notar que una medición cuántica puede arrojar como resultado sólo autovalores del operador, no habiendo cabida a otros valores. Además, este principio establece la probabilidad con que tal autovalor va a ser observado, probabilidad que está dada por el vector de estado $|\Psi\rangle$ mediante las amplitudes de probabilidad $\langle\omega|\Psi\rangle$.

²D. R. Bes, *Quantum Mechanics: A Modern and Concise Introductory Course*, Springer, Berlin (2004).

³J.-L. Basdevant, *Quantum Mechanics*, Springer, The Netherlands (2002).

⁴M. Razavy, *Heisenberg's Quantum Mechanics*, World Scientific, Singapore (2011).

⁵L. E. Ballentine *Quantum Mechanics*, World Scientific, Singapore (2003).

⁶R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics*, Plenum Press, New York (1994).

Si el resultado de la medición resulta ω , entonces el vector de estado inmediatamente después de la medición es $|\omega\rangle\langle\omega|\Psi\rangle$. Este es el denominado *colapso* o *reducción* de la función de onda.

Además de los tres principios anteriores, hay otros dos más que se refieren a la *estadística* y *evolución temporal*.

IV.- *En la naturaleza existen sólo dos tipos de partículas: los bosones, que están descritos por vectores de estado simétricos bajo cualquier permutación de dos de sus constituyentes, y los fermiones, cuyos vectores de estado son antisimétricos bajo las mismas permutaciones.*

V.- *El operador generador de la evolución temporal $U(t)$ de los vectores de estado está determinado por el hamiltoniano $\hat{H}(t)$ y satisface*

$$\frac{\partial U}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H} U . \quad (5.72)$$

Ejercicio 5.23 Una partícula se encuentra en el estado fundamental en una barrera infinita de ancho a . Súbitamente la barrera se contrae, simétricamente con respecto al centro, a un ancho λa . Determine la probabilidad de que la partícula se encuentre en el nuevo estado fundamental. Gráfiquela como función de λ y comente su resultado.

Ejercicio 5.24 El hamiltoniano de cierto sistema de dos niveles está dado por

$$\hat{H} = \epsilon(|a\rangle\langle a| - |b\rangle\langle b| + |a\rangle\langle b| + |b\rangle\langle a|),$$

con $|a\rangle$ y $|b\rangle$ ortonormales, y ϵ una constante con dimensiones de energía. Demuestre que \hat{H} es hermitico. Encuentre las autoenergías y autovectores respectivos para este sistema. ¿Cuál es la forma del hamiltoniano en esta nueva base?

Ejercicio 5.25 Considere una base de estados formada por tres vectores, $\{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle, |\phi_3\rangle\}$. El operador \hat{Q} satisface las siguientes ecuaciones:

$$\hat{Q}|\phi_1\rangle = q|\phi_1\rangle; \quad \hat{Q}|\phi_2\rangle = 2q|\phi_2\rangle; \quad \hat{Q}|\phi_3\rangle = 2q|\phi_3\rangle.$$

Suponga que el sistema ha sido preparado en el estado

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(|\phi_1\rangle + |\phi_2\rangle) + \sqrt{\frac{2}{3}}|\phi_3\rangle$$

- Calcule el valor de expectación del observable \hat{Q} .
- ¿Cuáles son los posibles valores de una medición de \hat{Q} con sus respectivas probabilidades?
- ¿Cuál es el estado del sistema luego de medir \hat{Q} y haber arrojado el valor $2q$?

Ejercicio 5.26 Considere una caja dividida mediante una membrana (interacción) en dos sectores contiguos, $\underline{1}$ y $\underline{2}$. Una partícula de masa m se encuentra dentro de la caja y es posible, experimentalmente, detectar la partícula sólo en uno de estos sectores. Los autoestados normalizados correspondientes se representan por $|1\rangle$ y $|2\rangle$ respectivamente. La posibilidad de que la partícula esté en una u otra región es descrita por el hamiltoniano

$$H = a|1\rangle\langle 2| + a^*|2\rangle\langle 1|.$$

- Verifique que H es hermítico y determine sus autofunciones $|\phi_\lambda\rangle$.
- Si inicialmente ($t=0$) la partícula se ubica en el sector $\underline{1}$, determine la probabilidad de que ésta se encuentre en $\underline{2}$ al cabo de un lapso t .

Ejercicio 5.27 Un operador hermítico \hat{A} (observable) tiene dos autoestados normalizados $|\psi_1\rangle$ y $|\psi_2\rangle$, con autovalores a_1 y a_2 , respectivamente. De igual forma, el operador \hat{B} representa un observable, el cual tiene dos autoestados normalizados $|\phi_1\rangle$ y $|\phi_2\rangle$, con autovalores b_1 y b_2 , respectivamente. Los autoestados se relacionan mediante

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \cos\beta|\phi_1\rangle - \sin\beta|\phi_2\rangle; \\ |\psi_2\rangle &= \sin\beta|\phi_1\rangle + \cos\beta|\phi_2\rangle; \end{aligned}$$

- El observable \hat{B} es medido y se obtiene b_1 . ¿Cuál es el estado del sistema inmediatamente después de la medición?
- Enseguida se mide \hat{A} , ¿Cuáles son los resultados posibles y sus respectivas probabilidades?
- Se vuelve a medir \hat{B} . ¿Cuál es la probabilidad de medir b_1 y b_2 ?
- Examine sus tres resultados anteriores para el caso $\beta = \pi/4$.

Ejercicio 5.28 Considere el operador $U_\eta = \exp[\eta(a^2 - a^{\dagger 2})]$, con η un parámetro real. Los operadores a^\dagger y a son operadores de subida y bajada del oscilador armónico, respectivamente.

- Demuestre que U_η es unitario.
- Definiendo el operador $g_\eta^{(+)}$ mediante $g_\eta^{(+)} = U_\eta(a + a^\dagger)U_\eta^\dagger$, demuestre que éste satisface

$$\frac{dg_\eta^{(+)}}{d\eta} = 2g_\eta^{(+)}.$$

- Encuentre una ecuación similar para $dg_\eta^{(-)}/d\eta$, con $g_\eta^{(-)} = U_\eta(a - a^\dagger)U_\eta^\dagger$.
- Demuestre que $U_\eta(a \pm a^\dagger)U_\eta^\dagger = e^{\pm 2\eta}(a \pm a^\dagger)$.
- Considere la función de onda $|\chi\rangle = U_\eta^\dagger|0\rangle$, donde $|0\rangle$ representa el estado fundamental del oscilador armónico. Calcule para este estado los valores de expectación de $\langle \hat{x} \rangle_\chi$, $\langle \hat{x}^2 \rangle_\chi$, $\langle \hat{p}_x \rangle_\chi$ y $\langle \hat{p}_x^2 \rangle_\chi$. Describa Δp_x y Δx como funciones de η . En particular, identifique η para el cual la medición del momentum se puede lograr con infinita precisión.

Ejercicio 5.29 El siguiente es un modelo de una molécula formada por tres átomos en línea, como pudieran ser C_3 o N_3 . La separación entre dos vecinos es d . Denotemos por $|\psi_I\rangle$,

$|\psi_C\rangle$ y $|\psi_D\rangle$ los autoestados de un observable \hat{B} , correspondiente a un electrón localizado en la vecindad del átomo I (a la izquierda), C (al centro) y D (a la derecha), respectivamente. Así,

$$\hat{B}|\psi_I\rangle = -d|\psi_I\rangle, \quad \hat{B}|\psi_C\rangle = 0, \quad \hat{B}|\psi_D\rangle = +d|\psi_I\rangle.$$

En la base $\{|\psi_I\rangle, |\psi_C\rangle, |\psi_D\rangle\}$, el hamiltoniano del sistema se representa por la matriz

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} E_0 & -b & 0 \\ -b & E_0 & -b \\ 0 & -b & E_0 \end{pmatrix}$$

- Calcule las autoenergías y autoestados de \hat{H} .
- En el estado fundamental, encuentre las probabilidades de encontrar al electrón en I, C y D.
- Suponga que el electrón se encuentra en el estado $|\psi_D\rangle$ y que su energía es medida. ¿Qué valores pueden arrojar esta medición y con qué probabilidad?
- Para este último caso calcule $\langle E \rangle \equiv \langle \hat{H} \rangle$ y ΔE . Examine el caso $b = 0$, e interprete su significado físico.

Ejercicio 5.30 En $t = 0$ una partícula está descrita por un paquete de ondas gaussiano de la forma $\langle x|\Phi_0\rangle \sim \exp(-x^2/4a^2)$, instante en el cual es súbitamente atrapada por un pozo de potencial infinito de ancho λa centrado en $x = 0$. Determine la probabilidad de que la partícula se encuentre en el estado fundamental. Comience su análisis considerando

$$|\Psi_t\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\Phi_0\rangle.$$

5.11. Relaciones generales de incerteza

En secciones anteriores se hizo mención a relaciones de incertidumbre que involucran a mediciones de la posición y momentum. Al definir

$$(\Delta p)^2 = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2, \quad (\Delta x)^2 = \langle \hat{x}^2 \rangle - \langle \hat{x} \rangle^2,$$

se cumple que

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar,$$

la que da cuenta de la imposibilidad de medir en forma exacta, *simultáneamente*, la posición y el momentum de una partícula. Este constituye el principio de incertidumbre de Heisenberg. Relaciones de este tipo se encuentran en otros contextos. Demostraremos la situación para un caso general. La demostración se basa en la presentada por Susskind & Friedman, del libro *Quantum Mechanics, The Theoretical Minimum*.

Definamos los vectores $|X\rangle = \hat{A}|\psi\rangle$, e $|Y\rangle = i\hat{B}|\psi\rangle$, donde \hat{A} y \hat{B} representan operadores hermíticos. Por simplicidad consideremos, preliminarmente, un caso en que $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle = 0$. Entonces $(\Delta A)^2 = \langle\hat{A}^2\rangle$, y $(\Delta B)^2 = \langle\hat{B}^2\rangle$. Consideremos ahora la variante de la desigualdad de Schwarz

$$|X| \times |Y| \geq \frac{1}{2} |\langle X|Y\rangle + \langle Y|X\rangle|. \quad (5.73)$$

Con las definiciones dadas para $|X\rangle$ e $|Y\rangle$ observe que

$$\begin{aligned} |X| &= \sqrt{\langle X|X\rangle} = \langle\psi|\hat{A}^2|\psi\rangle^{\frac{1}{2}} = \Delta A, \\ |Y| &= \langle\psi|\hat{B}^2|\psi\rangle^{\frac{1}{2}} = \Delta B, \\ \langle X|Y\rangle + \langle Y|X\rangle &= i\langle\psi|(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})|\psi\rangle. \end{aligned}$$

Al sustituir en la Ec. (5.73) se obtiene

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle\psi|[\hat{A}, \hat{B}]|\psi\rangle|.$$

Una desigualdad idéntica a ésta se obtiene si los promedios $\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \equiv a$, y $\langle\psi|\hat{B}|\psi\rangle \equiv b$, son no nulos. Para demostrar tal caso se propone considerar $\hat{A}' = \hat{A} - a$, y $\hat{B}' = \hat{B} - b$. Es directo comprobar que $\Delta A' = \Delta A$, $\Delta B' = \Delta B$, y que $[\hat{A}', \hat{B}'] = [\hat{A}, \hat{B}]$, con lo que la relación dada por la desigualdad (5.74) sigue siendo válida. Por lo tanto, si la regla de conmutación entre los dos operadores es

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

donde \hat{C} es hermítica, entonces

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} \langle\hat{C}\rangle. \quad (5.74)$$

La dispersión ΔA impone el límite cuántico de incerteza con que \hat{A} puede ser medido, lo cual es también válido para ΔB . Lo interesante de la relación obtenida para el producto de tales incertezas es que está acotada por una desigualdad, donde la cota resulta proporcional al valor de expectación del conmutador entre ambos observables. El caso más emblemático se identifica cuando hacemos $\hat{A} = \hat{p}$, y $\hat{B} = \hat{x}$, los observables de momentum y posición, respectivamente. Puesto que $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$, entonces $\Delta x \Delta p \geq \frac{1}{2}\hbar$. Esta desigualdad, ya identificada como el principio de incertidumbre de Heisenberg, imposibilita medir simultáneamente y con absoluta precisión la posición y el momentum de una partícula.

5.12. Observables compatibles

De acuerdo a los postulados de la mecánica cuántica, los observables llevan asociados operadores hermíticos cuyos autovalores son las cantidades medibles. Una medición registrará un autovalor de ese operador. Si \hat{A} denota un observable, el *límite* que impone la naturaleza en la certeza de una medición de \hat{A} está dado por

$$\Delta A = \sqrt{\langle \psi | \hat{A}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^2},$$

donde $|\psi\rangle$ representa el estado del sistema al momento de la medición. Observe que si $|\psi\rangle$ corresponde a un autoestado del sistema con autovalores a , vale decir $\hat{A}|\psi\rangle = a|\psi\rangle$, entonces $\Delta A = 0$. Esto significa que nada impide, más allá que las dificultades tecnológicas, una medición del observable \hat{A} con absoluta precisión.

Un tema de interés se da cuando operadores hermíticos conmutan entre si. En particular, si un operador (observable) conmuta con el hamiltoniano entonces corresponde a una constante del movimiento del sistema y su diagonalización puede llevarse a cabo en una base común a la del hamiltoniano. Físicamente el hecho de que conmuten dos operadores hermíticos –que llevan asociados observables– se traduce en que los resultados de tales mediciones resulta independiente del orden en que se realicen.

Consideremos dos observables, \hat{A} y \hat{B} , tales que $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. Puesto que $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ y $\hat{B} = \hat{B}^\dagger$, entonces la relación de incerteza asociada es

$$\Delta A \Delta B \geq 0.$$

En otras palabras no hay impedimento cuántico para medir ambas cantidades, simultáneamente y con absoluta precisión. De acuerdo a los postulados de la mecánica cuántica, el acto de medir conlleva a *detectar* uno de los autovalores permitidos del observable. El proceso de diagonalización permite identificar una base de autoestados. Veremos que cuando dos operadores conmutan, entonces la diagonalización es posible en una base común de vectores propios. En efecto, planteamos la diagonalización del operador \hat{A}

$$\begin{aligned} \hat{A}|a\rangle &= a|a\rangle & / \hat{B} \rightarrow \\ \hat{B}\hat{A}|a\rangle &= a\hat{B}|a\rangle. \end{aligned}$$

Pero $\hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B}$, con lo cual

$$\hat{A}(\hat{B}|a\rangle) = a(\hat{B}|a\rangle). \quad (5.75)$$

La lectura de esta ecuación es inmediata: $\hat{B}|a\rangle$ es autovector de \hat{A} con autovalor a , por lo que $\hat{B}|a\rangle$ y $|a\rangle$ son proporcionales

$$\hat{B}|a\rangle = \lambda|a\rangle. \quad (5.76)$$

Esta ecuación representa una ecuación de valores propios para el operador \hat{B} . Llamaremos su autovalor b y readecuamos la notación del autovector: $|a\rangle \rightarrow |a\rangle_b$, de modo que

$$\hat{B}|a\rangle_b = b|a\rangle_b .$$

Sin caer en ambigüedad podemos readecuar la notación del autoestado $|a\rangle_b$ haciendo

$$|a\rangle_b \rightarrow |ab\rangle ,$$

Se subentiende que los rótulos a y b denotan autovalores de los operadores \hat{A} y \hat{B} , respectivamente. Con ésto, la condición de completitud se expresa

$$\sum_{a,b} |ab\rangle\langle ab| = \mathbb{1} .$$

La extensión de este resultado a tres o más operadores que conmutan entre si —conducente a igual número de rótulos para sus autovalores— es natural.

Podemos mencionar un par de casos en las cuales se evidencia la conmutatividad de dos operadores permitiendo la construcción de autoestados en una base común. Uno de ellos es el cuadrado del momentum angular orbital, \hat{L}^2 , con su componente z , \hat{L}_z : $[\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0$. En este caso los autoestados se rotulan $|l, m\rangle$. Otro caso de interés es cuando el hamiltoniano \hat{H} conmuta con \hat{L}^2 , conduciendo a una base cuyos elementos son de la forma $|n, l\rangle$.

En este mismo lenguaje revisemos dos operadores hermíticos que conmutan: \hat{x} e \hat{y} , que llevan asociados autovalores de la coordenada x e y , respectivamente. Estos operadores satisfacen $[\hat{x}, \hat{y}] = 0$, por lo que son diagonalizables en una base común cuyos autovectores son del tipo $|xy\rangle$. Así entonces,

$$\hat{x}|xy\rangle = x|xy\rangle , \quad \hat{y}|xy\rangle = y|xy\rangle .$$

La completitud de esta base se expresa $\int |xy\rangle dx dy \langle xy| = 1$. Este análisis se extiende para incluir la coordenada z mediante el operador \hat{z} que conmuta con los dos anteriores. Los autovectores se rotulan en tal caso $|xyz\rangle$, que en forma compacta denotamos como $|\mathbf{r}\rangle$.

5.13. Límites clásicos de la mecánica cuántica

El *Principio de Correspondencia* de la mecánica cuántica es una exigencia en la que se espera que para grandes números cuánticos, ella tienda a la mecánica clásica. Este fué un principio postulado por Bohr en 1920. La idea detrás de este principio es exigir que la teoría cuántica debe tener, como límite, la descripción clásica. Lo anterior bajo el supuesto razonable de que la teoría clásica es macroscópicamente correcta.

5.13.1. El teorema de Ehrenfest

Este teorema, presentado por Paul Ehrenfest, establece las leyes del movimiento para los valores de expectación de \hat{x} y \hat{p} de un sistema cuántico. Se obtiene que las ecuaciones de movimiento de tales valores de expectación son formalmente idénticas a las de Hamilton para la mecánica clásica. En particular, se observa que los conmutadores $[\dots, \dots]$ en mecánica cuántica desempeñan un papel análogo a los paréntesis de Poisson

Sea $|\psi\rangle$ un vector de estado y denotemos

$$\hat{H}|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle \equiv i\hbar \left| \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\rangle.$$

Entonces,

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle_\psi = \frac{d}{dt}\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \underbrace{\left\langle \frac{\partial \psi}{\partial t} \right|}_{-\frac{1}{i\hbar}\langle \psi | \hat{H}} \hat{A} | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{A} \left| \frac{\partial \psi}{\partial t} \right\rangle_{\frac{1}{i\hbar}\hat{H}|\psi\rangle}.$$

Reagrupando términos resulta directo observar entonces,

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{A} \rangle_\psi = \frac{1}{i\hbar}\langle \psi | [\hat{A}, \hat{H}] | \psi \rangle + \langle \psi | \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} | \psi \rangle. \quad (5.77)$$

Consideramos ahora el hamiltoniano de una partícula en presencia de un potencial local. Entonces,

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}). \quad (5.78)$$

En el caso $\hat{A} = \hat{x}$, obtenemos

$$[\hat{x}, \hat{H}] = \frac{1}{2m}[\hat{x}, \hat{p}^2] = i\frac{\hbar}{m}\hat{p},$$

resultado inmediato al usar $[\hat{x}, \hat{p}^n] = i\hbar n \hat{p}^{n-1}$. Para el caso $\hat{A} = \hat{p}$ se obtiene

$$[\hat{p}, \hat{H}] = [\hat{p}, V(\hat{x})] = -i\hbar \frac{\partial V(\hat{x})}{\partial \hat{x}},$$

el que también es inmediato si usamos $[\hat{p}, \hat{x}^n] = -i\hbar n \hat{x}^{n-1}$. Con ambos resultados verificamos que

$$[\hat{x}, \hat{H}] = i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}}, \quad (5.79)$$

$$[\hat{p}, \hat{H}] = -i\hbar \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}}. \quad (5.80)$$

Sustituyendo estos resultados en la Ec. (5.77) para las ecuaciones de movimiento obtenemos

$$\frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} = \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}} \right\rangle = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m} \quad \rightarrow \quad v_x = \frac{\bar{p}_x}{m}, \quad (5.81)$$

$$\frac{d\langle \hat{p} \rangle}{dt} = -\left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{x}} \right\rangle = -\left\langle \frac{\partial V(\hat{x})}{\partial \hat{x}} \right\rangle \quad \rightarrow \quad \frac{d\bar{p}_x}{dt} = F_x. \quad (5.82)$$

Es notable la similitud de estas ecuaciones con las que se obtienen en el contexto de la mecánica clásica. Note que los valores de expectación contienen implícitamente la función de onda $|\psi\rangle$.

5.13.2. Las ecuaciones de Hamilton-Jacobi

Consideremos la ecuación de Schrödinger para una partícula,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (5.83)$$

En esta ecuación ψ es una función compleja, por lo que queda representada por su parte real y parte imaginaria. Una forma alternativa de representarla es mediante dos funciones reales, A y S tales que

$$\psi(\mathbf{r}, t) = A e^{iS/\hbar}. \quad (5.84)$$

Tanto A como S son funciones de las coordenadas y del tiempo, es decir

$$S = S(\mathbf{r}, t), \quad A = A(\mathbf{r}, t).$$

Podemos buscar entonces las ecuaciones que satisfacen estas nuevas funciones. Sustituyendo $\psi = A e^{iS/\hbar}$ en la ecuación de Schrödinger, separando la parte real de la imaginaria se obtiene

$$\frac{1}{2m} \left[\frac{\hbar^2}{A} \nabla^2 A - (\nabla S) \cdot (\nabla S) \right] - V = \frac{\partial S}{\partial t}, \quad (5.85)$$

$$-\frac{1}{2m} [2(\nabla A) \cdot (\nabla S) + A \nabla^2 S] = \frac{\partial A}{\partial t}. \quad (5.86)$$

Notar que $|\psi|^2 = A^2 \equiv \rho$, la densidad de probabilidad. Entonces, $\nabla \rho = 2A \nabla A$. Sustituyendo en la Ec. (5.86) y utilizando $\nabla \cdot (\rho \nabla S) = \rho \nabla^2 S + (\nabla \rho) \cdot (\nabla S)$, se obtiene la reconocida ecuación de continuidad

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{m} \nabla \cdot (\rho \nabla S) = 0 \quad \Rightarrow \quad \nabla \cdot \mathbf{J} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \quad (5.87)$$

donde hemos identificado la densidad de corriente,

$$\mathbf{J} = \frac{1}{m} \rho \nabla S .$$

Notar que \mathbf{J} tiene la estructura de densidad \times vector, la que sugiere la definición de la velocidad

$$\mathbf{v} = \frac{1}{m} \nabla S ; .$$

Por otra parte, si reagrupamos los términos de la Ec. (5.85) obtenemos

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\nabla S) \cdot (\nabla S) + \{V + Q\} = 0 , \quad (5.88)$$

donde se ha definido

$$Q = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 A}{A} = -\frac{\hbar^2}{2m\sqrt{\rho}} \nabla^2(\sqrt{\rho}) . \quad (5.89)$$

La Ec. (5.88) representa la ecuación de Hamilton-Jacobi para la acción. En este caso, sin embargo, se identifica el término Q como una contribución inherentemente cuántica, dependiente de la densidad de probabilidad ρ , que desaparece en el límite $\hbar \rightarrow 0$. A este término también se le conoce como *presión cuántica*, el cual es una consecuencia del principio de incertidumbre de Heisenberg. Claramente es un término que cobra importancia ante densidades no uniformes, como lo pudiera ser un confinamiento.

La Ec. (5.88) para la acción S puede ser reescrita si sustituimos

$$\nabla S = m\mathbf{v} ,$$

y calculamos el gradiente de todos sus términos. Es directo obtener

$$m \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla(V + Q) , \quad (5.90)$$

para la que se utilizó

$$\frac{D\mathbf{v}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} ,$$

correspondiente a la *derivada convectiva* (también citada como derivada de Lagrange o de Stokes) del campo de velocidades, es decir la variación del campo a lo largo de las líneas de flujo (velocidades). La estructura de ésta es idéntica a la ecuación de Newton en su Segunda Ley, al identificar las fuerzas clásicas \mathbf{f}_{cl} y cuánticas \mathbf{f}_q dadas por

$$\mathbf{f}_{cl} = -\nabla V ; \quad \mathbf{f}_q = -\nabla Q .$$

Ante la derivada convectiva conviene recordar lo siguiente. Si $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$ es un campo, entonces ante una variación $\delta\mathbf{r}$ y δt se tiene que

$$\delta F_i = \frac{\partial F_i}{\partial x_j} \delta x_j + \frac{\partial F_i}{\partial t} \delta t .$$

Ahora, si $\delta\mathbf{r}$ corresponde al arrastre del campo de velocidades \mathbf{v} en un lapso δt , entonces $\delta\mathbf{r} = \mathbf{v}\delta t$, o bién

$$\delta x_j = v_j \delta t .$$

Con lo anterior,

$$\delta F_i \rightarrow DF_i = (\mathbf{v} \cdot \nabla) F_i \delta t + \frac{\partial F_i}{\partial t} \delta t .$$

En esta última ' D ' simboliza variación a lo largo de las líneas de velocidades, en un sistema localmente en reposo con el flujo.

Capítulo 6

Aplicaciones menos elementales

6.1. Sistema cuántico de dos niveles

Antes de entrar al tema del spin propiamente tal, estudiemos el caso general de un sistema que permita sólo dos estados, $|\Psi_A\rangle$ y $|\Psi_B\rangle$. Para simplificar consideremos que sus autoenergías son ϵ y $-\epsilon$, respectivamente. Este supuesto se puede revisar más adelante para incluir el caso de dos energías arbitrarias.

Veamos hasta qué límite podemos determinar el hamiltoniano del sistema con sólo estos datos. Dado que el hamiltoniano debe ser hermítico, su forma 2×2 más general está dada por

$$H = \begin{pmatrix} c & a - ib \\ a + ib & d \end{pmatrix},$$

donde a , b , c y d son constantes reales. Esta construcción garantiza que el hamiltoniano sea hermítico. La ecuación de valores propios que determinan las autoenergías es $\det(H - EI) = 0$, de la cual obtenemos el polinomio característico

$$(c - E)(d - E) - a^2 - b^2 = 0.$$

Dado que $E = \pm\epsilon$ son autovalores, entonces

$$(c - \epsilon)(d - \epsilon) = a^2 + b^2; \tag{6.1}$$

$$(c + \epsilon)(d + \epsilon) = a^2 + b^2. \tag{6.2}$$

De aquí se infiere $c + d = 0$, o sea $d = -c$. Por lo tanto

$$a^2 + b^2 + c^2 = \epsilon^2. \tag{6.3}$$

Es decir, tenemos completa libertad en escoger los coeficientes a , b y c , salvo la restricción de que ellos se ubiquen en la superficie de una esfera de radio ϵ . Una manera de cumplir con lo anterior es representando

$$a = \epsilon \cos \theta; \quad b = \epsilon \sin \theta \cos \phi \quad c = \epsilon \sin \theta \sin \phi ,$$

con θ y ϕ dos ángulos arbitrarios introducidos sólo por conveniencia. En tal sentido ellos no tienen interpretación geométrica. Las soluciones más simples a la ecuación (6.3) son:

a) Para $a = 1$, $b = 0$ y $c = 0$, equivalente a $(\theta = \pi/2; \phi = 0)$, se obtiene

$$\hat{H} = \epsilon \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} .$$

b) Para $a = 0$, $b = 1$ y $c = 0$, equivalente a $(\theta = \pi/2; \phi = \pi/2)$, se obtiene

$$\hat{H} = \epsilon \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} .$$

c) Para $a = 0$, $b = 0$ y $c = 1$, equivalente a $(\theta = 0; \phi = 0)$, se obtiene

$$\hat{H} = \epsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

Es interesante notar que cualquiera de los tres hamiltonianos de arriba reproduce el mismo espectro: $E = \pm\epsilon$. Veremos más adelante que las tres matrices que aquí surgen son las denominadas *matrices de Pauli*, inherentes a cualquier sistema de dos niveles.

Para completar este análisis consideremos el caso más general, donde el espectro está dado por las energías ϵ_A y ϵ_B . Este espectro también se puede representar mediante

$$E = \bar{E} \pm \epsilon ,$$

con $\bar{E} = (\epsilon_A + \epsilon_B)/2$, y $\epsilon = (\epsilon_A - \epsilon_B)/2$. Nuevamente nos preguntamos por el hamiltoniano de 2×2 que de cuenta de este espectro. Observe que el problema es equivalente al caso anterior dado que sólo hemos de cambiar $a \rightarrow a' = a - \bar{E}$, y $b \rightarrow b' = b - \bar{E}$. A partir de este cambio el resto del desarrollo es idéntico al ya estudiado. Con ello resulta claro que cualquier sistema de *dos niveles* se reduce a un problema de autovalores donde participan las matrices de Pauli.

Ejercicio 6.1 Considere dos estados normalizados $|\phi_1\rangle$ y $|\phi_2\rangle$ de un hamiltoniano \hat{H} con

autovalores E_1 y E_2 , respectivamente.

a) Demuestre que $|\phi_1\rangle$ y $|\phi_2\rangle$ son ortogonales.

b) Para el estado $|\psi^{(-)}\rangle = (|\phi_1\rangle - |\phi_2\rangle)/\sqrt{2}$, evalúe $\langle \hat{H} \rangle$ y ΔE .

c) Sea $|\phi(t=0)\rangle = |\psi^{(-)}\rangle$. Determine $|\phi(t)\rangle$.

c) Considere el operador \hat{S} definido por $\hat{S}|\phi_1\rangle = |\phi_2\rangle$, y $\hat{S}|\phi_2\rangle = |\phi_1\rangle$. Verifique que \hat{S} es hermítico y determine sus autoestados en la base $|\phi_1\rangle$ y $|\phi_2\rangle$.

d) Suponga que en $t = 0$ el sistema se encuentra en el estado $|\psi^{(-)}\rangle$ correspondiente al autovalor $s = -1$. Determine la probabilidad de encontrar $s = -1$ en una medición de \hat{S} en un instante t posterior.

6.2. Spin y momento magnético

Cuando la línea de sodio $\lambda = 589.3$ nm es examinada con alta resolución se observa que en realidad está formada por dos líneas extremadamente cercanas: 589.0 nm y 589.6 nm. La diferencia entre ellas es de 0.1 %. Esta estructura fina no puede ser descrita con la ecuación de Schrödinger por si sola. Desdoblamientos similares son observados en el espectro de los átomos cuando son expuestos a campos magnéticos. Estos fenómenos conducen a la hipótesis de un nuevo número cuántico asociado al electrón: *el spin*. En el caso del electrón (e) su valor es $\hbar/2$, al igual que los protones (p), neutrones (n), muones (μ), etc.

6.2.1. Electrones bajo el efecto de un campo magnético

Empíricamente, cuando electrones son sometidos a campos magnéticos se detectan fotones, de energía $h\nu$. Cuando esto ocurre podemos pensar en un sistema cuántico de dos niveles, donde el fotón es resultado de una transición desde el nivel de mayor energía al de menor. Si la diferencia de energía entre estos dos niveles es ΔE , entonces

$$h\nu = \Delta E .$$

Así entonces, el hamiltoniano se puede representar como una matriz de 2×2 .

Clásicamente la energía de un momento magnético se expresa mediante

$$U = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} .$$

Si nos valemos de esta idea, tratando de conciliarla con un hamiltoniano de dos niveles,

entonces podemos pensar en un hamiltoniano de forma

$$H = -\mu B \begin{pmatrix} a & b - ic \\ b + ic & -a \end{pmatrix} .$$

Los autovalores de este hamiltoniano son $E = \pm\mu B$, con $a^2 + b^2 + c^2 = 1$. Sin perder generalidad, es interesante notar que H se puede escribir de la siguiente forma:

$$H = -\mu B(\sigma_x n_x + \sigma_y n_y + \sigma_z n_z) ,$$

con

$$\begin{aligned} n_x &= \sin \theta \cos \phi ; \\ n_y &= \sin \theta \sin \phi ; \\ n_z &= \cos \theta . \end{aligned} \tag{6.4}$$

Las matrices σ son de 2×2 , denominadas matrices de Pauli y definidas por

$$\sigma_x \equiv \sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma_y \equiv \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} , \quad \sigma_z \equiv \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

Lo anterior sugiere la construcción

$$H = -\mu \vec{B} \cdot \vec{\sigma}$$

Las autoenergías son $\pm\mu B$, de modo que las transiciones conllevan a energías $h\nu = 2\mu B$. La frecuencia ν crece linealmente con la intensidad del campo magnético, lo cual es constatado experimentalmente. La tecnología asociada al EPR (Electron Paramagnetic Resonance) se vale de esta frecuencia, la cual es ajustada para inducir resonancias.

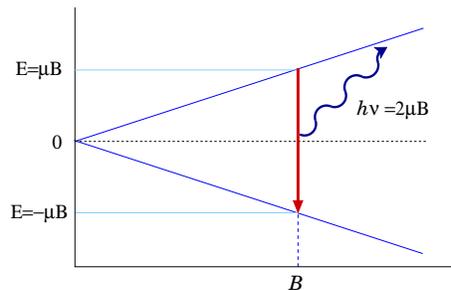


Figura 6.1: Emisión de un fotón debido a un sistema de dos niveles.

Ejercicio 6.2 Verifique que $\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = 1$; $\sigma_1\sigma_2 = i\sigma_3$; $\sigma_2\sigma_3 = i\sigma_1$; $\sigma_3\sigma_1 = i\sigma_2$; por lo tanto $\sigma_i\sigma_j = \delta_{ij} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k$.

Ejercicio 6.3 Demuestre que $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k$.

Ejercicio 6.4 Sea \mathbf{a} un vector de componentes reales en 3D y $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a} = a_1\sigma_1 + a_2\sigma_2 + a_3\sigma_3$. Demuestre que $e^{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}} = I \cos a + i(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{a}}) \sin a$.

Ejercicio 6.5 Sean \mathbf{a} y \mathbf{b} dos vectores que conmutan con $\boldsymbol{\sigma}$. Demuestre

a) $(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma})(\mathbf{b} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})$;

b) $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \mathbf{a} + i\mathbf{a} \times \boldsymbol{\sigma}$;

c) $[\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{a} \cdot \boldsymbol{\sigma}] = 2i\mathbf{a} \times \boldsymbol{\sigma}$.

6.2.2. Razón giromagnética y magnetones

Consideremos un sistema con masa distribuida, la cual por rotación conlleva cierto momentum angular. Si además hay cargas arrastradas, habrán corrientes y por ende momento magnético. La *razón giromagnética* da cuenta de la proporcionalidad entre el momento angular ℓ del sistema (debido a la rotación de masa) y el momento magnético $\boldsymbol{\mu}$ debido a las cargas arrastradas. Este coeficiente se denota γ , de modo que

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma \boldsymbol{\ell}.$$

Claramente la razón giromagnética tiene dimensiones de [momento magnético]/[momentum angular]. Si las cargas responsables del momento magnético son negativas, entonces $\gamma < 0$. En este caso el momento magnético se orienta en sentido opuesto al momentum angular.

A fin de construir un patrón adecuado para caracterizar el momento magnético es útil valerse de la relación clásica entre el 'giro' y el momento magnético. Clásicamente, el momento magnético $\boldsymbol{\mu}$ asociado a una corriente circulante i está dado por (sistema gaussiano)

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{i}{c} A \hat{\mathbf{n}},$$

con A el área de la espira y $\hat{\mathbf{n}}$ la dirección normal al plano de la espira. En el sistema SI éste es $\boldsymbol{\mu} = iA\hat{\mathbf{n}}$. Es fácil comprobar que si concebimos que una partícula de carga q y masa m circulando en una espira circunferencial, su momento magnético $\boldsymbol{\mu}$ y momentum angular $\boldsymbol{\ell}$ se relacionan mediante

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2mc} \boldsymbol{\ell}.$$

Este vínculo entre el momento magnético y el momentum angular se hace extensivo al spin, o *momentum angular intrínseco*, donde $\boldsymbol{\ell} \rightarrow \mathbf{s}$. En el caso de los electrones,

$$\boldsymbol{\mu}_e = -g \frac{e}{2m_e c} \mathbf{s}. \quad (6.5)$$

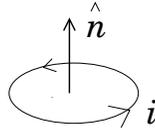


Figura 6.2: Dipolo magnético debido a una espira.

Como magnitud de referencia se define el magnetón de Bohr mediante

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c},$$

de modo que

$$\boldsymbol{\mu}_e = -g \frac{\mu_B}{\hbar} \mathbf{s}. \quad (6.6)$$

La constante g recibe el nombre de *factor g* ('*g-factor*' en inglés), que en el caso del electrón se ha medido experimentalmente con alta precisión. Su valor aceptado actualmente es

$$g = 2,0023193043617(15).$$

El valor $g = 2$ fué explicado por Dirac en su la teoría para el electrón. Las cifras después del segundo decimal son explicables mediante la electrodinámica cuántica (*Quantum Electrodynamics* o *Q.E.D* en inglés), donde g es evaluado teóricamente mediante $g = 2(1 + \alpha/2\pi + \dots)$. Aquí, α representa la constante de estructura fina.

En el *Sistema Internacional de Unidades* la densidad de flujo magnético, usualmente denotada por B , se expresa en tesla. Por lo tanto, el momento magnético queda expresado en joule/tesla. En este mismo sistema el magnetón de Bohr queda expresado por $\mu_B = e/2m_e$, sin c en el denominador. Al sustituir los valores de e y m_e se obtiene

$$\mu_B = 9,27400 \times 10^{-24} \text{ J/T}.$$

Considerando la equivalencia $1 \text{ J} = 6,242 \times 10^{18} \text{ eV}$, entonces

$$\mu_B = 5,788 \times 10^{-5} \text{ eV/T}.$$

Al igual que el electrón, los protones y neutrones también exhiben momento magnético. Para estos sistemas es conveniente utilizar un patrón de escala diferente al del electrón debido a la masa participante. Recordar que el protón es del orden de 1800 veces más masivo que el electrón. Se define entonces

$$\boldsymbol{\mu} = g \frac{e}{2Mc} \mathbf{s} \stackrel{\text{def}}{=} g \frac{\mu_N}{\hbar} \mathbf{s}, \quad (6.7)$$

con

$$\mu_N = \frac{e\hbar}{2Mc} ,$$

el magnetón nuclear. Aquí M representa la masa del nucleón. El valor numérico es $\mu_N = 3,152 \times 10^{-8}$ eV/T. El factor g para el protón es $g_p = 5,59$, mientras que para el neutrón se tiene $g_n = -3,85$. Notar que el neutrón, a pesar de ser eléctricamente neutro, exhibe momento magnético. Esto es una indicación de que el neutrón tiene una distribución inhomogénea de cargas. Teorías actuales muestran que el neutrón está formado por tres *quarks* en configuración *udd*. El quark *u* (up) aporta carga $2e/3$ mientras que cada quark *d* (down) aporta $-e/3$. La configuración *udd* tiene carga nula.

6.2.3. El momentum angular del electrón

En la sección anterior definimos la razón giromagnética mediante $\boldsymbol{\mu} = \gamma \boldsymbol{\ell}$. Para un electrón definamos el momento angular *intrínseco*,

$$\boldsymbol{\ell} \rightarrow \boldsymbol{s} \equiv \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} .$$

Así entonces,

$$\boldsymbol{\mu} = \gamma \boldsymbol{s} = \gamma \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} .$$

Lo que hemos hecho hasta ahora es meramente una divagación sobre la estructura que debe tener un sistema de dos niveles, conciliado con la estructura que debe tener un momento magnético o angular del electrón afectado. En tal sentido, el electrón pareciera tener un momentum angular *intrínseco*, el cual sería responsable de sus dos niveles de energía cuando es sometido a un campo magnético. Es interesante hacer notar que el *spin* tiene estructura matricial, caracterizado por matrices de 2×2 . Lo que sigue entra en el terreno de *postulados* (o adivinanza), donde se introduce la hipótesis del *spin* del electrón. Las consecuencias de tal hipótesis deben ser contrastadas con experimentos.

Demostraremos más adelante que el electrón, cuyo momento magnético intrínseco está dado por

$$\boldsymbol{s} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} ,$$

tiene spin $\frac{1}{2}\hbar$. Cada una de las tres componentes de $\boldsymbol{\sigma}$ está dada por las matrices de Pauli. Por lo tanto los operadores de spin satisfacen el álgebra de momentum angular

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{s}_k .$$

6.2.4. Electrones sometidos a un campo magnético

Estudiemos un electrón en presencia de un campo magnético. El momento magnético del electrón $\boldsymbol{\mu} = -g\mu_B\hat{s}$ se acopla con el campo magnético externo, de modo que al despreciar su movimiento translacional el hamiltoniano queda dado por

$$H = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}. \quad (6.8)$$

Consideremos $\mathbf{B} = B_0 \hat{z}$, entonces

$$H = + \underbrace{g\mu_B \frac{\hbar}{2}}_{E_0} B_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (6.9)$$

Resolvemos $\hat{H}|\Phi\rangle = i\hbar\partial_t|\Phi\rangle$, con $|\Phi\rangle$ un vector columna de dos componentes llamado *spinor*. Matricialmente, si denotamos

$$|\Phi\rangle = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix},$$

obtenemos la ecuación

$$E_0 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix} = i\hbar\partial_t \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}. \quad (6.10)$$

Se trata de una ecuación diferencial de 2×2 para las componentes $\varphi_1(t)$ y $\varphi_2(t)$. Explícitamente,

$$i\hbar(\partial\varphi_1/\partial t) = E_0\varphi_1, \quad i\hbar(\partial\varphi_2/\partial t) = -E_0\varphi_2.$$

Sus soluciones son $\varphi_1 = a_1 e^{-iE_0 t/\hbar}$ y $\varphi_2 = a_2 e^{iE_0 t/\hbar}$, con a_1 y a_2 dos constantes que dependen de las condiciones iniciales. Con ello podemos escribir la solución

$$|\Phi\rangle = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-iE_0 t/\hbar} + a_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{iE_0 t/\hbar}.$$

Este procedimiento para obtener la solución $|\Phi\rangle$ es matemáticamente bastante directo, incluso en casos en que el campo magnético no esté alineado en la dirección espacial z . No obstante, nos valdremos de un enfoque *a la Dirac* que nos permite una visualización más intuitiva de los resultados.

Comencemos por diagonalizar matricialmente el hamiltoniano, para lo cual consideramos la ecuación de valores propios $\hat{H}|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle$. Se obtienen los autovalores $E = \pm E_0$, cuyos autovectores respectivos $|\Phi_{1,2}\rangle$ resultan

$$|\Phi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\Phi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (6.11)$$

Evidentemente son autovectores ortogonales y conforman una base completa. Para explicitar la evolución temporal denominemos $|\Psi_0\rangle$ el estado inicial ($t = 0$), entonces

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{\alpha=1,2} |\Phi_\alpha\rangle \underbrace{\langle \Phi_\alpha | \Psi_0 \rangle}_{c_\alpha}. \quad (6.12)$$

La evolución temporal resulta evidente al considerar $|\Psi_t\rangle = \exp(-i\hat{H}t/\hbar)|\Psi_0\rangle$. Entonces,

$$\begin{aligned} |\Psi_t\rangle &= \exp(-i\hat{H}t/\hbar) \sum_{\alpha=1,2} |\Phi_\alpha\rangle c_\alpha \\ &= \sum_{\alpha=1,2} e^{-iE_\alpha t/\hbar} |\Phi_\alpha\rangle c_\alpha \quad \Rightarrow \\ |\Psi_t\rangle &= c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-iE_0 t/\hbar} + c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{+iE_0 t/\hbar}. \end{aligned} \quad (6.13)$$

Las constantes c_1 y c_2 dependen de la condición inicial, vale decir de la manera con que se prepara el estado en $t = 0$. La condición de normalización de la función de onda conduce a $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$. Indaguemos algo más acerca del comportamiento de la solución, denotando $\hbar\omega = E_0$.

1. Valor de expectación de \hat{s}_z

Calculamos en este caso $\langle \hat{s}_z \rangle_\Psi = \langle \Psi | \frac{\hbar}{2} \sigma_z | \Psi \rangle$, para lo cual comenzamos evaluando $\sigma_z |\Psi\rangle$:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} |\Psi_t\rangle = c_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\omega t} - c_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{+i\omega t}. \quad (6.14)$$

Para la construcción de $\langle \Psi |$ transponemos y conjugamos las componentes del spinor $|\Psi\rangle$, vale decir,

$$\langle \Psi_t | = c_1^* \overline{\begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}} e^{+i\omega t} + c_2^* \overline{\begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}} e^{-i\omega t} \quad (6.15)$$

Entonces,

$$\langle \Psi_t | \hat{s}_z | \Psi_t \rangle = \frac{1}{2} \hbar (|c_1|^2 - |c_2|^2), \quad (6.16)$$

demostrando que $\langle \hat{s}_z \rangle_\Psi$ es independiente del tiempo, consistente con el hecho de que \hat{s}_z conmuta con el hamiltoniano, $[\hat{H}, \hat{s}_z] = 0$.

Ante este resultado observamos una situación de interpretación inmediata, que ocurre cuando $|c_1| = 1$, mientras $|c_2| = 0$. Aquí, los estados iniciales son del tipo $|\uparrow\rangle$. En este caso $\langle \Psi_t | \hat{s}_z | \Psi_t \rangle = \frac{1}{2} \hbar$: la proyección de s_z se mantiene inalterable en la dirección z . Lo mismo ocurre si $|c_1| = 0$, pero $|c_2| = 1$, donde los estados iniciales son del tipo $|\downarrow\rangle$. En este caso $\langle \Psi_t | \hat{s}_z | \Psi_t \rangle = -\frac{1}{2} \hbar$. El caso en que el estado inicial tiene igual proporción de estados $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$ conlleva $\langle \Psi_t | \hat{s}_z | \Psi_t \rangle = 0$, constante en el tiempo.

2. Valor de expectación de \hat{s}_x

Esta vez calculamos $\langle \hat{s}_x \rangle_\Psi$ teniendo presente la Ec. (6.13) para $|\Psi_t\rangle$. Es simple verificar

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} |\Psi_t\rangle = c_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{+i\omega t} + c_1 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{-i\omega t}, \quad (6.17)$$

con lo cual

$$\langle \Psi_t | \hat{s}_x | \Psi_t \rangle = \frac{1}{2} \hbar (c_1^* c_2 e^{2i\omega t} + c_1 c_2^* e^{-2i\omega t}) = \hbar \operatorname{Re}\{c_1^* c_2 e^{2i\omega t}\}. \quad (6.18)$$

Un procedimiento análogo se hace para obtener $\langle \hat{s}_y \rangle_\Psi$.

3. Determinación del spin en $t = 0$.

Las constantes c_1 y c_2 quedan determinadas con la medición de algún observable en un instante determinado. Supongamos que en $t = 0$ la orientación del spin se alinea completamente según el eje x , vale decir

$$\hat{s}_x |\Psi_{t=0}\rangle = \frac{\hbar}{2} |\Psi_{t=0}\rangle.$$

Utilizando la Ec. (6.17) para $\sigma_x |\Psi\rangle$ obtenemos

$$\begin{pmatrix} c_2 \\ c_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}, \quad (6.19)$$

con lo cual $c_1 = c_2$. Puesto que $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$, entonces

$$c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (6.20)$$

donde hemos tomado fase nula. Con estas constantes obtenemos para los valores medios de las componentes de spin,

$$\begin{aligned} \langle \hat{s}_x \rangle_\Psi &= \frac{1}{2} \hbar \cos(2\omega t), \\ \langle \hat{s}_y \rangle_\Psi &= \frac{1}{2} \hbar \sin(2\omega t), \\ \langle \hat{s}_z \rangle_\Psi &= 0. \end{aligned} \quad (6.21)$$

Se observa que el spin precesa en el plano xy , con proyección nula según el eje z . La frecuencia de la precesión es

$$\Omega = g\mu_B B_0,$$

reconocida como *frecuencia de Larmor*.

4. Spin inicial en dirección arbitraria \hat{n}

En esta aplicación abordamos el caso general en el cual el spin, en $t = 0$, coincide con alguna dirección espacial \hat{n} . Nos preguntamos entonces por los valores de expectación $\langle \hat{s}_x \rangle_\Psi$, $\langle \hat{s}_y \rangle_\Psi$ y $\langle \hat{s}_z \rangle_\Psi$. Denotemos, convenientemente,

$$\begin{aligned} n_x &= \sin \theta \cos \phi , \\ n_y &= \sin \theta \sin \phi , \\ n_z &= \cos \theta . \end{aligned} \quad (6.22)$$

Entonces,

$$\hat{n} \cdot \hat{s} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \quad (6.23)$$

La condición en $t = 0$ con el spin alineado en la dirección \hat{n} implica $(\hat{n} \cdot \hat{s})|\Psi\rangle = \frac{1}{2}\hbar|\Psi\rangle$. Así,

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta e^{-i\phi} \\ \sin \theta e^{i\phi} & -\cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} . \quad (6.24)$$

Luego de alguna manipulación algebraica directa se obtiene

$$c_2 = c_1 \tan(\theta/2) e^{i\phi} ,$$

con la restricción $|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1$. Sabemos que las constantes c_1 y c_2 se pueden determinar salvo por una fase. Una solución que emerge de estas ecuaciones es

$$\begin{aligned} c_1 &= \cos(\theta/2) e^{-i\phi/2} , \\ c_2 &= \sin(\theta/2) e^{+i\phi/2} , \end{aligned}$$

con lo cual

$$|\Psi_t\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) e^{-i\phi/2} e^{-i\omega t} \\ \sin(\theta/2) e^{+i\phi/2} e^{+i\omega t} \end{pmatrix} . \quad (6.25)$$

De aquí surgen en forma directa los valores de expectación para el spin. Si consideramos $\phi = 0$ para la orientación inicial \hat{n} , entonces

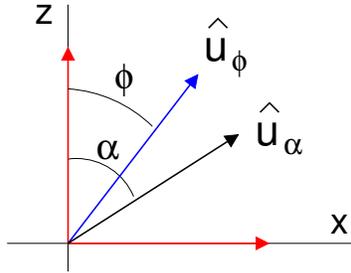
$$\begin{aligned} \langle \hat{s}_x \rangle_\Psi &= \frac{1}{2}\hbar \sin \theta \cos(2\omega t) , \\ \langle \hat{s}_y \rangle_\Psi &= \frac{1}{2}\hbar \sin \theta \sin(2\omega t) , \\ \langle \hat{s}_z \rangle_\Psi &= \frac{1}{2}\hbar \cos \theta . \end{aligned} \quad (6.26)$$

Una representación gráfica de este resultado se ilustra en la Fig. (6.3), donde se observa la precesión del spin en torno al eje z , coincidente con la dirección del campo magnético. La frecuencia angular de esta precesión corresponde a la frecuencia de Larmor, dada por

$$\Omega = 2\omega = 2 \frac{E_0}{\hbar} = g\mu_B B_0 .$$

por lo que $(\mathbf{a} \cdot \mathbf{P})$ y \mathbf{P}^2 son constantes de movimiento.

Ejercicio 6.10 Considere el vector unitario \hat{u}_ϕ en el plano (z, x) : $\hat{u}_\phi = \cos \phi \hat{z} + \sin \phi \hat{x}$. Denotamos $\hat{S}_\phi = \hat{S} \cdot \hat{u}_\phi$, la componente del spin de un electrón a lo largo de \hat{u}_ϕ .



- Determine los autovalores de \hat{S}_ϕ .
- Se denotan los autovectores de \hat{S}_ϕ por $|+\phi\rangle$ y $|-\phi\rangle$, los cuales para $\phi = 0$, se reducen a los autovectores $|+\rangle$ y $|-\rangle$ de \hat{S}_z . Exprese $|\pm\phi\rangle$ en términos de $|\pm\rangle$.
- Suponga que un electrón es preparado en el estado $|+\phi\rangle$. Se mide la componente \hat{S}_α del spin en la dirección $\hat{u}_\alpha = \cos \alpha \hat{z} + \sin \alpha \hat{x}$. Determine la probabilidad $P_+(\alpha)$ para encontrar al electrón en el estado $|+\alpha\rangle$.
- Calcule el valor de expectación $\langle \hat{S}_\alpha \rangle_\phi \equiv \langle +\phi | \hat{S}_\alpha | +\phi \rangle$. ¿En qué caso se da $\langle \hat{S}_\alpha \rangle_\phi = 0$? Interprete.

Ejercicio 6.11 Considere el operador $\hat{s}_\beta = \hat{s}_z \cos \beta + \hat{s}_x \sin \beta$, donde \hat{s}_x y \hat{s}_z corresponden a las componentes x y z de spin, respectivamente. Encuentre los autovalores y autovectores asociados a \hat{S}_β . Exprese los autoestados de \hat{S}_β en la base en que el operador s_z es diagonal.

Ejercicio 6.12 Considere un electrón en presencia de un campo magnético uniforme $\vec{B} = B_0 \hat{z}$. Despreciando el movimiento del electrón, obtenga $\mathbf{s}(t)$ sujeto a que inicialmente el spin del electrón está completamente alineado en la dirección vectorial \hat{n} . Calcule entonces \mathbf{P} como función del tiempo e ilustre su precesión. Utilice $\hat{n} = \sin \theta \cos \phi \hat{x} + \sin \theta \sin \phi \hat{y} + \cos \theta \hat{z}$.

- Exprese los autoestados de \hat{s}_x y \hat{s}_y usando como base los autoestados de \hat{s}_z .
- Si el spin \hat{s}_x es medido cuando la partícula está en un autoestado del operador \hat{s}_y , ¿cuáles son los posibles resultados y con qué probabilidad?
- Construya la matriz correspondiente a \hat{s}_x utilizando los autoestados de \hat{s}_y encontrados en 1.

Ejercicio 6.13 Considere los espinores χ y ϕ que satisfacen las ecuaciones

$$\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \phi + 2mc i \chi = 0 \quad \hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} c \chi - i\hbar \partial_t \phi = 0.$$

- a) Demuestre que ambos espinores satisfacen la ecuación de Schrödinger.
- b) Considere $\phi = \begin{pmatrix} e^{i\eta_1} \cos \xi \\ e^{i\eta_2} \sin \xi \end{pmatrix}$. Calcule $\frac{1}{2} \langle \hat{\sigma} \rangle_\phi$ y determine su orientación espacial.

6.2.5. Respuesta clásica de dipolo a campo externo

Es instructivo contrastar los resultados anteriores (cuánticos) con la respuesta clásica de un dipolo magnético sometido a un campo externo. Las ecuaciones a resolver son totalmente clásicas, pero tomaremos ventaja de las matrices de Pauli y sus propiedades para la resolución de las ecuaciones del movimiento.

A fin de distinguir esta aplicación de las anteriores, denotaremos por \mathbf{m} al momento magnético (a diferencia de $\boldsymbol{\mu}$ utilizado en la sección anterior). Nuevamente relacionamos \mathbf{m} con el momentum angular $\boldsymbol{\ell}$ mediante

$$\mathbf{m} = \gamma \boldsymbol{\ell} ,$$

con γ la razón giromagnética. Bajo un campo magnético \mathbf{B} el torque sobre el dipolo está dado por $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{m} \times \mathbf{B}$. Entonces, la ecuación del movimiento queda dada por

$$\frac{d\boldsymbol{\ell}}{dt} = \gamma \boldsymbol{\ell} \times \mathbf{B} . \quad (6.27)$$

De esta relación surgen dos propiedades físicamente relevantes:

- a) Si \mathbf{B} es independiente del tiempo y se alinea en la dirección z , es decir $\mathbf{B} = B\hat{z}$, podemos multiplicar por \hat{z} ambos lados para obtener

$$\frac{d\ell_z}{dt} = 0 .$$

Por tanto, la componente del momento magnético según z es una constante de movimiento.

- b) Si esta vez multiplicamos por $\boldsymbol{\ell}$ ambos lados de la igualdad se infiere

$$\frac{d}{dt} (\boldsymbol{\ell} \cdot \boldsymbol{\ell}) = 0 ,$$

es decir, la magnitud ℓ es constante.

Falta entonces determinar el comportamiento de las componentes x e y del momentum angular. Calculemos el torque $\gamma B \boldsymbol{\ell} \times \hat{z}$.

$$\boldsymbol{\ell} \times \hat{z} = \begin{vmatrix} \hat{x} & \hat{y} & \hat{z} \\ \ell_x & \ell_y & \ell_z \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \hat{x} \ell_y - \hat{y} \ell_x = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \ell_x \\ \ell_y \end{pmatrix} .$$

La matriz de 2×2 corresponde a $-i\sigma_y$, donde σ_y representa la matriz 'y' de Pauli. Si esta vez $\boldsymbol{\ell}$ lo representamos como un vector 2D (recordar que ℓ_z es constante), entonces

$$\frac{d\boldsymbol{\ell}}{dt} = -i\omega\sigma_y \boldsymbol{\ell} ,$$

con $\omega = \gamma B$, la frecuencia de precesión de Larmor. Integrando en forma matricial

$$\boldsymbol{\ell} = e^{-i\omega t \sigma_y} \boldsymbol{\ell}_0 ,$$

expresión que garantiza que $|\boldsymbol{\ell}|$ es constante: $\boldsymbol{\ell}^\dagger \boldsymbol{\ell} = \boldsymbol{\ell}_0^\dagger \boldsymbol{\ell}_0$.

Por otro lado, recordando la identidad $e^{i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a}} = I \cos(a) + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{a}} \sin(a)$, identificando $\mathbf{a} = -\omega t \hat{y}$, resulta directo verificar que

$$\begin{pmatrix} \ell_x \\ \ell_y \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \cos(\omega t) & -\sin(\omega t) \\ \sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \ell_{0x} \\ \ell_{0y} \end{pmatrix} .$$

La interpretación de este resultado es directa. El vector momentum angular precesa con frecuencia angular $\omega = \gamma B$, con el eje z como directriz.

Es interesante notar que la Ec. (6.27) para $\boldsymbol{\ell}$ tiene su contraparte en la fuerza de Lorentz sobre una carga eléctrica q . En este caso la ecuación del movimiento está dada por

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{q}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} . \quad (6.28)$$

Observe el rol análogo que desempeña \mathbf{v} en esta ecuación con $\boldsymbol{\ell}$ en la Eq. (6.27). Por lo tanto si $\mathbf{B} = B\hat{z}$, entonces v_z y v^2 son constantes en el tiempo. Además, es directo comprobar que las componentes xy de la velocidad vienen dadas por

$$\mathbf{v} = e^{-i\omega_c t \sigma_y} \mathbf{v}_0 , \quad (6.29)$$

donde $\omega_c = qB/mc$, conocida como frecuencia de sincrotrón. La trayectoria se obtiene integrando al ecuación anterior

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + \frac{i}{\omega_c} e^{-i\omega_c t \sigma_y} \sigma_y \mathbf{v}_0 . \quad (6.30)$$

A partir de esta solución para \mathbf{r} podemos obtener el radio de la órbita. En efecto, el radio de la órbita (circunferencial) la obtenemos evaluando $R^2 = (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)^\dagger (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$. Puesto que $\sigma_y = \sigma_y^\dagger$, entonces

$$R^2 = \left(\mathbf{v}_0^\dagger \sigma_y e^{+i\omega_c t \sigma_y} \frac{-i}{\omega_c} \right) \left(\frac{i}{\omega_c} e^{-i\omega_c t \sigma_y} \sigma_y \mathbf{v}_0 \right) = \mathbf{v}_0^\dagger \frac{1}{\omega_c^2} \sigma_y^2 \mathbf{v}_0 = \frac{v_0^2}{\omega_c^2} = \frac{v_0^2 m^2 c^2}{q^2 B^2} .$$

Por lo tanto $R = v_0 mc/qB$.

También podemos verificar que la velocidad es perpendicular al vector radial $(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$, vale decir que $\mathbf{v}^\dagger (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = 0$. Usando las soluciones (6.29) y (6.30) para calcular $\mathbf{v}^\dagger (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$, obtenemos

$$\mathbf{v}^\dagger (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \mathbf{v}_0^\dagger e^{+i\omega_c t \sigma_y} \frac{i}{\omega_c} e^{-i\omega_c t \sigma_y} \sigma_y \mathbf{v}_0 = \frac{i}{\omega_c} \mathbf{v}_0^\dagger \sigma_y \mathbf{v}_0 .$$

Es directo verificar, usando la forma explícita de σ_y , que $\mathbf{v}_0^\dagger \sigma_y \mathbf{v}_0 = 0$.

6.3. Momentum angular

6.3.1. Momentum angular orbital

Al igual que en un sistema clásico, el momentum angular orbital de una partícula en presencia de una fuerza central se conserva, siendo ésta una constante de movimiento. La construcción natural del momentum angular es una extensión de la definición clásica, vale decir,

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} , \quad (6.31)$$

donde $[\hat{x}_i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta_{ij}$. Con esta definición es directo verificar que $\hat{\mathbf{L}}$ es hermítico y que además satisface el álgebra

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k . \quad (6.32)$$

A esta última se le llama *álgebra de momentum angular*, que conlleva a propiedades bastante generales compartidas por otras cantidades como lo son el spin o el isospín, cantidades físicas que no tienen análogo clásico.

6.3.2. Isospín

El operador de isospín surge en forma análoga a como se hizo para el spin. Tempranamente Heisenberg observó algunas particularidades de la interacción entre dos protones (pp),

dos neutrones (nn) y protón-neutrón (pn). En primer lugar, la diferencia entre sus masas no excede un 0,14 % ($m_p = 938,27$ MeV; $m_n = 939,57$ MeV; $\Delta m = 1,3$ MeV), lo que los torna casi indistinguibles con respecto a sus masas. Además, estudios de colisiones entre nucleones indican que, excepto por efectos debidos a la fuerza de Coulomb, las interacciones pp , nn y pn son casi idénticas. La equivalencia pp con nn se denomina *simetría de cargas*. La equivalencia entre las fuerzas pp/nn y pn se le reconoce como *independencia de carga*. Ambas se resumen en lo que se denomina *simetría de isospín*. Veamos como surgen los operadores asociados.

Así como se hizo para un sistema de dos niveles de energía, podemos pensar en un sistema con dos estados de carga, $\pm e/2$. La diferencia de carga entre estos dos estados es $+e$, la carga del electrón. Sin perder generalidad, podemos pensar en autovalores $\pm 1/2$. Si denotamos por \hat{t} el operador en cuestión, entonces su forma será

$$\hat{t} = \begin{pmatrix} c & a - ib \\ a + ib & -c \end{pmatrix},$$

con a , b y c coeficientes reales. Los autovalores asociados a este operador son $\pm 1/2$. Claramente la solución a este problema lleva a que $\hat{t} = \frac{1}{2}\tau_i$, con τ_i la i -ésima matriz de Pauli. Explícitamente,

$$\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

La notación ' τ ' en vez de ' σ ' se introduce a fin de distinguir propiedades físicas completamente distintas: carga vs momentum angular intrínseco. La elección más simple para representar los estados de protón y neutrón se da al escoger

$$\hat{t} \rightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

de la cual surgen los autovectores

$$|p\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |n\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

correspondiente a los autovalores $+1/2$ y $-1/2$, respectivamente. De esta forma, distinguimos al protón del neutrón por su componente '3' de isospín, de valores $+1/2$ y $-1/2$, respectivamente. Esto también es referido como componente 'z' de isospín, aunque hay que tener presente que en el espacio de carga no existe eje 'z'. Esto es sólo lenguaje, dado que la componente '3' comunmente se asocia con el eje 'z'. Con esta definición podemos definir el operador *carga* \hat{Q} mediante

$$\hat{Q} = \frac{e}{2} (\mathbf{I} + \tau_z),$$

el que satisface $\hat{Q}|p\rangle = e|p\rangle$, y $\hat{Q}|n\rangle = 0$.

6.3.3. Algebra

Como hemos visto, los operadores de spin \hat{s}_i , momentum angular orbital \hat{L}_i e isospín \hat{t}_i satisfacen un álgebra común bastante característica,

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} s_k, \quad [\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} L_k, \quad [\hat{t}_i, \hat{t}_j] = i \epsilon_{ijk} t_k.$$

A fin de mantener un enfoque común para todos ellos, consideremos un operador vectorial $\hat{\mathbf{J}}$ hermítico el cual satisface el álgebra de momentum angular

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{J}_k. \quad (6.33)$$

Como consecuencia de esta álgebra se obtienen las siguientes identidades

$$\hat{\mathbf{J}} \times \hat{\mathbf{J}} = i\hbar \hat{\mathbf{J}} \quad (6.34a)$$

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_k] = 0; \quad (6.34b)$$

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \pm \hat{J}_\pm; \quad (6.34c)$$

$$\hat{J}_+ \hat{J}_- = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 + \hat{J}_z; \quad (6.34d)$$

$$\hat{J}_- \hat{J}_+ = \hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z; \quad (6.34e)$$

$$\hat{J}_\pm^\dagger = \hat{J}_\mp; \quad (6.34f)$$

donde hemos denotado $\hat{J}_x = \hat{J}_1$, $\hat{J}_y = \hat{J}_2$, $\hat{J}_z = \hat{J}_3$ y $\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$. Demostremos la primera de estas propiedades [Ec. (6.34a)], donde adoptaremos $\hbar = 1$ por conveniencia. Desarrollemos:

$$\begin{aligned} (\hat{\mathbf{J}} \times \hat{\mathbf{J}})_i &= \epsilon_{ijk} \hat{J}_j \hat{J}_k \\ &= \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \hat{J}_j \hat{J}_k + \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \hat{J}_j \hat{J}_k \\ &= \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \hat{J}_j \hat{J}_k + \frac{1}{2} \epsilon_{ikj} \hat{J}_k \hat{J}_j \\ &= \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \hat{J}_j \hat{J}_k - \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \hat{J}_k \hat{J}_j \\ &= \frac{1}{2} \epsilon_{ijk} [\hat{J}_j \hat{J}_k - \hat{J}_k \hat{J}_j] \\ &= \frac{1}{2} i \underbrace{\epsilon_{jki} \epsilon_{jkl}}_{2\delta_{il}} \hat{J}_l \\ &= i \hat{J}_i \end{aligned}$$

con lo cual $(\hat{\mathbf{J}} \times \hat{\mathbf{J}})_i = i\hat{J}_i$. La segunda identidad (6.34b) se demuestra en forma muy directa:

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_k] &= [\hat{J}_j \hat{J}_j, \hat{J}_k] \\ &= \hat{J}_j [\hat{J}_j, \hat{J}_k] + [\hat{J}_j, \hat{J}_k] \hat{J}_j \\ &= i\hat{J}_j \epsilon_{jkl} \hat{J}_l + i\epsilon_{jkl} \hat{J}_l \hat{J}_j \\ &= i\epsilon_{klj} (\hat{J}_j \hat{J}_l + \hat{J}_l \hat{J}_j) \end{aligned}$$

La antisimetría de los coeficientes ϵ_{klj} y simetría del término entre paréntesis implica que la suma sea nula. Por lo tanto $[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_k] = 0$.

En el caso de la identidad (6.34c),

$$\begin{aligned} [\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] &= \underbrace{[\hat{J}_z, \hat{J}_x]}_{i\hat{J}_y} \pm i \underbrace{[\hat{J}_z, \hat{J}_x]}_{-i\hat{J}_x} \\ &= \pm \hat{J}_\pm. \end{aligned} \quad (6.35)$$

6.3.4. Diagonalización de $\hat{\mathbf{J}}^2$ y \hat{J}_z

Notemos que $\hat{\mathbf{J}}^2$ y \hat{J}_k conmutan entre si, por lo cual constituyen observables compatibles. Notar, en cambio, que los \hat{J}_k no conmutan entre ellos, de modo que podemos diagonalizar simultáneamente $\hat{\mathbf{J}}^2$ con sólo una de las componentes de $\hat{\mathbf{J}}$. Es usual escoger $k = 3$ (eje z) como la dirección de cuantización de una de las componentes de $\hat{\mathbf{J}}$. Planteamos entonces

$$\hat{\mathbf{J}}^2 |a b\rangle = a |a b\rangle, \quad (6.36a)$$

$$\hat{J}_z |a b\rangle = b |a b\rangle. \quad (6.36b)$$

Al igual que como se procedió a la diagonalización del oscilador armónico, mediante propiedades algebraicas de los operadores de subida y bajada, el momentum angular conduce a propiedades análogas que también permiten la diagonalización algebraica de los operadores $\hat{\mathbf{J}}^2$ y \hat{J}_z . Establezcamos algunas de estas propiedades.

► *Propiedad 1: $b^2 \leq a$*

En efecto, consideremos

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^2 |a b\rangle &= a |a b\rangle \\ \hookrightarrow &= \hat{J}_x^2 |a b\rangle + \hat{J}_y^2 |a b\rangle + \underbrace{\hat{J}_z^2 |a b\rangle}_{b^2 |a b\rangle} \end{aligned}$$

Entonces, al aplicar $\langle a b |$ por la izquierda y considerando $\langle a b | a b \rangle = 1$, se obtiene

$$a = \underbrace{\langle a b | \hat{J}_x^2 | a b \rangle}_{\geq 0} + \underbrace{\langle a b | \hat{J}_y^2 | a b \rangle}_{\geq 0} + b^2, \quad (6.37)$$

de donde obtenemos $b^2 \leq a$.

- *Propiedad 2:* $\hat{J}_{\pm}|a b\rangle \propto |a b \pm 1\rangle$
 Consideremos en este caso la identidad (6.34c),

$$\begin{aligned} \hat{J}_z \hat{J}_{\pm}|a b\rangle - \hat{J}_{\pm} \underbrace{\hat{J}_z|a b\rangle}_{b|a b\rangle} &= \pm \hat{J}_{\pm}|a b\rangle \quad \Rightarrow \\ \hat{J}_z(\hat{J}_{\pm}|a b\rangle) &= (b \pm 1)(\hat{J}_{\pm}|a b\rangle). \end{aligned}$$

Con ésto inferimos que $\hat{J}_{\pm}|a b\rangle$ es autovector de \hat{J}_z con autovalor $b \pm 1$, lo que se expresa como

$$\hat{J}_{\pm}|a b\rangle = C_{\pm} |a b \pm 1\rangle. \quad (6.38)$$

Esta relación permite generar nuevos autovectores de \hat{J}_z a partir de $|a b\rangle$. En particular, la acción sucesiva del operador \hat{J}_- sobre $|a b\rangle$ va generando autovectores de la forma $|a (b - m)\rangle$. En principio, no hay límite en el número de aplicaciones de este operador. Sin embargo debemos exigir que $(b - m)^2 \leq a$. Para que esto sea factible, exigimos la existencia de un b_{min} (b_{max}) sobre el cual se interrumpe la generación de estados inferiores (superiores) en b . Así,

$$\hat{J}_-|a b_{min}\rangle = 0; \quad (6.39a)$$

$$\hat{J}_+|a b_{max}\rangle = 0. \quad (6.39b)$$

- *Propiedad 3:* $b_{min} = -b_{max}$
 Consideremos esta vez las identidades (6.34d) y (6.34e) y calculamos sus respectivos valores de expectación $\langle \# \rangle_{a b_{min}}$, $\langle \# \rangle_{a b_{max}}$. Luego de considerar las restricciones impuestas por las Ecs. (6.39a) y (6.39b) obtenemos

$$0 = a - b_{min}^2 + b_{min}; \quad (6.40a)$$

$$0 = a - b_{max}^2 - b_{max}. \quad (6.40b)$$

Restamos ambas ecuaciones y se obtiene

$$(b_{max} + b_{min}) \underbrace{(b_{max} - b_{min} + 1)}_{> 0} = 0,$$

de donde necesariamente $b_{min} = -b_{max}$. Si denotamos por j al máximo valor permitido para b ,

$$j \stackrel{\text{def}}{=} b_{max},$$

entonces las Ecs. (6.40a,6.40b) conducen a

$$a = j(j + 1). \quad (6.41)$$

Es importante notar que $b_{max} - b_{min}$ debe ser entero debido a que los autovalores de b son discretos, separados por una unidad. Entonces, necesariamente $2j = n = \text{entero}$. De aquí surge que j puede ser entero o semientero, vale decir, su valores permitidos son $\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}$, etc. Estos valores posibles son inherentes al álgebra. En el caso del momentum angular orbital los únicos j posibles son enteros, como se verá más adelante.

Conviene a este punto readecuar nuestra notación. Pasamos de los autovalores genéricos a, b a los rótulos j, m , de forma que

$$\hat{\mathbf{J}}^2 |jm\rangle = j(j+1) |jm\rangle; \quad (6.42a)$$

$$\hat{J}_z |jm\rangle = m |jm\rangle. \quad (6.42b)$$

► *Propiedad 4:* $\hat{J}_\pm |jm\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m \pm 1)} |j, m \pm 1\rangle$

Para demostrarla consideramos la Ec. (6.38) y usamos la Ec. (6.34e) para $\hat{J}_- \hat{J}_+$,

$$\begin{aligned} \hat{J}_+ |j, m\rangle &= C_+ |j, m+1\rangle & / (\times)^\dagger \\ \langle j, m | \hat{J}_- &= C_+^* \langle j, m+1 | & \Rightarrow \\ \langle j, m | \hat{J}_- \hat{J}_+ |j, m\rangle &= C_+^* C_+ \langle j, m+1 | j, m+1\rangle. \end{aligned}$$

Entonces, suponiendo $|j, m\rangle$ normalizados

$$\begin{aligned} \langle j, m | (\hat{\mathbf{J}}^2 - \hat{J}_z^2 - \hat{J}_z) |j, m\rangle &= |C_+|^2 \Rightarrow \\ j(j+1) - m(m+1) &= |C_+|^2. \end{aligned}$$

Con ésto adoptamos

$$C_+ = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}, \quad (6.43)$$

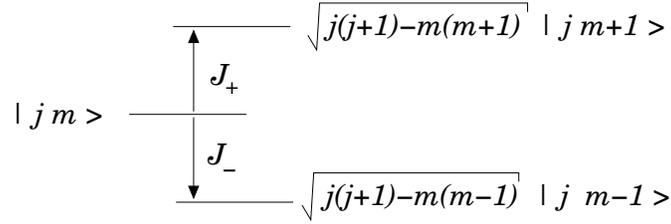
donde hemos tomado fase nula al extraer la raíz cuadrada. Un procedimiento totalmente análogo permite determinar C_- , obteniéndose

$$\hat{J}_+ |jm\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} |j, m+1\rangle, \quad (6.44a)$$

$$\hat{J}_- |jm\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} |j, m-1\rangle. \quad (6.44b)$$

6.3.5. Elementos de matriz de $\hat{\mathbf{J}}$

Los resultados de la sección anterior permiten determinar los elementos de matriz de $\hat{\mathbf{J}}$ en la base en que $\hat{\mathbf{J}}^2$ y \hat{J}_z son diagonales. En particular, para un valor de j determinado se

Figura 6.4: Ilustración de la acción de los operadores \hat{J}_{\pm} .

tiene,

$$\langle jm' | \hat{J}_+ | jm \rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m+1)} \delta_{m', m+1}, \quad (6.45a)$$

$$\langle jm' | \hat{J}_- | jm \rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m-1)} \delta_{m', m-1}, \quad (6.45b)$$

$$\langle jm' | \hat{J}_z | jm \rangle = m \delta_{m', m}. \quad (6.45c)$$

Todos ellos constituyen los elementos de una matriz construida, por convención, con su primer elemento aquel para el caso $m' = m = j$. El resto sigue un orden descendente por filas y columnas. Así,

$$\langle jm' | jm \rangle : \begin{bmatrix} \langle j j | jj \rangle & \langle jj | j j - 1 \rangle & \dots \\ \langle j j - 1 | jj \rangle & \langle j j - 1 | j j - 1 \rangle & \dots \\ \langle j j - 2 | jj \rangle & & \\ \vdots & & \end{bmatrix}$$

Spin $j = 1/2$

Para el caso $j = 1/2$ consideramos $m, m' = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$. En este caso adoptamos la notación standard $\hat{\mathbf{J}} \rightarrow \hat{\mathbf{s}}$. Los únicos elementos no nulos son

$$\langle \frac{1}{2} + \frac{1}{2} | \hat{s}_+ | \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \rangle = 1, \quad (6.46a)$$

$$\langle \frac{1}{2} - \frac{1}{2} | \hat{s}_- | \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \rangle = 1, \quad (6.46b)$$

$$\langle \frac{1}{2} + \frac{1}{2} | \hat{s}_z | \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \rangle = \frac{1}{2}, \quad (6.46c)$$

$$\langle \frac{1}{2} - \frac{1}{2} | \hat{s}_z | \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \rangle = -\frac{1}{2}. \quad (6.46d)$$

Estos resultados se pueden expresar en forma matricial, conviniendo la siguiente notación para los elementos de matriz, $(\dots)_{m'm} = \langle \frac{1}{2} m' | \dots | \frac{1}{2} m \rangle$:

$$(\hat{s}_z)_{m'm} : \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad (\hat{s}_+)_{m'm} : \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\hat{s}_-)_{m'm} : \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.47)$$

Haciendo uso de la definición $\hat{s}_{\pm} = \hat{s}_x \pm i\hat{s}_y$ obtenemos

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{s}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (6.48)$$

donde identificamos las tres matrices de Pauli.

Spin $j = 1$

Para el caso $j = 1$ consideramos $m, m' = 1, 0, -1$. En este caso es usual hacer $\hat{J} \rightarrow \hat{S}$. En forma semejante al caso anterior, los únicos elementos no nulos son

$$\begin{aligned} \langle 1 \ 1 | \hat{J}_+ | 1 \ 0 \rangle &= \sqrt{2} \quad , & \langle 1 \ 0 | \hat{J}_+ | 1 \ -1 \rangle &= \sqrt{2} \quad , \\ \langle 1 \ 0 | \hat{J}_- | 1 \ 1 \rangle &= \sqrt{2} \quad , & \langle 1 \ -1 | \hat{J}_- | 1 \ 0 \rangle &= \sqrt{2} \quad , \\ \langle 1 \ 1 | \hat{J}_z | 1 \ 1 \rangle &= 1 \quad , & \langle 1 \ -1 | \hat{J}_z | 1 \ -1 \rangle &= -1 \quad . \end{aligned}$$

Estos resultados permiten expresar matricialmente los operadores \hat{S}_z y \hat{S}_\pm :

$$\hat{S}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.49)$$

Nuevamente, haciendo uso de la definición $\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y$ obtenemos

$$\hat{S}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_y = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (6.50)$$

6.3.6. Representaciones en espacio de coordenadas

Al abordar un sistema en el cual se manifiesta el *momentum angular orbital*, $\hat{J} \rightarrow \hat{L}$, puede resultar útil representarlo en términos de operadores diferenciales. Entonces, al hacer $\hat{p} = -i\hbar\nabla$ se obtiene

$$i\hat{L}_x = y\partial_z - z\partial_y; \quad (6.51a)$$

$$i\hat{L}_y = z\partial_x - x\partial_z; \quad (6.51b)$$

$$i\hat{L}_z = x\partial_y - y\partial_x, \quad (6.51c)$$

donde hemos tomado $\hbar = 1$, por comodidad. Para representarlos en coordenadas esféricas tenemos presente

$$\begin{aligned} r^2 &= x^2 + y^2 + z^2; \\ \tan \phi &= y/x; \\ \tan \theta &= \sqrt{x^2 + y^2}/z. \end{aligned} \quad (6.52)$$

Por ejemplo,

$$i\hat{L}_z = x\partial_y - z\partial_x = \left(x \frac{\partial r}{\partial y} - y \frac{\partial r}{\partial x} \right) \partial_r + \left(x \frac{\partial \theta}{\partial y} - y \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) \partial_\theta + \left(x \frac{\partial \phi}{\partial y} - y \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) \partial_\phi.$$

Mediante el cálculo explícito de las derivadas dentro de los paréntesis es fácil verificar

$$i\hat{L}_z = \frac{\partial}{\partial\phi} . \quad (6.53)$$

Un procedimiento análogo conduce a

$$i\hat{L}_x = \sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cos\phi \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} ; \quad (6.54)$$

$$i\hat{L}_y = \cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \sin\phi \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} , \quad (6.55)$$

de las cuales obtenemos

$$\hat{L}_{\pm} = e^{\pm i\phi} \left(\pm \frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right) . \quad (6.56)$$

Es oportuno resaltar que los operadores \hat{L}_k actúan exclusivamente sobre las variables angulares, sin tener dependencia alguna en la componente radial r . Se puede demostrar además que

$$\hat{p}^2 = -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \hat{L}^2 . \quad (6.57)$$

6.3.7. Los esféricos armónicos

Procedemos a construir las autofunciones de \hat{L}^2 y \hat{L}_z asociadas a los autovalores l y m , respectivamente. Los estados los denotamos mediante $|l m\rangle$. A fin de contextualizar las autofunciones que construiremos, podríamos suponer un hamiltoniano que conmuta con los operadores indicados. Las autofunciones llevarán asociadas los números cuánticos (rótulos) α , l y m . En representación de coordenadas, entonces,

$$\langle \mathbf{r} | \alpha; l m \rangle = F_{\alpha; l m}(r) \langle \theta \phi | l m \rangle . \quad (6.58)$$

Esta construcción, que no es más que la reconocida separación de variables utilizada en la resolución de ecuaciones diferenciales que exhiben separabilidad en sus términos, garantiza ser autofunción de \hat{L}^2 y \hat{L}_z .

Convenimos ahora la notación a usar. Dado que los ángulos esféricos θ y ϕ representan la dirección del vector unitario \hat{r} , entonces es práctico establecer la equivalencia

$$|\theta\phi\rangle \equiv |\hat{r}\rangle .$$

Entonces, mientras no sea necesario hacer explícitos los ángulos θ y ϕ , utilizaremos el vector unitario \hat{r} como argumento. Las autofunciones $\langle \theta\phi | l m \rangle = \langle \hat{r} | l m \rangle$ corresponden a las *funciones esféricas armónicas*, que denotaremos $Y_l^m(\theta, \phi) \stackrel{\text{def}}{=} Y_l^m(\hat{r})$. Así entonces podemos reescribir la función de más arriba por

$$\langle \mathbf{r} | \alpha; l m \rangle = F_{\alpha; l m}(r) Y_l^m(\hat{r}) .$$

Procedemos a obtener $Y_l^m(\hat{r})$. A partir de la ecuación de autovalores de \hat{L}_z ,

$$\begin{aligned} \hat{L}_z | l m \rangle &= m | l m \rangle \quad / \quad \langle \theta\phi | \\ -i \frac{\partial}{\partial \phi} \langle \theta\phi | l m \rangle &= m \langle \theta\phi | l m \rangle \quad \Rightarrow \\ \frac{\partial Y_l^m}{\partial \phi} &= i m Y_l^m , \end{aligned}$$

con lo cual

$$Y_l^m(\theta\phi) = \Theta(\theta) e^{im\phi} . \quad (6.59)$$

Al exigir que $Y_l^m(\theta\phi)$ sea univaluada ante $\phi \rightarrow \phi + 2\pi$, entonces necesariamente m debe ser entero. Ello también restringe l a valores enteros. Además, como $-l \leq m \leq l$, entonces por cada valor de l hay $2l + 1$ valores permitidos para m .

Para determinar los Y_l^m primero encontraremos Y_l^l , para luego aplicar el operador de bajada \hat{L}_- en forma sucesiva, $n = m - l$ veces. Considerando $\hat{L}_+ | l l \rangle = 0$ tenemos

$$\left(\frac{\partial}{\partial \theta} + i \cot \theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right) Y_l^l = 0 .$$

Al hacer uso de la Ec. (6.59) para Y_l^l obtenemos para $\Theta(\theta)$

$$\Theta' = l \cot \theta \Theta .$$

Desde el punto de vista de la variable θ , esta ecuación es equivalente a

$$f'(x) = n \cot x f(x) \quad \Rightarrow \quad f'/f = n \cos x / \sin x .$$

Integrando, $\ln f = n \ln(\sin x) + C$, o sea $f \sim (\sin x)^n$. Volviendo al problema original se infiere

$$Y_l^l(\theta\phi) = C e^{il\phi} \sin^l(\theta) .$$

La constante C se determina de la condición de normalización sobre las funciones. Entonces para $m = l$, $\langle l l | l l \rangle = 1 \Rightarrow$

$$\int_{\Omega} \langle l l | \theta \phi \rangle d\Omega \langle \theta \phi | l l \rangle = 1 \quad \Rightarrow$$

$$2\pi |C|^2 \int_0^\pi \sin \theta d\theta \sin \theta (\sin^2 \theta)^l = 1.$$

El cálculo de esta integral requiere de algún trabajo que se propone abordar, obteniéndose

$$|C|^2 = \frac{(2l+1)!}{4\pi 2^{2l} (l!)^2}$$

Con ésto entonces,

$$Y_l^l(\theta\phi) = (-)^l \frac{1}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)!}{4\pi}} e^{il\phi} \sin^l(\theta). \quad (6.60)$$

La convención de fase $(-)^l$ es usual pero no absoluta. Hay que poner atención cuando se usan expresiones para los esféricos armónicos de distintas fuentes. Con este resultado es directo observar que

$$Y_0^0(\theta\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}.$$

De igual modo, $Y_1^1(\theta\phi) = -\sqrt{3/8\pi} e^{i\phi} \sin \theta$

La propiedad 4 de la Sección (6.3.4) implica

$$\hat{L}_- |l m\rangle = \sqrt{l(l+1) - m(m-1)} |l m-1\rangle. \quad (6.61)$$

Es directo verificar que esta misma se puede expresar, convenientemente,

$$\hat{L}_- |l m\rangle = \sqrt{(l-m+1)(l+m)} |l m-1\rangle. \quad (6.62)$$

Entonces obsérvese...

$$\begin{aligned} \hat{L}_- |l l\rangle &= \sqrt{(1)(l+l)} |l l-1\rangle \\ \hat{L}_-^2 |l l\rangle &= \sqrt{(1)(l+l)} \hat{L}_- |l l-1\rangle \\ &= \sqrt{(1 \cdot 2)(2l)(2l-1)} |l l-2\rangle \\ \hat{L}_-^3 |l l\rangle &= \sqrt{(1 \cdot 2 \cdot 3)(2l)(2l-1)(2l-2)} |l l-3\rangle \end{aligned}$$

Esta secuencia sugiere

$$\hat{L}_-^n |l l\rangle = \sqrt{\frac{n! (2l)!}{(2l-n)!}} |l l-n\rangle, \quad (6.63)$$

la que se propone demostrar por inducción. Sustituyendo n por $l - m$ tenemos,

$$\hat{L}_-^{l-m} |l m\rangle = \sqrt{\frac{(l-m)!(2l)!}{(l+m)!}} |l m\rangle. \quad (6.64)$$

Con esta última es claro entonces

$$|l m\rangle = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!(2l)!}} \hat{L}_-^{l-m} |l l\rangle, \quad (6.65)$$

con la cual

$$Y_l^m(\hat{r}) = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!(2l)!}} \hat{L}_-^{l-m} Y_l^l(\hat{r}). \quad (6.66)$$

Las funciones esféricas armónicas satisfacen las relaciones de ortogonalidad y completitud,

$$\langle l' m' | l m \rangle = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_l^{m'*}(\theta\phi) Y_l^m(\theta\phi) = \delta_{l'l'} \delta_{m m'}, \quad (6.67)$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\theta'\phi') Y_l^{m*}(\theta\phi) = \frac{1}{\sin \theta} \delta(\theta' - \theta) \delta(\phi' - \phi) \quad (6.68)$$

Los esféricos armónicos satisfacen una gran variedad de propiedades que al momento de calcular pueden ser muy útiles. Cabe señalar que los Y_l^m están muy relacionados con lo polinomios generalizados de Legendre, $P_l^m(u)$. En particular, demostrando la propiedad

$$\hat{L}_\pm [e^{im\phi} \Theta(\theta)] = \mp e^{i(n\pm 1)\phi} (\sin \theta)^{1\pm n} \frac{d}{d(\cos \theta)} [(\sin \theta)^{\mp n} \Theta(\theta)], \quad (6.69)$$

se obtiene

$$Y_l^m(\theta\phi) = (-)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l+m)!}{(l-m)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta), \quad (6.70)$$

con

$$P_l^m(u) = \sqrt{(1-u^2)^m} \frac{d^m P_l(u)}{du^m} \quad (6.71)$$

Un comentario adicional acerca de la paridad de los esféricos armónicos. Bajo paridad las coordenadas cambian $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$. En coordenadas esféricas esto equivale a hacer $\hat{r} \rightarrow -\hat{r}$. Para los ángulos, $\theta \rightarrow \pi - \theta$ y $\phi \rightarrow \phi + 2\pi$. Un análisis de los Y_l^m conduce a

$$\Pi Y_l^m(\hat{r}) \stackrel{\text{def}}{=} Y_l^m(-\hat{r}) = (-)^l Y_l^m(\hat{r}). \quad (6.72)$$

Esta propiedad es sumamente útil para la identificación de transiciones permitidas y prohibidas en algunos sistemas.

Ejercicio 6.14 Determine $|C_{\pm}|$ en la relación $L_{\pm}|l m\rangle = C_{\pm}|l m \pm 1\rangle$.

Ejercicio 6.15 Dado

$$Y_1^0(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta,$$

obtenga $Y_1^{\pm 1}(\theta, \phi)$ aplicando los operadores \hat{L}_{\pm} en representación de coordenadas.

Ejercicio 6.16 Considere el vector $\mathbf{A} = A \hat{a}$. Expresé \mathbf{A} como combinación lineal de los esféricos armónicos de orden 1: $Y_1^0(\hat{a})$ y $Y_1^{\pm 1}(\hat{a})$.

Ejercicio 6.17 Una partícula en presencia de un potencial esféricamente simétrico tiene por función de onda

$$\psi(x, y, z) = C(xy - yz + zx) e^{-\alpha r^2}.$$

Determine la probabilidad de que el momentum angular sea $2\hbar$. Determine además las probabilidades relativas para que m tenga los valores -2, -1, 0, 1 y 2.

6.4. El átomo de hidrógeno

Consideremos el sistema formado por un protón y un electrón interactuando electromagnéticamente *via* el potencial de Coulomb. Para simplificar esta primera discusión consideremos el protón infinitamente masivo en relación al electrón, de modo que el sistema a estudiar es el de la interacción de un electrón con un campo externo dado por

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

El hamiltoniano a estudiar es $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}$, que proyectado en espacio de coordenadas resulta

$$\langle \hat{r} | \hat{H} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \right) + \frac{1}{2mr^2} \hat{\mathbf{L}}^2 + V(\mathbf{r}) \right] \langle \hat{r} |. \quad (6.73)$$

6.4.1. Observables compatibles (rótulos)

Para llevar a cabo la diagonalización del hamiltoniano ponemos atención a los siguientes conmutadores nulos: $[\hat{H}, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0$, $[\hat{H}, \hat{L}_z] = 0$ y $[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z] = 0$. Esto permite diagonalizar \hat{H} , $\hat{\mathbf{L}}^2$ y \hat{L}_z en una base común. Usemos α para resumir los autovalores de estos operadores, $\alpha = \{n, l, m\}$, de modo que $|\alpha\rangle = |n; lm\rangle$, con

$$\hat{H}|\alpha\rangle = E_n|\alpha\rangle; \quad (6.74a)$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2|\alpha\rangle = l(l+1)|\alpha\rangle; \quad (6.74b)$$

$$\hat{L}_z|\alpha\rangle = m|\alpha\rangle. \quad (6.74c)$$

Entonces,

$$\hat{H}\langle\mathbf{r}|\alpha\rangle = E_n\langle\mathbf{r}|\alpha\rangle$$

Denotando y descomponiendo,

$$\langle\mathbf{r}|\alpha\rangle \equiv \Psi_\alpha(\mathbf{r}) = R_\alpha(r) Y_l^m(\hat{r}),$$

que al sustituir en la ecuación de Schrödinger conlleva a

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r \right) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R_\alpha Y_l^m(\hat{r}) = E_n R_\alpha Y_l^m(\hat{r}).$$

Multiplicamos $Y_l^{m*}(\hat{r})$ por la izquierda e integramos en $d\Omega_{\hat{r}}$, permitiendo la eliminación de Y_l^m en la ecuación. Además, definimos $u_\alpha(r) = rR_\alpha(r)$, de modo que

$$u'' - \frac{l(l+1)}{r^2} u + \frac{2\beta}{r} u = \epsilon u. \quad (6.75)$$

En esta última hemos definido

$$\beta = \frac{me^2}{\hbar^2} \quad \epsilon = -\frac{2mE_\alpha}{\hbar^2}. \quad (6.76)$$

Notar que $E_\alpha < 0$ (estados ligados), por lo que ϵ es positiva.

6.4.2. Función de onda

Para la resolución de la Ec. (6.75) primero identificamos el comportamiento asintótico de $u(r)$ en los límites $r \rightarrow 0$ y $r \rightarrow \infty$. Para $r \rightarrow 0$ la Ec. (6.75) toma la forma

$$u'' - \frac{l(l+1)}{r^2} u \sim 0.$$

Al explorar una solución del tipo $u \sim r^p$, se obtiene que $p = -l$, o $p = l + 1$. La primera de ellas se descarta porque la función de onda debe ser finita en todo el espacio, de modo que $u \sim r^{l+1}$. En el otro límite, la ecuación resultante es

$$u'' \sim \epsilon u \equiv \lambda^2 u ,$$

cuyas soluciones son exponenciales de la forma $u_1 \sim e^{\lambda r}$ y $u_2 \sim e^{-\lambda r}$. La primera de ellas es descartada pues diverge en el infinito. Con ésto entonces definamos

$$u = r^{l+1} e^{-\lambda r} w(r) . \quad (6.77)$$

Con esta descomposición, derivamos dos veces u y sustituimos en la Ec. (6.75), obteniendo

$$r w'' + [2(l+1) - 2\lambda r] w' - [2\lambda(l+1) - 2\beta] w = 0 .$$

A este punto adimensionalizamos las variables. Resulta conveniente definir $z = 2\lambda r$, de modo que $\frac{d}{dr} = 2\lambda \frac{d}{dz}$. Además hacemos $w(r) \equiv W(z)$, con lo cual

$$z W'' + [2l + 2 - z] W' - [l + 1 - \beta/\lambda] W = 0 .$$

La ecuación anterior coincide con la ecuación de Kummer dada por

$$x \frac{d^2 \phi}{dx^2} + (c - x) \frac{d\phi}{dx} - a \phi = 0 ,$$

para la cual intentamos una solución en serie de potencias,

$$\phi(x) = \sum_{k=0} b_k x^k . \quad (6.78)$$

Luego de derivar, sustituir y reordenar términos se obtiene

$$\sum_{k=1} k(k+1) b_{k+1} x^k + \left\{ 2cb_1 + \sum_{k=1} c b_{k+1} (k+1) x^k \right\} - \sum_{k=1} b_k k x^k - \left\{ ab_0 + \sum_{k=1} a b_k x^k \right\} = 0 .$$

Igualando coeficientes del mismo orden en x obtenemos,

$$2cb_1 - ab_0 = 0 ; \quad (6.79a)$$

$$k(k+1)b_{k+1} + c b_{k+1}(k+1) - b_k k - ab_k = 0 . \quad (6.79b)$$

Por lo tanto,

$$b_1 = \frac{a}{2c} b_0 ; \quad (6.80a)$$

$$b_{k+1} = \frac{k+a}{(k+1)(k+c)} b_k . \quad (6.80b)$$

Estas relaciones definen la construcción de la solución a la ecuación para la función de onda. Sin embargo es necesario examinar su comportamiento para $r \rightarrow \infty$. Para ello observemos los coeficientes altos en la relación de recurrencia (6.80b). Claramente para k grande $b_{k+1} \sim b_k/(k+1)$, o bien

$$b_k \sim \frac{1}{k!}.$$

Esto conduce a una estructura exponencial del tipo $\sim e^x$ en la serie. Tal comportamiento es inaceptable puesto que conlleva a una solución divergente para u , de modo que necesariamente la recurrencia (6.80b) se debe interrumpir para algún k finito. Este requerimiento es factible sólo si a toma un valor entero y negativo, es decir $a = -N$, con N un entero positivo. Puesto que

$$a = l + 1 - \frac{\beta}{\lambda} = -N,$$

entonces,

$$\frac{\lambda}{\beta} = \frac{1}{l + N + 1}.$$

En términos de las variables originales,

$$E_\alpha = -\frac{me^4}{2\hbar^2(l + N + 1)^2}, \quad (6.81)$$

el espectro de energías del átomo de hidrógeno.

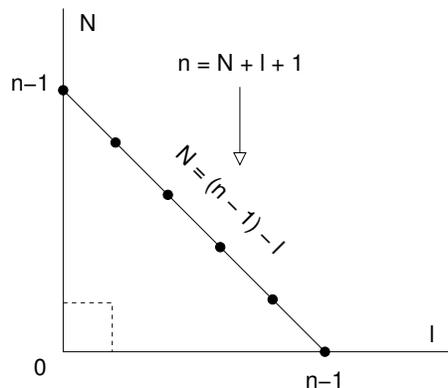


Figura 6.5: Configuraciones N vs l con la misma energía E_n .

6.4.3. Degeneración

Notar que la solución encontrada exhibe degeneración, ya que varias combinaciones de l y N permiten un mismo valor de energía. Si llamamos $n = l + N + 1$, el número cuántico

principal, entonces

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2}.$$

Con esta representación, la degeneración de E_n es n^2 . En efecto, para cada valor del momento angular l , hay $2l + 1$ valores posibles de m . Además, para cada valor de n , los momentos angulares permitidos van desde $l = 0$ hasta $l = n - 1$. Entonces la degeneración total es

$$D = \sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2.$$

Las funciones que se obtienen del proceso iterativo obtenido anteriormente para ϕ conducen a los polinomios asociados de Laguerre. Recordemos que $z = 2\lambda r$, con $\lambda^2 = 2mE_\alpha/\hbar^2 = m^2 e^4/\hbar^4 n^2$. Denotando $a_0 \equiv \hbar^2/m e^2$ (radio de Bohr), entonces resulta conveniente expresar

$$z = \frac{2r}{na_0}.$$

Con esta notación, la función de onda normalizada para el electrón en un átomo de hidrógeno queda expresada por

$$\langle \mathbf{r} | n; l m \rangle = \psi_{nlm}(\mathbf{r}) = \underbrace{\frac{2}{n^2} \left(\frac{(n-l-1)!}{a_0^3 [(n+l)!]^3} \right)^{1/2}}_{\stackrel{\text{def}}{=} R_{nl}(r)} z^l L_{n-l-1}^{2l+1}(z) e^{-z/2} Y_l^m(\hat{r}). \quad (6.82)$$

Aquí se ha definido

$$L_p^k(z) = (-)^k \left(\frac{d^k}{dz^k} \right) L_{p+k}(z), \quad (6.83)$$

donde

$$L_p = e^z \frac{d^p}{dz^p} (e^{-z} z^p) = \left(\frac{d}{dz} - 1 \right)^p x^p. \quad (6.84)$$

Con ellas se obtienen los siguientes valores de expectación:

$$\langle r \rangle_{nlm} = \frac{a_0}{2} [3n^2 - l(l+1)]; \quad (6.85a)$$

$$\langle r^2 \rangle_{nlm} = n^4 a_0^2 \left\{ 1 + \frac{3}{2} \left[1 - \frac{l(l+1) - 1/3}{n^2} \right] \right\}; \quad (6.85b)$$

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{nlm} = \frac{1}{a_0 n^2}. \quad (6.85c)$$

El cálculo de éstos valores de expectación es directo mediante el uso de las siguientes identidades¹

$$\left[z \frac{d^2}{dz^2} + (k+1-z) \frac{d}{dz} + p \right] L_p^k = 0 ; \quad (6.86a)$$

$$\frac{1}{(1-t)^{k+1}} e^{-zt/(1-t)} = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{t^p}{(p+k)!} L_p^k(z) \quad (|t| < 1) ; \quad (6.86b)$$

$$\int_0^{\infty} e^{-z} z^k L_p^k L_q^k dz = \frac{[(p+k)!]^3}{p!} \delta_{qp} \quad (6.86c)$$

La parte radial de la función de onda, R_{nl} , se puede determinar explícitamente a partir de la Ec. (6.82). En particular, para el estado fundamental ($n = 1, l = 0$) se tiene

$$R_{1,0}(r) = \frac{2}{a_0^{3/2}} e^{-r/a_0} . \quad (6.87)$$

Ejercicio 6.18 Calcule $1/\langle r \rangle_{nlm}$ y $\langle 1/r \rangle_{nlm}$ para autoestados $|nlm\rangle$ del átomo de hidrógeno. Compare porcentualmente ambas cantidades.

6.5. Niveles de Landau

Estudiemos el problema de una partícula cargada en presencia de un campo electromagnético. Para simplificar la discusión omitiremos la interacción entre el momento magnético y el campo, lo que equivale a omitir spin. El espectro que se obtiene para este sistema se le atribuye a Lev Landau. Su manifestación es observada en conductores a bajas temperaturas.

6.5.1. Consideraciones generales

Para construir las ecuaciones cuánticas del movimiento, consideremos el lagrangiano clásico para luego obtener el hamiltoniano. Si la partícula de carga q está sometida a un potencial escalar ϕ y potencial magnético \mathbf{A} , entonces su lagrangiano es

$$L(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 - q\phi + \frac{q}{c} \mathbf{v} \cdot \mathbf{A} .$$

¹Messiah

Aquí denotamos $\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}}$. A partir de las ecuaciones de Lagrange

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 ,$$

se obtiene la reconocida ecuación del movimiento,

$$m\dot{\mathbf{v}} = q(\mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B}) .$$

Para obtener el hamiltoniano $H(q_k, p_k)$ determinamos primero el momento canónico. Entonces,

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}_k} = mv_k + \frac{q}{c} A_k .$$

Expresamos el hamiltoniano, $H = \mathbf{v} \cdot \mathbf{p} - L$, en términos de r_k y p_k

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{q}{c} \mathbf{A} \right) + q\phi . \quad (6.88)$$

La cuantización del sistema se establece haciendo la correspondencia $\mathbf{p} \rightarrow \hat{\mathbf{p}}$ y $\mathbf{r} \rightarrow \hat{\mathbf{r}}$, con $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$, en representación de coordenadas. Con ésta expresión para el hamiltoniano la ecuación de Schrödinger queda expresada

$$\hat{H}|\psi\rangle = i\hbar\partial_t|\psi\rangle ,$$

donde $\hat{H} = H(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}})$, es decir

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \hat{\mathbf{A}} \right) \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \hat{\mathbf{A}} \right) + q\phi(\hat{\mathbf{r}}, t) . \quad (6.89)$$

La resolución del problema clásico en presencia de un campo magnético uniforme –en ausencia de campo eléctrico– conduce a trayectorias en forma de hélice. En particular, si el campo magnético está orientado en dirección del eje z , las trayectorias proyectadas en el plano xy resultan circunferencias cuyo radio depende del momentum proyectado en el plano xy . La frecuencia de este movimiento está dada por

$$\omega_c = \frac{|q|B}{mc} .$$

El desplazamiento de la partícula según el eje z es uniforme, mientras que en el plano xy queda descrito por

$$x_0 = x + \frac{1}{\omega_c} v_y , \quad y_0 = y - \frac{1}{\omega_c} v_x , \quad (6.90)$$

donde x_0 e y_0 definen la posición del eje de la hélice. Notar que $(x-x_0)^2+(y-y_0)^2 = (v_0/\omega_c)^2$, con v_0 la rapidez de la partícula en el plano xy .

Una propiedad importantes del campo electromagnético es su invariancia bajo transformaciones de *gauge*,

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi, \quad (6.91a)$$

$$\phi \rightarrow \phi' = \phi - \frac{1}{c} \partial_t \chi. \quad (6.91b)$$

Al aplicar esta transformación sobre los campos en la ecuación de Schrödinger constatamos que ella no es invariante. Esta propiedad es conflictiva puesto implicaría que la teoría cuántica es selectiva a la convención de gauge adoptada para los campos electromagnéticos. Esto es físicamente cuestionable, por lo que se busca aquella transformación (unitaria) que deje invariante la ecuación de Schrödinger. Es decir, $|\psi'\rangle \rightarrow |\psi\rangle = U|\psi'\rangle$. Si imponemos

$$\hat{H}'|\psi'\rangle = i\hbar\partial_t|\psi'\rangle \Rightarrow \hat{H}|\psi\rangle = i\hbar\partial_t|\psi\rangle,$$

entonces se obtiene

$$|\psi'\rangle = e^{(iq/\hbar c)\chi}|\psi\rangle.$$

Ejercicio 6.19 Una partícula escalar (sin spin) es sometida a un campo electromagnético (ϕ, \mathbf{A}) . Los campos eléctricos y magnéticos quedan expresados por,

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}.$$

- Verifique que los campos $\mathbf{A}' = \mathbf{A} - \nabla\chi$, y $\phi' = \phi + \frac{1}{c}\partial_t\chi$, con χ un campo escalar, definen los mismos campos eléctrico y magnético (invariancia de gauge).
- Demuestre que al aplicar la transformación de gauge en la Ec. de Schrödinger para una partícula cargada frente a campos electromagnéticos, ésta no es invariante.
- Encuentre la transformación unitaria U , con $|\psi'\rangle = U|\psi\rangle$, que garantice la invariancia de gauge de la Ec. de Schrödinger, vale decir

$$H'|\psi'\rangle = i\hbar\partial_t|\psi'\rangle \Leftrightarrow H|\psi\rangle = i\hbar\partial_t|\psi\rangle.$$

Bajo esta transformación unitaria se puede demostrar que tanto $\langle\psi|\psi\rangle$ como $\langle\psi|\hat{\mathbf{r}}|\psi\rangle$ son invariantes de gauge, no así $\langle\psi|\hat{\mathbf{p}}|\psi\rangle$. Sin embargo $\langle\psi|\hat{\mathbf{V}}|\psi\rangle$ si es invariante de gauge, donde se ha definido el operador velocidad (componente α)

$$\hat{V}_\alpha = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{x}_\alpha].$$

Si sustituimos el hamiltoniano y hacemos uso de las reglas de conmutación $[\hat{x}_\alpha, \hat{p}_\alpha] = i\hbar\delta_{\alpha\beta}$ se obtiene

$$\hat{V}_\alpha = \frac{1}{m} \left(\hat{p}_\alpha - \frac{q}{c} \hat{A}_\alpha \right).$$

Con esta última,

$$[\hat{x}_\alpha, \hat{V}_\beta] = i \frac{\hbar}{m} \delta_{\alpha\beta}; \quad (6.92a)$$

$$[\hat{V}_\alpha, \hat{V}_\beta] = i \frac{\hbar q}{m^2 c} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} B_\gamma. \quad (6.92b)$$

Estudiaremos el caso de una partícula sometida a un campo magnético uniforme y en ausencia de potenciales escalares ($\phi = 0$). Si consideremos el campo magnético $\mathbf{B} = B\hat{z}$, entonces

$$[\hat{V}_x, \hat{V}_y] = i \frac{\hbar q}{m^2 c} B, \quad [\hat{V}_y, \hat{V}_z] = 0, \quad [\hat{V}_z, \hat{V}_x] = 0.$$

6.5.2. Solución algebraica

La solución que planteamos se inspira en la solución algebraica dada al oscilador armónico. En efecto, los operadores \hat{V}_α vistos arriba satisfacen un álgebra análoga a la de los operadores 'P' y 'Q' del oscilador. Lo que hay que hacer es afinar tal similitud para extraer el espectro con las constantes adecuadas.

Resulta fácil verificar que el hamiltoniano se puede expresar

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \left(\frac{m}{2} \hat{V}_x^2 + \frac{m}{2} \hat{V}_y^2 \right) + \frac{m}{2} \hat{V}_z^2 \\ &\stackrel{\text{def}}{=} \hat{H}_{xy} + \hat{H}_z, \end{aligned} \quad (6.93a)$$

donde hemos definido $\hat{H}_z = \frac{m}{2} \hat{V}_z^2$. Con esta descomposición y las reglas de conmutación para las componentes del operador velocidad, se cumple $[\hat{H}_{xy}, \hat{H}_z] = 0$, por lo que ambos términos son diagonalizables en una base común. Podemos rotular sus autoestados por $|\alpha, \beta\rangle$, tales que

$$\hat{H}_{xy}|\alpha, \beta\rangle = E_\alpha|\alpha, \beta\rangle; \quad (6.94a)$$

$$\hat{H}_z|\alpha, \beta\rangle = E_\beta|\alpha, \beta\rangle. \quad (6.94b)$$

Además, puesto que $\hat{V}_z = \hat{p}_z/m \rightarrow -i(\hbar/m)\partial_z$, el espectro de \hat{H}_z es continuo y sus autofunciones son ondas planas con propagación en el eje z .

Para la resolución de la Ec. de autovalores (6.94a), supongamos $q > 0$ y hagamos la siguiente modificación

$$\left[\hat{V}_x, \hat{V}_y \right] = i \frac{\hbar q}{m^2 c} B \quad \rightarrow \quad \left[\sqrt{\frac{m^2 c}{\hbar q}} \hat{V}_x, \sqrt{\frac{m^2 c}{\hbar q}} \hat{V}_y \right] \stackrel{\text{def}}{=} \left[\hat{Q}, \hat{P} \right] = i .$$

Expresemos entonces \hat{H}_{xy} en términos de los nuevos operadores \hat{Q} y \hat{P} ,

$$\hat{H}_{xy} = \frac{1}{2} \underbrace{\frac{\hbar q B}{m^2 c}}_{E_0} \left(\hat{P} + \hat{Q}^2 \right) .$$

Como se aprecia, la forma cuadrática del hamiltoniano y el álgebra de los operadores coincide con el oscilador armónico visto en el capítulo anterior. Es evidente entonces que las autoenergías son del tipo $E_\alpha = E_0(n + \frac{1}{2})$, con $n \geq 0$ (entero). Por lo tanto el espectro queda descrito por

$$E_\alpha + E_\beta = E_0(n + \frac{1}{2}) + \frac{1}{2} m v_z^2 .$$

La determinación de las autofunciones queda planteado como trabajo personal. Para tal efecto resulta útil recordar el operador de bajada $a = (\hat{Q} + i\hat{P})/\sqrt{2}$, donde $\hat{Q} \sim \hat{V}_x$ y $\hat{P} \sim \hat{V}_y$. Tanto \hat{V}_x como \hat{V}_y acarrean las derivadas ∂_x y ∂_y , respectivamente, además de las componentes $A_{x,y}$. Esta última la podemos definir como $\mathbf{A} = (-yB, 0, 0)$, que reproduce el campo magnético considerado y satisface la medida de Coulomb $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. La función de onda en el estado fundamental se obtiene resolviendo la ecuación diferencial que surge de $\langle xy; z | a | \psi_0 \rangle = 0$, cuyo resultado debiera coincidir con el que obtendremos en la sección siguiente.

6.5.3. Solución en espacio de coordenadas

Ya vimos que para dar cuenta del campo externo uniforme $\mathbf{B} = B\hat{z}$, podemos valernos de $\mathbf{A} = (-yB, 0, 0)$. Considerando $\phi = 0$, el hamiltoniano en la Ec. (6.89) se reduce a

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{1}{2m} \left[\left(\hat{P}_x + \hat{y} \frac{qB}{c} \right)^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2 \right] \quad \Rightarrow \\ &- \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\partial_x + y \frac{qB}{c} \right)^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2 \right] \Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z) . \end{aligned}$$

Claramente \hat{H} , \hat{P}_x y \hat{P}_z conmutan entre sí, por lo que son diagonalizables simultáneamente. Las autofunciones de estos dos últimos son ondas planas del tipo $e^{ik_x x}$ y $e^{ik_z z}$, respectivamente. Representamos entonces

$$\Psi(x, y, z) = e^{i(k_x x + k_z z)} \Phi(y) .$$

Si denotamos

$$y_0 = -\frac{k_x c}{qB}, \quad \omega_c = \frac{|q|B}{mc}, \quad E = H_0 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m},$$

se obtiene la siguiente ecuación para Φ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Phi}{dy^2} + \left[\frac{1}{2} m \omega_c^2 (y - y_0)^2 - E_0 \right] \Phi = 0.$$

Como se observa, se trata de la misma ecuación que para el oscilador armónico, por lo cual el espectro para E_0 queda dado por $\hbar \omega_c (n + \frac{1}{2})$. Con ésto las soluciones quedan expresadas por

$$\Psi(x, y, z) = e^{i(k_x x + k_z z)} H_n[\alpha(y - y_0)] e^{-\frac{1}{2} \alpha^2 (y - y_0)^2}. \quad (6.96)$$

Aquí,

$$\alpha = \sqrt{\frac{|q|B}{\hbar c}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{a_m},$$

donde identificamos la magnitud

$$a_m = \sqrt{\frac{\hbar c}{|q|B}}$$

denominada *longitud magnética*. Para el caso del electrón recordamos $e\hbar = 2\mu_B m_e c$, por lo cual

$$a_m = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}} = \frac{\hbar c}{\sqrt{2m_e c^2 \mu_B B}}$$

A modo de estimación, la densidad de flujo B en la Tierra varía entre 30 y 60 microtesla, siendo más intensa cerca de los polos. Recordando que $\mu_B \approx 6 \times 10^{-5}$ eV/T, entonces a_m varía entre 3 μm y 5 μm . En el *National High Magnetic Field Laboratory*, ubicado en la Universidad del Estado de Florida (Tallahassee, EEUU), se encuentra operativo el campo magnético continuo más intenso del orbe, con 45 T, un record aún vigente en 2015. En este caso $a_m \approx 4$ nm. En el caso extremo de en una estrella de neutrones, donde los campos se estiman en 10^8 T, la longitud magnética resulta del orden de 3 pm.

La solución recién encontrada para la función de onda exhibe características que resultan no evidentes bajo una lectura clásica. Por ejemplo, la trayectoria clásica en el plano xy es circunferencial, simetría que no resulta evidente de la Ec. (6.96) para la función de onda. Además, esta solución se comporta como onda plana en la dirección x y como oscilador armónico cuántico en la dirección y . A ello se le agrega que la función de onda tiene el

mismo comportamiento en las variables (x, z) , sin embargo las autoenergías dependen sólo de k_z .

Una revisión más acuciosa de la solución al problema anterior se puede llevar a cabo considerando los nuevos operadores

$$\hat{X}_0 = \hat{x} + \frac{1}{\omega_c} \hat{V}_y, \quad \hat{Y}_0 = \hat{y} - \frac{1}{\omega_c} \hat{V}_x.$$

Estos operadores corresponden al análogo clásico de la posición del eje de la hélice del movimiento de las partículas cargadas, como se hizo notar en las Ecs. (6.90). Se puede verificar que tanto \hat{X}_0 como \hat{Y}_0 son constantes del movimiento,

$$[\hat{X}_0, \hat{H}] = [\hat{Y}_0, \hat{H}] = 0,$$

sin embargo,

$$[\hat{X}_0, \hat{Y}_0] = -i \frac{\hbar c}{qB}.$$

Esta última conduce a la relación de incerteza

$$(\Delta X_0)(\Delta Y_0) \geq \frac{1}{2} a_m^2,$$

con a_m la longitud magnética. Esta relación es una manifestación de que \hat{X}_0 e \hat{Y}_0 no se puedan diagonalizar simultáneamente, al menos para un campo magnético finito. Sin embargo, el grado de incerteza es controlable con la intensidad del campo magnético.

Un último alcance acerca de éste sistema. La libertad de gauge permite escoger el siguiente potencial magnético vector equivalente, $\mathbf{A} = (-y/2, x/2, 0)B$. Luego de sustituirlo en la ecuación de Schrödinger y resolver en coordenadas cilíndricas se obtiene el mismo espectro que el encontrado en esta sección. Es interesante notar, sin embargo, que a pesar de las diferencias que exhiben las funciones de onda, el primer postulado de la mecánica cuántica implica que ambas contienen la misma información física del sistema.

Ejercicio 6.20 Obtenga la función de onda para el sistema anterior, pero esta vez considerando $\mathbf{A} = (-yB, 0, 0)$.

6.6. Acoplamiento del momentum angular

El momentum angular de un sistema es una cantidad aditiva. Por ejemplo, al considerar el momentum angular orbital de un electrón con su spin, su momentum angular total lo

describimos por

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{l}} + \hat{\mathbf{s}},$$

donde $\hat{\mathbf{l}}$ representa el momentum angular orbital y $\hat{\mathbf{s}}$ el spin. Otra situación de interés consiste en dos electrones con spines respectivos $\hat{\mathbf{s}}_2$ y $\hat{\mathbf{s}}_1$, en cuyo caso el spin total es

$$\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{s}}_1 + \hat{\mathbf{s}}_2.$$

Otra cantidad física aditiva y que satisface el álgebra de momentum angular es el *isospín*, que denotamos por $\hat{\mathbf{t}}$. Por lo tanto, $\hat{\mathbf{t}} \times \hat{\mathbf{t}} = i\hat{\mathbf{t}}$. Esta cantidad no tiene análogo clásico ni se combina (aditivamente) con el momentum angular ni el spin. Así por ejemplo, el protón y el neutrón corresponden a dos estados de isospín de un ente más general denominado *nucleón* (N) y cuyo isospín es $1/2$: $|N\rangle = |\frac{1}{2} t_z\rangle$. Sus proyecciones respectivas según z son $+\frac{1}{2}$ y $-\frac{1}{2}$ y definen los estados 'protón' y 'neutrón', respectivamente. Entonces, podemos representar los estados de isospín para el protón (p) y el neutrón (n) por los kets

$$|p\rangle = |\frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle, \quad |n\rangle = |\frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle.$$

Si denotamos por $\hat{\mathbf{t}}_1$ y $\hat{\mathbf{t}}_2$ los isospines de dos constituyentes, entonces el isospín total del sistema está dado por

$$\hat{\mathbf{T}} = \hat{\mathbf{t}}_1 + \hat{\mathbf{t}}_2.$$

En los tres ejemplos descritos anteriormente los sumandos conmutan entre sí pues actúan sobre estados correspondientes a distintos espacios. Concretamente, $[\hat{\mathbf{l}}, \hat{\mathbf{s}}] = 0$; $[\hat{\mathbf{s}}_1, \hat{\mathbf{s}}_2] = 0$ y $[\hat{\mathbf{t}}_1, \hat{\mathbf{t}}_2] = 0$. En estos tres casos nos enfrentamos con el problema de la adición de momentum angular. Puesto que la característica común a todos estos ejemplos es el álgebra, estudiemos el caso en que

$$\hat{\mathbf{J}} \stackrel{\text{def}}{=} \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2,$$

donde

$$\hat{\mathbf{J}}_1 \times \hat{\mathbf{J}}_1 = i\hat{\mathbf{J}}_1; \quad \hat{\mathbf{J}}_2 \times \hat{\mathbf{J}}_2 = i\hat{\mathbf{J}}_2; \quad [\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{\mathbf{J}}_2] = 0.$$

Con estas definiciones para $\hat{\mathbf{J}}_1$ y $\hat{\mathbf{J}}_2$ se infiere que $\hat{\mathbf{J}}$ satisface el álgebra $\hat{\mathbf{J}} \times \hat{\mathbf{J}} = i\hat{\mathbf{J}}$. En efecto,

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}} \times \hat{\mathbf{J}} &= (\hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2) \times (\hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2) \\ &= \underbrace{\hat{\mathbf{J}}_1 \times \hat{\mathbf{J}}_1}_{i\hat{\mathbf{J}}_1} + \underbrace{\hat{\mathbf{J}}_1 \times \hat{\mathbf{J}}_2 + \hat{\mathbf{J}}_2 \times \hat{\mathbf{J}}_1}_0 + \underbrace{\hat{\mathbf{J}}_2 \times \hat{\mathbf{J}}_2}_{i\hat{\mathbf{J}}_2} \\ &= i\hat{\mathbf{J}} \end{aligned}$$

Consideremos las bases en que $\hat{\mathbf{J}}_{1,2}$ han sido diagonalizados por separado:

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{J}_{1z}] &= 0 \quad \rightarrow \quad \text{base } \{|j_1 m_1\rangle\}; \\ [\hat{\mathbf{J}}_2^2, \hat{J}_{2z}] &= 0 \quad \rightarrow \quad \text{base } \{|j_2 m_2\rangle\}. \end{aligned}$$

Además, la conmutatividad entre las componentes de $\hat{\mathbf{J}}_1$ con las de $\hat{\mathbf{J}}_2$ permiten construir el producto directo para las autofunciones comunes

$$|j_1 m_1\rangle^{(1)} \otimes |j_2 m_2\rangle^{(2)} \stackrel{\text{def}}{=} |j_1 m_1\rangle^{(1)} |j_2 m_2\rangle^{(2)} \stackrel{\text{def}}{=} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle, \quad (6.97)$$

que definen un espacio de dimensión $(2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$. Entonces,

$$\hat{\mathbf{J}}_1^2 |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = j_1(j_1 + 1) |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle; \quad (6.98a)$$

$$\hat{\mathbf{J}}_2^2 |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = j_2(j_2 + 1) |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle; \quad (6.98b)$$

$$\hat{J}_{1z} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = m_1 |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle; \quad (6.98c)$$

$$\hat{J}_{2z} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle = m_2 |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle. \quad (6.98d)$$

Abordamos ahora el mismo problema pero desde la perspectiva del momentum angular total $\hat{\mathbf{J}}$. Para ello hay que identificar operadores hermíticos compatibles que permitan diagonalizarse en una base común. En esta línea se pueden demostrar las siguientes propiedades

$$[\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z] = 0; \quad [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{\mathbf{J}}_{1,2}^2] = 0; \quad [\hat{J}_z, \hat{\mathbf{J}}_{1,2}^2] = 0. \quad (6.99)$$

Con ellas vemos que es posible diagonalizar *simultáneamente* los operadores $\hat{\mathbf{J}}^2$, \hat{J}_z , $\hat{\mathbf{J}}_1^2$ y $\hat{\mathbf{J}}_2^2$, conducentes a cuatro números cuánticos, al igual que en el caso anterior. Rotulemos los autovalores correspondientes por J , M , j_1 y j_2 , con su autovector respectivo $|JM(j_1 j_2)\rangle$. El hecho que $\hat{\mathbf{J}} \times \hat{\mathbf{J}} = i\hat{\mathbf{J}}$ garantiza

$$\hat{\mathbf{J}}^2 |JM(j_1 j_2)\rangle = J(J + 1) |JM(j_1 j_2)\rangle; \quad (6.100a)$$

$$\hat{J}_z |JM(j_1 j_2)\rangle = M |JM(j_1 j_2)\rangle. \quad (6.100b)$$

Esta forma alternativa de diagonalizar se esquematiza en el siguiente diagrama, donde a cada lado se listan los operadores compatibles con sus respectivos rótulos entre paréntesis

$$\left[\begin{array}{l} \hat{\mathbf{J}}_1^2 \quad (j_1) \\ \hat{\mathbf{J}}_2^2 \quad (j_2) \\ \hat{J}_{1z} \quad (m_1) \\ \hat{J}_{2z} \quad (m_2) \\ |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \end{array} \right] \Leftrightarrow \left[\begin{array}{l} \hat{\mathbf{J}}^2 \quad (J) \\ \hat{J}_z \quad (M) \\ |JM(j_1 j_2)\rangle \end{array} \right].$$

Las relaciones de ortogonalidad resultan evidentemente

$$\langle j_1 j_2 m'_1 m'_2 | j_1 j_2; m_1 m_2 \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}; \quad (6.101)$$

$$\langle J' M' (j_1 j_2) | JM (j_1 j_2) \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'}. \quad (6.102)$$

La completitud de los $(2j_1 + 1) \times (2j_2 + 1)$ elementos $|j_1 m_1\rangle \otimes |j_2 m_2\rangle$ se expresa,

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2| = \mathbb{1}. \quad (6.103)$$

De forma análoga expresamos la completitud en la otra base,

$$\sum_J \sum_{M=-J}^J |JM(j_1 j_2)\rangle \langle JM(j_1 j_2)| = \mathbb{1}, \quad (6.104)$$

donde los límites de la suma en J quedan por ser determinados.

En la figura de más abajo se ilustran dos esquemas de operadores que conmutan entre sí, los que son ubicados en cada esquina. A la izquierda figuran $\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}_{1z}, \hat{J}_{2z}$, que conlleva a un sub-espacio vectorial de dimensión $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$. A la derecha aparecen $\hat{J}_1^2, \hat{J}_2^2, \hat{J}^2, \hat{J}_z$, donde $\hat{J} = \hat{J}_1 + \hat{J}_2$. La dimensión de este sub-espacio es la misma que la anterior (cambio de base). Esta condición es determinante para identificar el rango de variación de J .

El problema que nos planteamos es expresar los autoestados $|JM(j_1 j_2)\rangle \stackrel{\text{def}}{=} |JM\rangle$ como combinación lineal de los elementos $|j_1 j_2; m_1 m_2\rangle$ (y vice-versa). Más específicamente, determinar los coeficientes de tal transformación. Consideremos entonces

$$|JM\rangle = \sum_{m_1 m_2} |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle. \quad (6.105)$$

A los coeficientes $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle$ se les denominan *coeficientes de Clebsh-Gordan* y satisfacen una serie de propiedades determinantes para la posibilidad o imposibilidad de procesos físicos. Por ahora ellos constituirán simplemente los coeficientes de un cambio de base. Para la determinación de ellos observamos las siguientes propiedades.

- *Propiedad 1:* $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle = 0$ cuando $m_1 + m_2 \neq M$

En efecto, consideremos la Ec. (6.105) para $|JM\rangle$ y apliquemos $\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}$ a los lados respectivos de la igualdad. Al lado izquierdo el autovalor es M , con lo cual

$$M|JM\rangle = \sum_{m_1 m_2} (\hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}) |j_1 j_2 m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM \rangle.$$

Luego de expandir completitud a la izquierda, y evaluar los autovalores de \hat{J}_{1z} y \hat{J}_{2z} se obtiene

$$\sum_{m_1 m_2} (M - m_1 - m_2) \langle j_1 j_2 \ m_1 m_2 | \hat{J}_{1z} \hat{J}_{2z} | j_1 j_2 \ m_1 m_2 \rangle \langle j_1 j_2 \ m_1 m_2 | JM \rangle = 0.$$

Esta combinación lineal nula de vectores linealmente independientes implica necesariamente que los coeficientes de la expansión, $(M - m_1 - m_2) \langle j_1 j_2 \ m_1 m_2 | JM \rangle$, sean nulos. Es evidente que si $m_1 + m_2 \neq M$ entonces $\langle j_1 j_2 \ m_1 m_2 | JM \rangle = 0$. Por lo tanto, *la proyección z del momentum angular total es igual a la suma de las proyecciones.*

► *Propiedad 2:* $J_{max} = j_1 + j_2$

Recordemos que el momentum angular J corresponde a la máxima proyección de su componente z . Así, $J_{max} = M_{max}$. Por otra parte, como $M = m_1 + m_2$, entonces $M_{max} = j_1 + j_2$

► *Propiedad 3:* $J_{min} = |j_1 - j_2|$

La dimensión del espacio formado por el producto directo es $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ y es igual a la del espacio formado por los elementos $\{|JM\rangle\}$, es decir

$$(2j_1 + 1)(2j_2 + 1) = \sum_{J=J_{min}}^{j_1+j_2} \sum_{M=-J}^J 1 = \sum_{J=J_{min}}^{j_1+j_2} (2J + 1).$$

Desarrollando algebraicamente se obtiene $J_{min}^2 = (j_1 - j_2)^2$, es decir, $J_{min} = |j_1 - j_2|$.

A modo de ilustración, consideremos un sistema formado por dos electrones, cada uno de ellos tiene spin $1/2$. El momentum angular total S del sistema varía entre $|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}| \rightarrow \frac{1}{2} + \frac{1}{2}$, vale decir $S=0$ y $S=1$. Otro caso es un electrón en movimiento orbital con momentum angular $L = 2$. Entonces, el momentum angular total J varía entre $|2 - \frac{1}{2}| \rightarrow 2 + \frac{1}{2}$, vale decir $J = \frac{3}{2}$ y $J = \frac{5}{2}$.

El cálculo sistemático de los coeficientes de Clebsh-Gordan es posible mediante la aplicación sucesiva de los operadores de subida y bajada $\hat{J}_{\pm} = \hat{J}_{1\pm} + \hat{J}_{2\pm}$. Tales coeficientes quedan determinados excepto por una fase, la que queda fijada si se adopta la convención de que el elemento $\langle j_1 j_2 \ j_1 \ (J - j_1) | JJ \rangle$ sea real y positivo. Con esta convención se puede demostrar que los coeficientes de Clebsh-Gordan son reales, es decir,

$$\langle j_1 j_2 \ m_1 m_2 | JM \rangle = \langle JM | j_1 j_2 \ m_1 m_2 \rangle.$$

Además, cuando m_1 y m_2 toman su máximo valor (j_1 y j_2 , respectivamente), entonces necesariamente $M = j_1 + j_2$. El único valor de J permitido es entonces $j_1 + j_2$, en sólo la configuración $|j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle$. Estos corresponden al mismo estado, de modo que

$$|j_1 j_1\rangle^{(1)} \otimes |j_2 j_2\rangle^{(2)} = |j_1 j_2, j_1 j_2\rangle = |j_1 + j_2, j_1 + j_2\rangle,$$

se tiene

$$\langle j_1 j_2, j_1 j_2 | \underbrace{j_1 + j_2}_J, \underbrace{j_1 + j_2}_M \rangle = 1.$$

Veamos como se plantea el problema en general y luego estudiaremos un ejemplo fácilmente manejable. Partamos considerando la identidad

$$|JM\rangle = \sum_{m_1 m_2} |j_1 j_2, m_1 m_2\rangle \langle j_1 j_2, m_1 m_2 | JM \rangle, \quad (6.106)$$

y apliquemos a cada lado $\hat{J}_\pm = \hat{J}_{1\pm} + \hat{J}_{2\pm}$, obteniendo

$$\begin{aligned} \sqrt{J(J+1) - M(M\pm 1)} |JM\pm 1\rangle &= \sum_{m'_1, m'_2} \sqrt{j_1(j_1+1) - m'_1(m'_1\pm 1)} |j_1 j_2, m'_1 \pm 1, m'_2\rangle \\ &+ \sum_{m_1, m_2} \sqrt{j_2(j_2+1) - m'_2(m'_2\pm 1)} |j_1 j_2, m'_1, m'_2 \pm 1\rangle. \end{aligned}$$

Proyectando $\langle j_1 j_2, m_1 m_2 |$ por la izquierda, usando ortogonalidad ($m'_1 \rightarrow m_1 \mp 1$ y $m'_2 \rightarrow m_2 \mp 1$) y dividiendo por la raíz cuadrada de la izquierda se tiene se obtiene

$$\begin{aligned} \langle j_1 j_2, m_1 m_2 | JM \pm 1 \rangle &= \sqrt{\frac{j_1(j_1+1) - m_1(m_1 \mp 1)}{J(J+1) - M(M\pm 1)}} \langle j_1 j_2, m_1 \mp 1, m_2 | JM \rangle \\ &+ \sqrt{\frac{j_2(j_2+1) - m_2(m_2 \mp 1)}{J(J+1) - M(M\pm 1)}} \langle j_1 j_2, m_1, m_2 \mp 1 | JM \rangle. \end{aligned}$$

Este tipo de operaciones conducen, eventualmente, a los coeficientes de Clebsch-Gordan dados por expresiones cerradas simples obtenidas originalmente por Racah. De acuerdo al texto *Angular Momentum* de Brink & Satchler (Oxford Science Publications) ellos están dados por

$$\langle ab\alpha\beta | c\gamma \rangle = \delta(\alpha + \beta, \gamma) \Delta(abc) \left[(2c+1)(a+\alpha)!(a-\alpha)!(b+\beta)!(b-\beta)!(c+\gamma)!(c-\gamma)! \right]^{1/2} \times \sum_{\nu} (-)^{\nu} \left[(a-\alpha-\nu)!(c-b+\alpha+\nu)!(b+\beta-\nu)!(c-a-\beta+\nu)! \nu! (a+b-c-\nu)! \right]^{-1},$$

donde

$$\Delta(abc) = \left[\frac{(a+b-1)!(a-b+c)!(b+c-a)!}{(a+b+c+1)!} \right]^{1/2}.$$

Los valores de ν son todos aquellos para los cuales los factoriales son no negativos.

En el caso de un sistema formado por dos partículas de spin $\frac{1}{2}$, cada una de ellas rotuladas por 1 y 2, analicemos aquella parte de la función de onda que involucra sólo al spin. Consideramos,

$$\begin{aligned}\hat{s}_1|\frac{1}{2}\mu\rangle_{(1)} &= \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)|\frac{1}{2}\mu\rangle_{(1)}, \\ \hat{s}_2|\frac{1}{2}\mu\rangle_{(2)} &= \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)|\frac{1}{2}\mu\rangle_{(2)}.\end{aligned}$$

Los valores posibles de μ son $\pm\frac{1}{2}$. Construimos autoestados del spin total, $\hat{S} = \hat{s}_1 + \hat{s}_2$. De acuerdo a las reglas de suma del momentum angular, S está acotado por $|\frac{1}{2} - \frac{1}{2}| \leq S \leq \frac{1}{2} + \frac{1}{2}$. Por lo tanto, $S = 0, 1$, son las dos únicas posibilidades. Para $S = 1$ planteamos la equivalencia entre los estados de máxima proyección según z , vale decir

$$\begin{aligned}|11(\frac{1}{2}\frac{1}{2})\rangle &= |s_1s_2\mu_1\mu_2\rangle = |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle \quad / \quad \hat{S}_- = \hat{s}_{1-} + \hat{s}_{2-} \\ \sqrt{1(1+1) - 1(1-1)}|10\rangle &= \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2} - 1)}|\frac{1}{2}\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle + \\ &\quad \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1) - \frac{1}{2}(\frac{1}{2} - 1)}|\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle \Rightarrow \\ \sqrt{2}|10\rangle &= |\frac{1}{2}\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\frac{1}{2}\rangle + |\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\rangle\end{aligned}$$

Este resultado lo podemos escribir en forma más compacta de la siguiente forma

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\uparrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\downarrow\rangle. \quad (6.107)$$

Al aplicar nuevamente S_- se obtiene

$$|1-1\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle.$$

Así, los estados $S = 1$ correspondientes a un multiplete de $2S + 1 = 3$ términos:

$$\begin{aligned}|11\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle \\ |10\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\uparrow\rangle \\ |1-1\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle\end{aligned} \quad (6.108)$$

Para encontrar $|00\rangle$ podemos proceder en forma bastante simple. Expandimos

$$|10\rangle = \alpha|\uparrow\downarrow\rangle + \beta|\downarrow\uparrow\rangle,$$

imponemos ortogonalidad, $\langle 10|00\rangle = 0$, y normalización, $\langle 00|00\rangle = 1$. Además, exigimos α real y positivo. Con ello,

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\downarrow\uparrow\rangle.$$

Notar que los estados $S = 1$ son simétricos bajo el intercambio de los rótulos de las partículas, $1 \rightleftharpoons 2$. Para el caso $S = 0$, en cambio, el estado $|00\rangle$ resulta antisimétrico bajo la misma permutación. Entonces, si \mathcal{P}_S representa el operador de intercambio,

$$\mathcal{P}_S |s_1 \mu_1\rangle_{(1)} |s_2 \mu_2\rangle_{(2)} = |s_1 \mu_1\rangle_{(2)} |s_2 \mu_2\rangle_{(1)}$$

entonces

$$\mathcal{P}_S |S \nu\rangle = (-1)^{S+1} |S \nu\rangle. \quad (6.109)$$

Ejercicio 6.21 Considere los estados de isospín total $|00\rangle$ y $|1T_z\rangle$ (en notación $|TT_z\rangle$) correspondientes a un sistema de dos nucleones. El operador \mathcal{P}_T representa el intercambio (rótulos) $1 \rightleftharpoons 2$ sobre el estado de dos nucleones. Represente los estados $|TT_x\rangle$ en la base $|\frac{1}{2}\mu_1\rangle \otimes |\frac{1}{2}\mu_2\rangle$ y demuestre

$$\mathcal{P}_T |TT_z\rangle = (-1)^{T+1} |TT_z\rangle.$$

Ejercicio 6.22 Los protones y neutrones constituyen los dos autoestados de un nucleón, cuyo isospín es $\frac{1}{2}$. Para un sistema formado por dos nucleones, rotulados por '1' y '2', el isospín total está dado por $\mathbf{T} = \hat{\mathbf{t}}_1 + \hat{\mathbf{t}}_2$.

- Represente los estados $|pp\rangle$, $|pn\rangle$, $|np\rangle$ y $|nn\rangle$ en la base $\{|TT_z\rangle\}$.
- Determine α y β en la identidad $\hat{\mathbf{T}}^2 = \alpha + \beta \boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2$, donde $\hat{\mathbf{t}}_1 = \frac{1}{2} \boldsymbol{\tau}_1$ y $\hat{\mathbf{t}}_2 = \frac{1}{2} \boldsymbol{\tau}_2$.
- Calcule $\langle pp | \hat{V} | pp \rangle$ y $\langle pn | \hat{V} | np \rangle$ para la interacción

$$\hat{V} = -V_0 \frac{1}{2} (1 + 4 \mathbf{t}_1 \cdot \mathbf{t}_2)$$

Ejercicio 6.23 Considere la función de onda dada por

$$\psi_{JLS}^M(\mathbf{r}) = \sum_{\mu=-S}^S \sum_{m=-L}^L |S\mu\rangle Y_L^m(\hat{r}) \langle LS m \mu | JM \rangle u_{JLS}(r),$$

donde $|S\mu\rangle \otimes |Lm\rangle \equiv |LS m \mu\rangle$ es autoestado de $(\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{S}_z)$ y $(\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{L}_z)$. Demuestre que $\psi_{JLS}^M(\mathbf{r})$ es autofunción de $(\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z)$, con $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}$. Aquí se subentiende que $\langle \hat{r} | LS; m \mu \rangle = |S\mu\rangle Y_L^m(\hat{r})$.

6.7. Interpretación geométrica del momentum angular

El momentum angular de un sistema está íntimamente ligado a las propiedades de simetría del sistema bajo rotaciones. Para analizar este aspecto analizaremos el cambio sufrido por un campo escalar cuando se aplica una rotación. Es pertinente hacer una distinción entre dos tipos de rotaciones.

Las *rotaciones pasivas* son aquellas en las cuales el punto en el espacio se mantiene invariable y la rotación la experimenta el sistema de ejes coordenados.

Las *rotaciones activas* conllevan una rotación de la coordenada que especifica a un punto.

Ambas rotaciones están esquematizadas en la Fig. (6.6). En ellas los puntos de un cuerpo Φ son rotados.

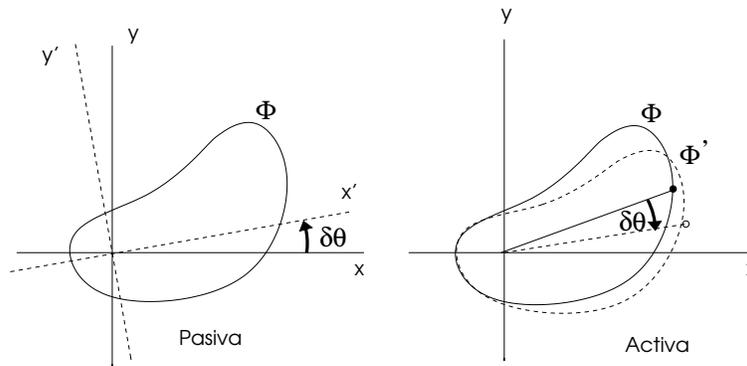


Figura 6.6: Rotación pasiva y activa.

Consideremos un campo escalar $\Phi(\mathbf{r}) = \Phi(x, y, z)$ y examinemos su comportamiento cuando los ejes coordenados experimentan una rotación en un ángulo infinitesimal ϵ en torno al eje z :

$$\begin{aligned} x &\rightarrow x' = x - \epsilon y \\ y &\rightarrow y' = y + \epsilon x \\ z &\rightarrow z' = z \end{aligned} \tag{6.110}$$

Entonces,

$$\begin{aligned} \Phi(x', y', z') &= \Phi(x - \epsilon y, y + \epsilon x, z) \\ &= \Phi(x, y, z) - (\partial_x \Phi) \epsilon x + (\partial_y \Phi) \epsilon y + \mathcal{O}(\epsilon^2) \\ &= \Phi(x, y, z) + \underbrace{\epsilon (x \partial_y - y \partial_x)}_{i\hat{L}_z} \Phi + \mathcal{O}(\epsilon^2). \end{aligned}$$

Claramente,

$$\Phi(x', y', z') = (1 + i\hat{L}_z \epsilon) \Phi(x, y, z) + \mathcal{O}(\epsilon^2), \quad (6.111)$$

Al componer N veces esta transformación infinitesimal, haciendo $\epsilon = \phi/N$, con N un entero y ϕ finito, se obtiene

$$\Phi(x', y', z') = e^{i\phi\hat{L}_z} \Phi(x, y, z). \quad (6.112)$$

Esta operación se puede extender a una rotación en un ángulo ϵ en torno a un eje \hat{n} en el espacio. Así, con esta construcción la rotación queda especificada por tres parámetros: dos para fijar \hat{n} y uno para la magnitud de la rotación. La rotación de los ejes coordenados quedan dados por la relación vectorial

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \delta\mathbf{r} = \mathbf{r} + \epsilon(\hat{n} \times \mathbf{r}). \quad (6.113)$$

Por lo tanto,

$$\Phi(\mathbf{r}') = \Phi(\mathbf{r} + \delta\mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{r}) + \delta\mathbf{r} \cdot \nabla\Phi. \quad (6.114)$$

Al usar $\delta\mathbf{r} = \epsilon(\hat{n} \times \mathbf{r})$, usar $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$, y adecuar contracciones de índices se obtiene

$$\Phi(\mathbf{r}') = (1 + i\epsilon \hat{n} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar) \Phi(\mathbf{r}), \quad (6.115)$$

con lo cual una rotación *finita* en un ángulo ϕ queda expresada por

$$\Phi(\mathbf{r}') = e^{i\phi \hat{n} \cdot \hat{\mathbf{L}}/\hbar} \Phi(\mathbf{r}). \quad (6.116)$$

La interpretación geométrica del momentum angular resulta evidente: es el generador de rotaciones. La discusión reciente se ha restringido a campos escalares. En el caso de campos espinoriales se requiere de un análisis más general, lo que no es prioritario a este nivel introductorio.

Es frecuente el uso de la siguiente notación para representar el operador de rotación en torno a un eje definido por el vector unitario \hat{n}

$$D(\hat{n}, \phi) \equiv \exp\left(-i\phi \frac{\hat{n} \cdot \hat{\mathbf{L}}}{\hbar}\right).$$

Una observación importante antes de terminar esta sección. A diferencia de lo que ocurre con los generadores de translaciones y *boosts*, las componentes de $\hat{\mathbf{L}}$ no conmutan entre sí. Por lo tanto,

$$e^{i\alpha\hat{L}_x} e^{i\beta\hat{L}_y} e^{i\gamma\hat{L}_z} \neq e^{i\epsilon\hat{\mathbf{L}}}, \quad (6.117)$$

donde se ha denotado $\epsilon = (\alpha, \beta, \gamma)$.

Ejercicio 6.24 Dos partículas de spin 1/2 interactúan mediante el potencial

$$V(r) = V_0(r) + V_\sigma(r) \boldsymbol{\sigma}^{(1)} \cdot \boldsymbol{\sigma}^{(2)}$$

Encuentre las ecuaciones de onda para aquellos estados de spin total 0 y 1.

Ejercicio 6.25 El momento cuadrupolar eléctrico se acopla al gradiente de un campo eléctrico, o equivalentemente, a las segundas derivadas del potencial escalar ϕ . Mediante una elección apropiada de ejes este acoplamiento puede ser representado por el hamiltoniano

$$H_q = C \left\{ \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) J_x^2 + \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right) J_y^2 + \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} \right) J_z^2 \right\},$$

donde ϕ satisface la ecuación de Laplace ($\nabla^2 \phi = 0$) y las segundas derivadas se evalúan en las coordenadas de la partícula. Además, \mathbf{J} representa el momentum angular total de la partícula.

- Demuestre que H_q puede ser escrito en la forma $H_q = A(3J_z^2 - \mathbf{J} \cdot \mathbf{J}) + B(J_+^2 + J_-^2)$, y represente A y B en función de C y derivadas de ϕ .
- Para una partícula de momentum angular total $J=1$, evalúe los elementos de matriz $\langle 1m | H_q | 1m' \rangle$ y encuentre las autoenergías de H_q .

Ejercicio 6.26 Sea $\hat{\mathbf{S}}$ el spin total de un sistema de dos nucleones y $\hat{\mathbf{r}}$ el operador posición asociado a la coordenada relativa.

- Demuestre que $\hat{Q} \equiv (\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{r}})^2 / r^2$, es una proyección.
- Demuestre que el operador (*tensorial*) definido por $\hat{S}_{12} \equiv 2(3\hat{Q} - \hat{\mathbf{S}}^2)$, satisface la identidad $\hat{S}_{12}^2 = 4\hat{\mathbf{S}}^2 - 2\hat{S}_{12}$. y obtenga sus autovalores para los estados triplete de spin ($S = 1$).

6.8. Métodos variacionales

En la práctica son muy pocos los sistemas que permiten soluciones analíticas para el estado fundamental. Tal escenario ha llevado al desarrollo de métodos de aproximación para la determinación de la energía del estado base. En algunos casos, aun con el uso de computadores poderosos el cálculo constituye un verdadero desafío. Una técnica muy poderosa para la obtención del estado fundamental se basa en el siguiente teorema.

Sea $\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle$, entonces $E_0 \leq \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}$.

En efecto, sea $|\phi\rangle$ una función de prueba para el estado fundamental de \hat{H} . Entonces,

$$|\phi\rangle = \sum_n |n\rangle \underbrace{\langle n | \phi \rangle}_{c_n}.$$

Por lo tanto,

$$\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle = \sum_n E_n |c_n|^2.$$

Además, puesto que $E_0 \leq E_1 \leq E_2 \leq \dots$, entonces

$$\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle \geq \sum_n E_0 |c_n|^2 = E_0 \sum_n |c_n|^2 = E_0 \langle \phi | \phi \rangle,$$

con lo cual

$$E_0 \leq \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle}. \quad (6.118)$$

La gracia de esta desigualdad es que, cual sea la función de prueba ϕ , el cociente $\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle / \langle \phi | \phi \rangle$ nunca será menor que la energía base. Una forma de comenzar es intentando diversos ϕ y escoger el que aporta el cociente más bajo. En la práctica, existen técnicas sistemáticas para obtener resultados confiables. Ilustremos con un ejemplo.

6.8.1. Oscilador armónico 3D

Si bien este sistema cuenta con una solución exacta, resulta útil ilustrar como el uso de una función de prueba bastante rudimentaria permite una buena aproximación a la energía del estado fundamental.

Tenemos

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{\mathbf{r}}^2,$$

Sea la función de prueba $\langle \mathbf{r} | \phi \rangle = e^{-\alpha r}$. Para las integrales que siguen nos valdremos del resultado

$$\int_0^{\infty} dx x^n e^{-x} = n! .$$

Entonces

$$\langle \phi | \phi \rangle = 4\pi \int_0^{\infty} r^2 dr e^{-2\alpha r} = \frac{\pi}{\alpha^3} . \quad (6.119)$$

Además, se pueden verificar

$$\langle \phi | \hat{K} | \phi \rangle = 4\pi \int_0^{\infty} r^2 dr e^{-\alpha r} \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r \right) e^{-\alpha r} = \frac{\pi}{2m\alpha} , \quad (6.120)$$

$$\langle \phi | \hat{V} | \phi \rangle = 4\pi \int_0^{\infty} r^2 dr e^{-\alpha r} \left(\frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \right) e^{-\alpha r} = \frac{3\pi}{2\alpha^5} m \omega^2 , \quad (6.121)$$

con lo cual obtenemos

$$\langle \hat{H} \rangle_{\alpha} \equiv \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = \frac{\alpha^2}{2m} + \frac{3m\omega^2}{2\alpha^2} . \quad (6.122)$$

Para encontrar el mínimo imponemos

$$\frac{\partial \langle \hat{H} \rangle_{\alpha}}{\partial \alpha} = 0 ,$$

de donde obtenemos

$$\alpha^2 = \sqrt{3} m \omega .$$

Se puede verificar, evaluando la curvatura de $\langle \hat{H} \rangle_{\alpha}$, que efectivamente se trata de un mínimo. Con esto,

$$\langle \hat{H} \rangle_{\alpha} = \sqrt{3} \omega .$$

El valor exacto es $1,5 \hbar \omega$, habiendo obtenido $1,73 \hbar \omega$. El error es del orden de un 15 %, bastante bajo considerando la crudeza de ϕ .

6.8.2. Atomo de helio

El átomo de helio (He-4) está compuesto por un núcleo atómico con dos protones (de carga neta $+2e$) y dos neutrones. Además, dos electrones se ligan a este núcleo formando

un estado ligado eléctricamente neutro. Sin considerar los grados de libertad de spin, este sistema puede ser descrito mediante el hamiltoniano

$$H = \left\{ \frac{p_1^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_1} \right\} + \left\{ \frac{p_2^2}{2m} - \frac{2e^2}{r_2} \right\} + \frac{e^2}{r_{12}} .$$

Los rótulos $1,2$ denotan cada uno de los dos electrones, con r_{12} la distancia entre ellos. Los dos primeros términos dan cuenta de la energía de cada electrón en presencia de la fuerza atractiva debido al núcleo atómico, de carga $2e$. El tercer término da cuenta de la repulsión electrostática entre ambos electrones, los que están separados en r_{12} .

Haremos uso del método variacional para obtener una cota del mínimo de energía. Consideremos la siguiente función de prueba para los dos electrones:

$$\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \psi \rangle = \exp(-\alpha r_1) \exp(-\alpha r_2) .$$

Para la evaluación de $\langle \Psi | \Psi \rangle$ procedemos al igual que en la sección interior, con la sola diferencia que la integración se lleva a cabo en las dos coordenadas. Así entonces

$$\langle \psi | \psi \rangle = (4\pi)^2 \int_0^\infty r_1^2 dr_1 e^{-2\alpha r_1} \int_0^\infty r_2^2 dr_2 e^{-2\alpha r_2} = \frac{\pi^2}{\alpha^6} . \quad (6.123)$$

El factor $(4\pi)^2$ proviene de la integración en los ángulos sólidos $d\Omega_1 d\Omega_2$. Para la energía cinética de uno de los electrones se tiene

$$\langle \psi | \hat{K}_1 | \psi \rangle = (4\pi)^2 \int_0^\infty r_2^2 dr_2 e^{-2\alpha r_2} \int_0^\infty r_1^2 dr_1 e^{-\alpha r_1} \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{1}{r_1} \frac{d^2}{dr_1^2} r_1 \right) e^{-\alpha r_1} = \frac{\pi^2}{2m\alpha^4} . \quad (6.124)$$

Para la energía potencial del mismo electrón

$$\langle \psi | \hat{V}_1 | \psi \rangle = (4\pi)^2 \int_0^\infty r_2^2 dr_2 e^{-2\alpha r_2} \int_0^\infty r_1^2 dr_1 e^{-\alpha r_1} \left(\frac{-2e^2}{r_1} \right) e^{-\alpha r_1} = -\frac{2e^2\pi^2}{\alpha^5} . \quad (6.125)$$

Idénticos resultados se obtienen al evaluar $\langle \psi | K_2 | \psi \rangle$ y $\langle \psi | V_2 | \psi \rangle$.

En la evaluación de $\langle \psi | e^2/r_{12} | \psi \rangle$ la integración en las variables angulares requiere atención adicional. Escribamos

$$\langle \psi | \frac{e^2}{r_{12}} | \psi \rangle = \int d^3 r_2 d^3 r_1 e^{-\alpha r_2 - \alpha r_1} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} e^{-\alpha r_1 - \alpha r_2}$$

Introduciendo los cambios de variables $\mathbf{x}_1 = 2\alpha \mathbf{r}_1$, $\mathbf{x}_2 = 2\alpha \mathbf{r}_2$, y reordenando términos obtenemos

$$\langle \psi | \frac{e^2}{r_{12}} | \psi \rangle = \frac{e^2}{(2\alpha)^5} \int d^3 x_2 e^{-x_2} \int d^3 x_1 \frac{e^{-x_1}}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} . \quad (6.126)$$

Para esta expresión hagamos uso de la identidad

$$\frac{1}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} = \frac{1}{x_>} \sum_L \left(\frac{x_<}{x_>} \right)^L P_L(\cos \theta),$$

donde $\hat{x}_1 \cdot \hat{x}_2 = \cos \theta$, $x_< = \min\{x_1, x_2\}$, y $x_> = \max\{x_1, x_2\}$.

Prestemos atención a la integral en $d^3x_1 = x_1^2 dx_1 \sin \theta d\theta d\varphi$. Entonces

$$\int \frac{d^3x_1 e^{-x_1}}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} = \int_0^\infty x_1^2 dx_1 \frac{1}{x_>} e^{-x_1} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\theta \sin \theta \sum_L \left(\frac{x_<}{x_>} \right)^L P_L(\cos \theta).$$

Al integrar en φ surge un factor 2π , y para integrar en θ usamos la propiedad

$$\int_0^\pi \sin \theta P_L(\cos \theta) d\theta = \int_{-1}^1 P_L(u) du = 2 \delta_{L0},$$

con δ_{L0} la delta de Kronecker. Este resultado reduce la sumatoria a $L = 0$, por lo que

$$\int \frac{d^3x_1 e^{-x_1}}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} = 4\pi \int_0^\infty r_1^2 dr_1 \frac{e^{-x_1}}{x_>}.$$

La integral en x_1 la separamos en los intervalos $(0, x_2)$ y (x_2, ∞) . En el primero de ellos $x_> = x_2$, mientras que en el segundo $x_> = x_1$. Por lo tanto

$$\int \frac{d^3x_1 e^{-x_1}}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} = 4\pi \left[\frac{1}{x_2} \int_0^{x_2} r_1^2 e^{-x_1} dx_1 + \int_{x_2}^\infty x_1 dx_1 e^{-x_1} \right] = \frac{4\pi}{x_2} [2 - (2 + x_2)e^{-x_2}].$$

Sustituyendo este resultado en la Ec. (6.126) e integrando en d^3x_2 obtenemos

$$\langle \psi | \frac{e^2}{r_{12}} | \psi \rangle = \frac{5\pi^2}{8\alpha^5}.$$

Este resultado, combinado con el obtenido para $\langle K_{1,2} \rangle_\psi$ y $\langle V_{1,2} \rangle_\psi$, conduce a

$$\langle \hat{H} \rangle_\psi = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\alpha^2}{m} - \frac{27 e^2 \alpha}{8},$$

Al exigir $\partial \langle \hat{H} \rangle_\psi / \partial \alpha = 0$, obtenemos $\alpha = 27 m e^2 / 16$, lo cual conduce a

$$\langle \hat{H} \rangle_{min} = - \left(\frac{27}{16} \right)^2 m e^4 = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} \right)^6 E_H,$$

con E_H la energía de ligazón del átomo de hidrógeno. El resultado numérico que obtenemos para la energía del átomo de helio es $-77,5$ MeV, en tanto que el valor experimental es ligeramente mayor, $-78,97$ MeV. La diferencia porcentual es menor que 2%.

Ejercicio 6.27 Utilice el método variacional para obtener una cota de la energía del estado fundamental para una partícula de masa m , contenida por el potencial lineal 3D esférico $U(r) = \lambda r$.

Ejercicio 6.28 Una partícula de masa M está ligada por un potencial esférico dado por

$$V(r) = -A \frac{\sin(\pi r/R)}{r^2} \Theta(R - r) ,$$

con $4MA/\hbar^2 = 1000$, y $\Theta(x)$ la función escalón de Heaviside. Haciendo uso del método variacional con la función de prueba $e^{-\beta r}$ obtenga una buena cota de la energía del estado fundamental.

6.9. El principio de exclusión de Pauli

Ante sistemas constituidos por dos o más partículas de igual naturaleza (idénticas) la mecánica cuántica impone restricciones cuyas implicaciones son profundas. Partículas de igual naturaleza son indistinguibles, como lo serían los electrones, protones, neutrones, etc. No hay forma física que permita distinguir uno de otro. Por ejemplo, si se tienen N electrones en un sistema sólo podemos hacer referencia a *un* electrón, en vez del i -ésimo electrón.

Comencemos analizando un sistema formado por dos partículas indistinguibles. El hamiltoniano en tal caso pudiera estar dado por

$$\hat{H}(1, 2) = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + V(\hat{r}_1, \hat{r}_2) ,$$

con $V(\hat{r}_1, \hat{r}_2) = V(\hat{r}_2, \hat{r}_1)$. Por lo tanto podemos escribir

$$\hat{H}(1, 2) = \hat{H}(2, 1) ,$$

donde '1' y '2' resumen todos los rótulos que identifican la partícula '1' y '2', respectivamente, incluidos spin e isospín si fuesen necesarios. La función de onda solución de la ecuación de Schrödinger para este sistema de dos cuerpos la representamos por $\psi_E(1, 2)$, vale decir

$$\hat{H}(1, 2) \psi_E(1, 2) = E \psi_E(1, 2) .$$

Puesto que el orden de la rotulación (1, 2) es muda, podemos intercambiar su orden:

$$\hat{H}(2, 1) \psi_E(2, 1) = E \psi_E(2, 1) .$$

Haciendo uso de la simetría del hamiltoniano se obtiene,

$$\hat{H}(1, 2) \psi_E(2, 1) = E\psi_E(2, 1) .$$

Definamos el operador de intercambio como aquel que al actuar sobre el estado Ψ intercambia los *rótulos* de las partículas $1 \rightleftharpoons 2$. Si denominamos \hat{P}_{12} a este operador, entonces

$$\hat{P}_{12}\psi_E(1, 2) = \psi_E(2, 1) .$$

Sustituyendo en esta última ecuación,

$$\begin{aligned} \hat{H}(1, 2)\hat{P}_{12}\psi_E(1, 2) &= E\psi_E(2, 1) \\ &= E P_{12}\psi_E(1, 2) \\ &= P_{12} E\psi_E(1, 2) \\ &= P_{12} \hat{H}(1, 2)\psi_E(1, 2) \end{aligned} \quad (6.127)$$

Por lo tanto,

$$\hat{H}(1, 2)\hat{P}_{12}\psi_E(1, 2) = P_{12}\hat{H}(1, 2)\psi_E(1, 2) .$$

Puesto que ésta es válida para autoestados arbitrarios, entonces

$$\left[\hat{H}(1, 2), \hat{P}_{12} \right] = 0 .$$

Esto implica que \hat{P}_{12} es una constante de movimiento y compatible con el hamiltoniano. Además, puesto que la acción de dos intercambios consecutivos conlleva la identidad,

$$(\hat{P}_{12})^2 = \mathbb{1} ,$$

entonces los autovalores de \hat{P}_{12} son ± 1 . Claramente, las autofunciones son las siguientes construcciones simétricas y antisimétricas:

$$\begin{aligned} \Psi^{(A)}(1, 2) &= \frac{1}{N_S} [\psi(1, 2) - \psi(2, 1)] . \\ \Psi^{(S)}(1, 2) &= \frac{1}{N_A} [\psi(1, 2) + \psi(2, 1)] . \end{aligned} \quad (6.128)$$

La extensión de este resultado a sistemas de tres partículas resulta evidente:

$$\begin{aligned} \Psi_S(1, 2, 3) &= \frac{1}{N_S} [\psi(1, 2, 3) + \psi(2, 3, 1) + \psi(3, 1, 2) \\ &\quad + \psi(3, 2, 1) + \psi(2, 1, 3) + \psi(1, 3, 2)] ; \end{aligned} \quad (6.129a)$$

$$\begin{aligned} \Psi_A(1, 2, 3) &= \frac{1}{N_S} [\psi(1, 2, 3) + \psi(2, 3, 1) + \psi(3, 1, 2) \\ &\quad - \psi(3, 2, 1) - \psi(2, 1, 3) - \psi(1, 3, 2)] . \end{aligned} \quad (6.129b)$$

El *Principio de Pauli* es una ley fundamental de la naturaleza y donde se postula que

- a) Los sistemas formados por partículas idénticas de *spin semientero* son descritos por funciones de onda antisimétricas. A tales partículas se les denomina *fermiones* y obedecen la estadística de Fermi-Dirac.
- b) Los sistemas formados por partículas idénticas de *spin entero* son descritos por funciones de onda simétricas. A tales partículas se les denomina *bosones* y obedecen la estadística de Bose-Einstein.

Consideremos el caso de N fermiones sometidos a un potencial externo. Los fermiones no interactúan entre sí. Entonces,

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i ,$$

donde

$$\hat{H}_i = \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}_i) .$$

Los autoestados de \hat{H}_i los denotamos por $\phi_\alpha(x_i)$, donde $x_i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i)$. Una solución de

$$\hat{H}\Psi_E(1, 2, \dots, N) = E \Psi_E(1, 2, \dots, N) ,$$

es

$$\Psi_E(1, 2, \dots, N) = \phi_\alpha(1) \phi_\beta(2) \cdots \phi_\nu(N) ,$$

donde

$$E = E_\alpha + E_\beta + \cdots + E_\nu .$$

La antisimetrización de la función de onda de las N partículas está garantizada por el determinante

$$\Psi_E(1, 2, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_\alpha(1) & \phi_\alpha(2) & \cdots & \phi_\alpha(N) \\ \phi_\beta(1) & \phi_\beta(2) & \cdots & \phi_\beta(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_\nu(1) & \phi_\nu(2) & \cdots & \phi_\nu(N) \end{vmatrix} . \quad (6.130)$$

Lo interesante de este resultado es que dos partículas –por ejemplo 1 y 2– no pueden ocupar los mismos números cuánticos implícitos en α . De otro modo la función de onda se anula dado que el determinante resulta nulo.

A fin de ilustrar con un ejemplo sencillo, examinemos el caso de dos estados, $|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$, los que son ocupados por dos electrones. Los estados no necesariamente corresponden a un potencial particular. Bien podemos pensar en un oscilador en la Tierra y otro en la Luna. Si denotamos por \mathbf{r} la coordenada de un electrón, entonces la función de onda viene dada por $\phi_\alpha(\mathbf{r})$. Supondremos que estas funciones están normalizadas. Entonces, al describir dos electrones la función de onda antisimetrizada viene dada por

$$\Psi(1, 2) = \mathcal{N} [\phi_\alpha(\mathbf{r}_1)\phi_\beta(\mathbf{r}_2) - \phi_\alpha(\mathbf{r}_2)\phi_\beta(\mathbf{r}_1)] . \quad (6.131)$$

La constante \mathcal{N} se introduce para normalizar. Imponiendo

$$\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 |\Psi(1, 2)|^2 = 1 ,$$

obtenemos

$$\frac{1}{|\mathcal{N}|^2} = 2 - 2|\langle\alpha|\beta\rangle|^2 .$$

La función de onda $\Psi(1, 2)$ describe dos electrones. Puesto que son indistinguibles, no hay forma de saber cuál de ellos está en un estado o en otro. Nos podemos preguntar entonces por la probabilidad de encontrar *un* electrón en la coordenada \mathbf{r} . Para ello integramos $\int |\Psi|^2$ sobre todas las coordenadas excepto una, que escogeremos (arbitrariamente) aquella rotulada por '2'. Si denotamos por $\varrho(\mathbf{r}_1)$ la densidad de probabilidad de encontrar un electrón en \mathbf{r}_1 , entonces

$$\varrho(\mathbf{r}_1) = \int d\mathbf{r}_2 |\Psi(1, 2)|^2 = \frac{1}{|\mathcal{N}|^2} [|\phi_\alpha(\mathbf{r}_1)|^2 + |\phi_\beta(\mathbf{r}_1)|^2 - 2 \operatorname{Re} \{ \phi_\alpha^*(\mathbf{r}_1)\phi_\beta(\mathbf{r}_1)\langle\beta|\alpha\rangle \}]$$

Si las funciones de onda $|\alpha\rangle$ y $|\beta\rangle$ representan estados localizados a distancias muy grandes, como pudiera ser un oscilador armónico en la Tierra y el otro en la Luna, entonces los términos de interferencia ($\sim \phi_\alpha^*\phi_\beta$) se cancelan así como también el *traslape* $\langle\alpha|\beta\rangle$ (ver Fig. 6.7). En tal caso,

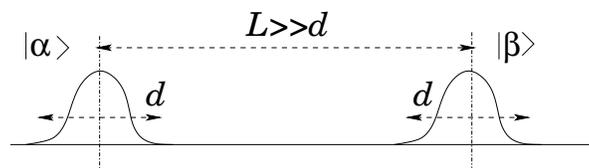


Figura 6.7: Dos estados localizados con traslape ínfimo.

$$\varrho(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{2} [|\phi_\alpha(\mathbf{r})|^2 + |\phi_\beta(\mathbf{r})|^2]$$

En las vecindades de la Tierra $|\phi_\beta(\mathbf{r})|^2 \approx 0$, de modo que

$$\varrho(\mathbf{r}) \approx \frac{1}{2} |\phi_\alpha(\mathbf{r})|^2$$

Puesto que $|\phi_\alpha(\mathbf{r})|^2$ es no nula en un pequeño entorno de un laboratorio en la Tierra, al integrar sobre ese dominio la probabilidad de encontrar uno de los dos electrones es $\frac{1}{2}$. Como se aprecia, el hecho de que el traslape sea ínfimo garantiza que no haya interferencia entre electrones en la Luna y los que están en el laboratorio. El efecto se torna importante en la medida que $\langle \alpha | \beta \rangle$ sea no despreciable.

Como vemos, a pesar de que los electrones en la Luna y en la Tierra están antisimetrizados, el traslape prácticamente nulo entre sus funciones de onda permite que el efecto de la antisimetrización sea irrelevante.

Se deja propuesto analizar el problema de tres electrones: dos de ellos bajo un mismo potencial (oscilador en la Tierra) y un tercero en la Luna. Uno debiera llegar a una función de onda antisimetrizada para los dos electrones en el laboratorio, sin que el que esté en la Luna los afecte. Es instructivo constatar tal resultado, que con el análisis precedente resulta directo.

Ejercicio 6.29 Considere un sistema unidimensional formado por dos fermiones *quasi-libres* en estados de momentum k_a y k_b , respectivamente. Sus funciones de onda están dadas por

$$\langle x|a\rangle = \phi_a(x) = N_a e^{-ik_a x}, \quad \langle x|b\rangle = \phi_b(x) = N_b e^{-ik_b x}.$$

Construya (sin normalizar) la función de ondas del par de fermiones, dándole la forma

$$\Psi(x_1, x_2) = N_a N_b \phi_a(x_1) \phi_b(x_2) F(x_2 - x_1).$$

Grafique $|F(x_2 - x_1)|^2$, prestando atención a su comportamiento como función de $k_b - k_a$. En particular, identifique aquellas situaciones para las que $|F|^2$ es pequeña y máxima.

Ejercicio 6.30 El hamiltoniano para dos neutrones, '1' y '2', sometidos a un potencial externo esféricamente simétrico está dado por

$$\mathcal{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega^2 \hat{r}_1^2 + \frac{\hat{p}_2^2}{2M} + \frac{1}{2} M \omega^2 \hat{r}_2^2.$$

Considerando los estados de spin total $S = 0$ y $S = 1$, construya la(s) función(es) de onda del estado fundamental de este sistema consistente con el principio de exclusión de Pauli. Suponga conocidas las autofunciones del oscilador armónico de una partícula en el estado fundamental, $\{\phi_0(r)\}$.

6.10. Modelo de gas de Fermi

Consideremos un cubo de volumen $V = L^3$, cuyas paredes definen una barrera de potencial infinita. Para fijar ideas, supongamos que tres de las caras del cubo yacen en los planos $x = 0$, $y = 0$, y $z = 0$. Si el potencial es nulo al interior del cubo entonces las funciones de onda soluciones de la ecuación de Schrödinger, consistentes con las condiciones de borde en la frontera del cubo, se pueden escribir

$$\Psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = A \sin(k_x x) \sin(k_y y) \sin(k_z z) .$$

Aquí k_x , k_y y k_z son tales que la función de onda se anule en las paredes, por lo que

$$k_x = \frac{n_x \pi}{L} , \quad k_y = \frac{n_y \pi}{L} , \quad k_z = \frac{n_z \pi}{L} , \quad (6.132)$$

con los coeficientes n_x , n_y y n_z enteros positivos no nulos. La energía de cada estado queda expresada por

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) .$$

Como se observa, este espectro de niveles exhibe degeneración, lo que significa que para una misma energía se dan dos o más configuraciones que la comparten. Por ejemplo,

$$E_{123} = E_{231} = E_{312} = E_{213} = E_{132} = E_{321} ,$$

por lo que la energía $E = 14 E_0$, tiene degeneración 6. Aquí hemos denotado $E_0 = \hbar^2 \pi^2 / 2mL^2$.

Dado el espectro anterior, nos preguntamos por el número de partículas (fermiones) se pueden poner al interior del cubo respetando las siguientes reglas:

- Cada nivel puede ser ocupado por sólo una partícula;
- Los niveles se ocupan de menor a mayor energía, hasta una energía máxima ε_F , la energía de Fermi.

Supondremos (para comenzar) que las partículas no interactúan entre sí. En tal sentido el sistema consiste en un gas ideal de fermiones, lo que se entiende por *gas de Fermi* no interactuante.

La exigencia de ocupar sólo un estado por partícula es consecuencia del principio de exclusión de Pauli. La antisimetrización de la función de onda impide que dos o más partículas

compartan un mismo estado. Esto se constata de forma inmediata al considerar la función de onda antisimetrizada para un sistema formado por dos fermiones, ambos ocupando un mismo estado α y cuya autofunción es ϕ_α . Así, la función antisimetrizada queda expresada $\Psi(x_1, x_2) = \phi_\alpha(x_1)\phi_\alpha(x_2) - \phi_\alpha(x_2)\phi_\alpha(x_1) = 0$. Entonces, la función de onda antisimetrizada para dos fermiones ocupando un mismo estado resulta de norma nula, lo que es inaceptable.

La determinación del número de estados con $E_{n_x n_y n_z} \leq \varepsilon_F$ equivale a encontrar del número de vértices de celdas unidarias al interior de una esfera de radio N_F , donde

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 N_F^2.$$

En tal caso se debe cumplir $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2 \leq N_F^2$. Si el número de celdas es suficientemente grande, entonces el número N de estados que cumple esta condición es

$$N = \frac{1}{8} \times \left(\frac{4}{3}\pi N_F^3\right) = \frac{1}{6}\pi N_F^3.$$

Definimos a este punto el *momentum de Fermi*, k_F , dado por

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar k_F^2}{2m}.$$

Combinando estas tres ecuaciones obtenemos la siguiente relación entre la densidad de partículas, $\rho = N/L^3$, y el momentum de Fermi: $\rho = k_F^3/6\pi^2$. Aún no hemos dado cuenta de la degeneración $\times 2$ que permite el grado de libertad de spin en la ocupación de cada estado. Eso lo haremos en seguida. Por ahora observemos una forma alternativa de obtener el número de estados N hasta un momentum de Fermi k_F .

De las relaciones para los momenta de ocupación, k_x, k_y, k_z , en la Ec. (6.132) notamos que

$$d^3k = \left(\frac{\pi}{L}\right)^3 d^3n.$$

Por lo tanto,

$$\frac{1}{V} d^3n = \frac{d^3k}{\pi^3}.$$

Finalmente, puesto que al contar estados ocupados sólo debemos considerar valores positivos de $n_{x,y,z}$, lo que restringe a los valores positivos k_{xyz} , corregimos por $1/8$ (un octante de esfera) la integración volumétrica en d^3k . Esta consideración implica

$$\frac{N}{V} = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \Theta(k_F - k) = \frac{k_F^3}{6\pi^2}.$$

Este resultado replica lo obtenido anteriormente para ρ , omitiendo degeneración por spin.

Al considerar partículas de spin $s = 1/2$, el número de partículas por nivel debe dar cuenta de la degeneración $(2s + 1)$, por lo que se duplica. Con ello la densidad de partículas al llenar los niveles hasta k_F resulta

$$\rho = \frac{k_F^3}{3\pi^2} . \quad (6.133)$$

En base a estos resultados podemos hacer algunas estimaciones para caracterizar sistemas de muchos fermiones. Tomemos el caso de un metal, donde los más sencillos están compuestos por átomos de un mismo tipo muy próximos entre sí. Una característica de los metales es que los electrones de valencia de los átomos que los componen pierden pertenencia a algún átomo en particular. Esto permite a tales electrones desplazarse a través del sólido sin mayor impedimento, en forma análoga a como lo harían moléculas de aire contenidas en un recipiente cerrado. A estos electrones se les denomina *electrones de conducción*, siendo responsables en gran medida de la conductividad eléctrica y térmica de los metales. Una descripción detallada de este sistema es bastante complejo y puede requerir de técnicas formales bastante sofisticadas. Sin embargo, en una primera aproximación podemos visualizar el sistema concibiéndolo como un gas de Fermi, lo que permite dimensionar algunas de sus propiedades.

Densidades de electrones de conducción típicas en un metal son del orden de 10^{28} m^{-3} . Este valor para N/V equivale a diez electrones en un volumen de 1 nm^3 . Haciendo uso de la Ec. (6.133) inferimos que $k_F = 6,7 \text{ nm}^{-1}$. Si consideramos el sistema como un gas no interactuante, la energía de los electrones queda dada por

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

Con ello, la energía de Fermi $\varepsilon_F = \varepsilon(k_F) \approx 1,7 \text{ eV}$.

Otro sistema que también se comporta como un gas (interactuante) de Fermi es una estrella de neutrones. Las estrellas de neutrones son objetos estelares extremadamente compactos, cuyos radios están entre 10 y 12 km, con masas cercanas a dos masas solares. Su constitución es principalmente de neutrones, aunque también cuenta con protones, electrones, muones, y muchas otras partículas que condicionan su equilibrio. La masa del Sol es $1,9 \times 10^{30} \text{ kg}$, mientras que la masa de un neutrón es $1,7 \times 10^{-27} \text{ kg}$. Esta información nos permite estimar el número de neutrones en una estrella de dos masas solares, como una estrella de neutrones, resultando $2,2 \times 10^{57}$. Tomando un radio de 10 km para la estrella, entonces $N/V = 0,52 \text{ fm}^{-3}$. Por lo tanto el momentum de Fermi resulta $k_F = 2,5 \text{ fm}^{-3}$.

En una estrella de neutrones sus constituyentes interactúan fuertemente, contribución que ha de ser tomada en cuenta en la evaluación de la energía de Fermi del sistema. Tal

consideración escapa del alcance de estos apuntes. Sin embargo, podemos calcular la energía cinética del neutrón menos ligado, K_F . Considerando cinemática relativista tenemos

$$K_F^{(rel)} = \sqrt{m^2 c^4 + \hbar^2 c^2 k_F^2} - mc^2 \approx 121 \text{ MeV} ,$$

donde hemos usado $mc^2 = 940 \text{ MeV}$, para el neutrón. En el límite no relativista obtenemos

$$K_F^{(n.r.)} = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = 129 \text{ MeV} .$$

La diferencia entre ambos enfoques es de 7%.

Ejercicio 6.31 Determine la relación entre la energía total E_T y el número N de fermiones para el caso un gas de electrones no interactuantes confinados en un pozo cuadrado 2D infinito de lados de longitud L . ¿Cuál es la relación entre el momentum de Fermi k_F y la densidad de partículas $n = N/L^2$, en este caso?

Apéndice A

Unidades

A.1. Alfabeto griego

Orden	Símbolo	Equivalencia	Nombre	Name
1	$A \alpha$	A a	alfa	alpha
2	$B \beta$	B b	beta	beta
3	$\Gamma \gamma$	G g	gamma	gamma
4	$\Delta \delta, \vartheta$	D d	delta	delta
5	$E \epsilon, \varepsilon$	E e	épsilon	epsilon
6	$Z \zeta$	z	dseda	zêta
7	$H \eta$	e	eta	êta
8	$\Theta \theta, \vartheta$	th,t	zeta	thêta
9	$I \iota$	I i	iota	iota
10	$K \kappa, \varkappa$	K k	kappa	kappa
11	$\Lambda \lambda$	L l	lambda	lambda
12	$M \mu$	M m	mi	mu
13	$N \nu$	N n	ni	nu
14	$\Xi \xi$	x	xi	xi
15	$O \omicron$	O o	ómicron	omicron
16	$\Pi \pi, \varpi$	P p	pi	pi
17	$R \rho, \varrho$	R r	ro	rho
18	$\Sigma \sigma, \varsigma$	S s	sigma	sigma
19	$T \tau$	T t	tau	tau
20	$\Upsilon \upsilon$	y	ípsilon	upsilon
21	$\Phi \phi, \varphi$	F f	fi	phi
22	$X \chi$	ch	ji	chi
23	$\Psi \psi$	ps	psi	psi
24	$\Omega \omega$	O o	omega	omega

A.2. Prefijos del *Sistema Internacional*

Factor	Nombre (Name)	Símbolo	Factor	Nombre (Name)	Símbolo
10^{-1}	deci	d	10^1	deca (deka)	da
10^{-2}	centi	c	10^2	hecto	h
10^{-3}	mili (milli)	m	10^3	kilo	k
10^{-6}	micro	μ	10^6	mega	M
10^{-9}	nano	n	10^9	giga	G
10^{-12}	pico	p	10^{12}	tera	T
10^{-15}	femto	f	10^{15}	peta	P
10^{-18}	ato (atto)	a	10^{18}	exa	E
10^{-21}	zepto	z	10^{21}	zetta	Z
10^{-24}	yocto	y	10^{24}	yotta	Y

Apéndice B

Integrales definidas

B.1. Evaluación de $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2-ibx} dx$

La función $f(z) = e^{-z^2}$ es analítica, por lo cual $\oint f(z)dz = 0$, para toda trayectoria cerrada. En particular para la trayectoria rectangular de la Fig. B.1. Al tomar los tramos \overline{BC} y \overline{DA} infinitamente lejos entonces $|f(z)| \rightarrow 0$, por lo que $\int_{BC} f dz = \int_{DA} f dz = 0$. Con ello $\int_{AB} f dz + \int_{CD} f dz = 0$, o sea

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx + \int_{+\infty}^{-\infty} e^{-(x+ib/2)^2} dx = 0 .$$

Usando $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$, expandiendo y despejando se obtiene

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2-ibx} dx = \sqrt{\pi} e^{-b^2/4} . \tag{B.1}$$

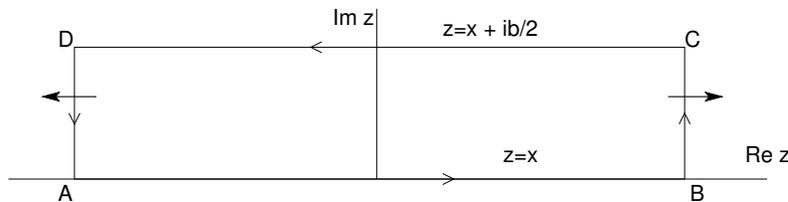


Figura B.1: Trayectoria rectangular cerrada en \mathbb{C} .

B.2. Evaluación de $\int_{-\infty}^{\infty} e^{ix^2} dx$

Consideramos la función $f(z) = e^{iz^2}$, tomando la trayectoria cerrada mostrada en la Fig. B.2. Puesto $f(z)$ es analítica en todo \mathbb{C} , entonces $\oint f(z)dz = 0$. La trayectoria ha sido escogida para que al evaluar $f(z)$ resulte una exponencial real del tipo e^{-R^2} . En el tramo CA parametrizamos $z = Re^{i\phi}$, escogiendo ϕ de modo que $iz^2 = -R^2$. Esto se logra exigiendo $i e^{2i\phi} = -1$, o bien $\phi = \pi/4$. La integración sobre el arco BC se anula cuando el radio tiende a infinito. Por lo tanto $\int_{AB} f(z)dz + \int_{CA} f(z)dz = 0$. En el tramo AB parametrizamos $z = x$, donde x varía de 0 a ∞ , con $dz = dx$. Para el tramo CA parametrizamos $z = Re^{i\phi}$, donde R varía de ∞ a 0, con $dz = dR e^{i\phi}$. Se obtiene

$$\int_0^{\infty} e^{ix^2} dx + \int_{\infty}^0 e^{-R^2} e^{i\phi} dR = 0 .$$

Los integrandos son simétricos y además $e^{i\phi} = (1+i)/\sqrt{2}$, con lo cual

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ix^2} dx = \frac{1+i}{\sqrt{2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-R^2} dR .$$

Usando $\int_{-\infty}^{\infty} e^{-R^2} dR = \sqrt{\pi}$, obtenemos

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ix^2} dx = (1+i)\sqrt{\frac{\pi}{2}} . \quad (\text{B.2})$$

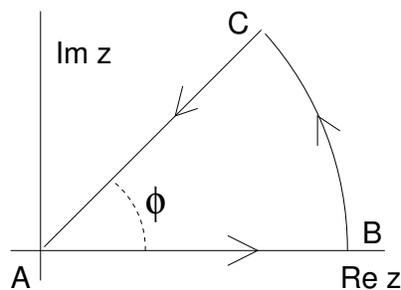


Figura B.2: Trayectoria octavo de círculo en \mathbb{C} .

B.3. Evaluación de $\int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ikx}/(k^2 + b^2)$

Si $b \in \mathbb{R}$, la función $f(z) = e^{izx}/(z^2 + b^2)$ tiene singularidades en $z = \pm ib$. Esta función se puede reescribir

$$f(z) = \frac{1}{2ib} \left(\frac{e^{izx}}{z - ib} - \frac{e^{izx}}{z + ib} \right).$$

Para el cálculo de la integral planteada, si $x > 0$ conviene utilizar la trayectoria (1) de la Fig. B.3, garantizando que la integral sobre el arco se anula al hacer su radio infinitamente grande. Ello porque $\text{Im } z > 0$, por lo que $\text{Re } ikz < 0$, garantizando convergencia a cero sobre el arco cuando $|z| \rightarrow \infty$. En esta trayectoria solo participa el polo de $f(z)$ en $z = ib$, cuyo residuo es

$$\text{Res } f(z)]_{z=ib} = \frac{1}{2ib} e^{-bx}.$$

De acuerdo a Cauchy obtenemos

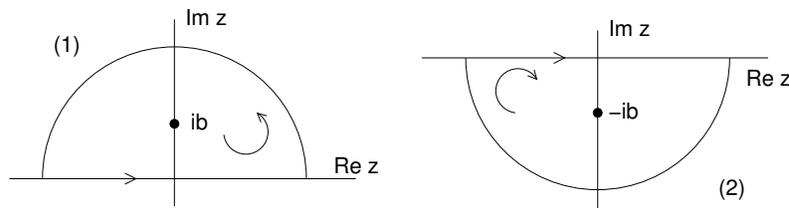


Figura B.3: Trayectorias semi-circulares en \mathbb{C} que encierran un polo.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx}}{k^2 + b^2} dk = 2i\pi \left(\frac{1}{2ib} e^{-bx} \right) = \pi \frac{e^{-bx}}{b}$$

Al considerar $x < 0$, la trayectoria a escoger es la (2) de la Fig. B.3, con polo simple en $z = -ib$. El resto del procedimiento es análogo al anterior. El resumen de los dos casos se sintetiza en

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ikx}}{k^2 + b^2} dk = \pi \frac{e^{-b|x|}}{b} \quad (\text{B.3})$$

Apéndice C

Identidades matemáticas

C.1. Integrales indefinidas recurrentes

$$\int e^{bx} dx = \frac{1}{b} e^{bx} \quad (\text{C.1})$$

$$\int x e^{bx} dx = \frac{\partial}{\partial b} \left(\frac{1}{b} e^{bx} \right) \quad (\text{C.2})$$

$$\int x^2 e^{bx} dx = \frac{\partial^2}{\partial b^2} \left(\frac{1}{b} e^{bx} \right) \quad (\text{C.3})$$

$$\int \sin^2(Ax) dx = \frac{x}{2} - \frac{\sin(2Ax)}{4A} = \frac{x}{2} [1 - j_0(2Ax)] \quad (\text{C.4})$$

$$\int \cos^2(Ax) dx = \frac{x}{2} + \frac{\sin(2Ax)}{4A} = \frac{x}{2} [1 + j_0(2Ax)] \quad (\text{C.5})$$

$$\int \sin(Ax) e^{Bx} dx = \frac{B \sin(Ax) - A \cos(Ax)}{A^2 + B^2} e^{Bx} \quad (\text{C.6})$$

$$\int \cos(Ax) e^{Bx} dx = \frac{A \sin(Ax) + B \cos(Ax)}{A^2 + B^2} e^{Bx} \quad (\text{C.7})$$

$$\int \sin(Ax) \sin(Bx) dx = \frac{x}{2} (j_0[(A - B)x] - j_0[(A + B)x]) \quad (\text{C.8})$$

$$\int \cos(Ax) \cos(Bx) dx = \frac{x}{2} (j_0[(A - B)x] + j_0[(A + B)x]) \quad (\text{C.9})$$

$$\int \sin(Ax) \cos(Bx) dx = \frac{x}{2} (n_0[(A - B)x] + n_0[(A + B)x]) \quad (\text{C.10})$$

C.2. Integrales definidas recurrentes

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \equiv G(a) \quad (\operatorname{Re}\{a\} > 0) \quad (\text{C.11})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx = -\frac{\partial G}{\partial a} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \quad (\text{C.12})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ax^2+bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{-a}} e^{-b^2/4a} \quad (\operatorname{Re}\{a\} \leq 0; a \neq 0) \quad (\text{C.13})$$

$$\int_0^{\pi} \cos^2(x) dx = \frac{\pi}{2} \quad (\text{C.14})$$

$$\int_0^{\pi} \sin^2(x) dx = \frac{\pi}{2} \quad (\text{C.15})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dx = 2\pi \delta(k) \quad (\text{C.16})$$

C.3. Símbolo de Levi-Civita

Definición

$$\epsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{cuando } (i, j, k) = (1, 2, 3); (2, 3, 1); (3, 1, 2) \\ -1 & \text{cuando } (i, j, k) = (3, 2, 1); (2, 1, 3); (1, 3, 2) \\ 0 & \text{si se repite algún índice } i, j, k \end{cases} \quad (\text{C.17})$$

Propiedades

$$\epsilon_{ijk} \epsilon_{ilm} = \delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl} \quad (\text{C.18})$$

$$\epsilon_{ijk} \epsilon_{ijl} = 2\delta_{kl} \quad (\text{C.19})$$

$$\epsilon_{ijk} \epsilon_{ijk} = 6 \quad (\text{C.20})$$

$$\epsilon_{ijk} = \frac{1}{2}(i-j)(j-k)(k-i) \quad (\text{C.21})$$

$$\delta_{ij} \epsilon_{ijk} = 0 \quad (\text{C.22})$$

$$\epsilon_{ijk} S_{jk} = 0 \quad \text{Para todo S simétrico: } S_{ij} = S_{ji} \quad (\text{C.23})$$

C.4. Identidades vectoriales

$$\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \mathbf{B} \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{A}) \quad (\text{C.24})$$

$$\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C})\mathbf{B} - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{B})\mathbf{C} \quad (\text{C.25})$$

$$\mathbf{A} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) + \mathbf{B} \times (\mathbf{C} \times \mathbf{A}) + \mathbf{C} \times (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = 0 \quad (\text{C.26})$$

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{D}) = \mathbf{A} \cdot [\mathbf{B} \times (\mathbf{C} \times \mathbf{D})] \quad (\text{C.27})$$

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{D}) = (\mathbf{A} \cdot \mathbf{C})(\mathbf{B} \cdot \mathbf{D}) - (\mathbf{A} \cdot \mathbf{D})(\mathbf{B} \cdot \mathbf{C}) \quad (\text{C.28})$$

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \times (\mathbf{C} \times \mathbf{D}) = [(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{D}]\mathbf{C} - [(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C}]\mathbf{D} \quad (\text{C.29})$$

C.5. Identidades diferenciales

$$\nabla(\phi\psi) = \phi\nabla\psi + \psi\nabla\phi \quad (\text{C.30})$$

$$\nabla \cdot (\phi\mathbf{A}) = \mathbf{A} \cdot \nabla\phi + \phi\nabla \cdot \mathbf{A} \quad (\text{C.31})$$

$$\nabla \times (\phi\mathbf{A}) = \phi\nabla \times \mathbf{A} - \mathbf{A} \times \nabla\phi \quad (\text{C.32})$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = \mathbf{B} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) - \mathbf{A} \cdot (\nabla \times \mathbf{B}) \quad (\text{C.33})$$

$$\nabla \times (\mathbf{A} \times \mathbf{B}) = \mathbf{A}(\nabla \cdot \mathbf{B}) - \mathbf{B}(\nabla \cdot \mathbf{A}) + (\mathbf{B} \cdot \nabla)\mathbf{A} - (\mathbf{A} \cdot \nabla)\mathbf{B} \quad (\text{C.34})$$

$$\nabla(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \times (\nabla \times \mathbf{B}) + \mathbf{B} \times (\nabla \times \mathbf{A}) + (\mathbf{B} \cdot \nabla)\mathbf{A} + (\mathbf{A} \cdot \nabla)\mathbf{B} \quad (\text{C.35})$$

$$\nabla \times (\nabla\phi) = 0 \quad (\text{C.36})$$

$$\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) = 0 \quad (\text{C.37})$$

Casos particulares

$$\nabla(r) = \mathbf{r}/r \quad (\text{C.38})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{r} = 3 \quad (\text{C.39})$$

$$\nabla \times \mathbf{r} = 0 \quad (\text{C.40})$$

$$\nabla \times \hat{\mathbf{r}} = 0 \quad (\text{C.41})$$

$$\nabla(1/r) = -\mathbf{r}/r^3 \quad (\text{C.42})$$

$$\nabla \cdot (\mathbf{r}/r^3) = 4\pi\delta(\mathbf{r}) \quad (\text{C.43})$$

$$\nabla^2(1/r) = -4\pi\delta(\mathbf{r}) \quad (\text{C.44})$$

$$\nabla \cdot (\hat{\mathbf{r}}) = 2/r \quad (\text{C.45})$$

$$(\mathbf{a} \cdot \nabla)\hat{\mathbf{r}} = [\mathbf{a} - \hat{\mathbf{r}}(\mathbf{a} \cdot \hat{\mathbf{r}})]/r \equiv \mathbf{a}_\perp/r \quad (\text{C.46})$$

C.6. Coordenadas cartesianas: $(x, y, z) \rightarrow (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$

$$\nabla\psi = \left(\hat{x} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{y} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{z} \frac{\partial}{\partial z} \right) \psi \quad (\text{C.47})$$

$$\nabla^2\psi = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi \quad (\text{C.48})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{\partial}{\partial x} A_x + \frac{\partial}{\partial y} A_y + \frac{\partial}{\partial z} A_z \quad (\text{C.49})$$

$$\nabla \times \mathbf{A} = \hat{x} \left(\frac{\partial}{\partial y} A_z - \frac{\partial}{\partial z} A_y \right) + \hat{y} \left(\frac{\partial}{\partial z} A_x - \frac{\partial}{\partial x} A_z \right) + \hat{z} \left(\frac{\partial}{\partial x} A_y - \frac{\partial}{\partial y} A_x \right) \quad (\text{C.50})$$

C.7. Coordenadas cilíndricas: $(\rho, \phi, z) \rightarrow (\hat{\rho}, \hat{\phi}, \hat{z})$

$$\nabla\psi = \left(\hat{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \hat{\phi} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} + \hat{z} \frac{\partial}{\partial z} \right) \psi \quad (\text{C.51})$$

$$\nabla^2\psi = \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi \quad (\text{C.52})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho A_\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} (A_\phi) + \frac{\partial}{\partial z} A_z \quad (\text{C.53})$$

$$\nabla \times \mathbf{A} = \left(\hat{\rho} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} - \hat{\phi} \frac{\partial}{\partial \rho} \right) A_z + \frac{1}{\rho} \left(\hat{z} \frac{\partial}{\partial \rho} - \hat{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \right) (\rho A_\phi) + \left(\hat{\phi} \frac{\partial}{\partial z} - \hat{z} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) A_\rho \quad (\text{C.54})$$

C.8. Coordenadas esféricas: $(r, \theta, \phi) \rightarrow (\hat{r}, \hat{\theta}, \hat{\phi})$

$$\nabla\psi = \left(\hat{r} \frac{\partial}{\partial r} + \hat{\theta} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} + \hat{\phi} \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \psi \quad (\text{C.55})$$

$$\nabla^2\psi = \left[\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \right] \psi \quad (\text{C.56})$$

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 A_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta A_\theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} (A_\phi) \quad (\text{C.57})$$

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{A} = & \frac{\hat{r}}{r \sin \theta} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} (\sin \theta A_\phi) - \frac{\partial A_\theta}{\partial \phi} \right] + \frac{\hat{\theta}}{r} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial A_r}{\partial \phi} - \frac{\partial}{\partial r} (r A_\phi) \right] + \\ & \frac{\hat{\phi}}{r} \left[\frac{\partial}{\partial r} (r A_\theta) - \frac{\partial A_r}{\partial \theta} \right] \end{aligned} \quad (\text{C.58})$$

Apéndice D

Funciones especiales

D.1. Polinomios de Legendre

Los polinomios de Legendre son solución de:

$$\left[(1-x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + l(l+1) \right] P_l(x) = 0, \quad (\text{D.1})$$

y tienen por función generatriz

$$\frac{1}{\sqrt{1-2xt+t^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} P_l(x)t^l. \quad (\text{D.2})$$

De aquí se obtiene que (suponiendo $\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}' = rr'u$)

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{r_{>}} \sum_{l=0}^{\infty} P_l(u) \left(\frac{r_{<}}{r_{>}} \right)^l \quad (\text{D.3})$$

Ortonormalidad

$$\int_{-1}^{+1} P_l(u)P_{l'}(u)du = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'} \quad (\text{D.4})$$

Cerradura:

$$\frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)P_l(u)P_l(u') = \delta(u-u') \quad (\text{D.5})$$

Recurrencias

$$(2l + 1)uP_l - (l + 1)P_{l+1} - lP_{l-1} = 0 \quad (\text{D.6})$$

Casos particulares

$$\begin{aligned} P_l(1) &= 1 \\ P_l(-1) &= (-1)^l \\ \\ P_0(u) &= 1 \\ P_1(u) &= u \\ P_2(u) &= (3u^2 - 1)/2 \\ P_3(u) &= (5u^3 - 3u)/2 \\ P_4(u) &= (35u^4 - 30u + 3)/8 \end{aligned}$$

D.2. Funciones asociadas de Legendre

Las funciones asociadas de Legendre son:

$$P_l^m(x) = (1 - x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) \quad m = 0, 1, 2, \dots, l \quad (\text{D.7})$$

Para $m < 0$ se define

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(l - m)!}{(l + m)!} P_l^m(x) \quad (\text{D.8})$$

Ecuación diferencial asociada:

$$\left[(1 - x^2) \frac{d^2}{dx^2} - 2x \frac{d}{dx} + l(l + 1) - \frac{m^2}{1 - x^2} \right] P_l^m(x) = 0 \quad (\text{D.9})$$

Función generatriz:

$$(2m - 1)!! (1 - x^2)^{m/2} \frac{t^m}{(1 - 2xt + t^2)^{m+1/2}} = \sum_{l=m}^{\infty} P_l^m(x) t^l \quad (\text{D.10})$$

donde $(2m - 1)!! = 1 \times 3 \times 5 \times \dots \times (2m - 1)$

Ortonormalidad

$$\int_{-1}^{+1} P_l^m(u) P_l^m(u) du = \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'} \quad (\text{D.11})$$

Recurrencias

$$(2l+1)uP_l^m - (l-m+1)P_{l+1}^m - (l+m)P_{l-1}^m = 0 \quad (\text{D.12})$$

Casos particulares

$$P_l^m(1) = P_l^m(-1) = 1 \quad m \neq 0$$

$$P_l^m(0) = \begin{cases} 0 & \text{para } (1-m)=2s \text{ par} \\ (-)^s \frac{(2s+2m)!}{2^l s!(s+m)!} & \text{para } (1-m)=2s+1 \text{ impar} \end{cases}$$

Casos $l=1,2$:

$$P_l^0(u) = P_l(x)$$

$$P_l^l(u) = (2l-1)!!(1-x^2)^{1/2}$$

$$P_0^0 = 0$$

$$P_1^1(u) = \sqrt{1-x^2}$$

$$P_2^1(u) = 3u\sqrt{1-x^2}$$

$$P_2^2(u) = 3(1-x^2)$$

$$P_3^1(u) = (3/2)\sqrt{1-x^2}(5x^2-1)$$

$$P_3^2(u) = 15x(1-x^2)$$

$$P_3^3(u) = 15\sqrt{1-x^2}$$

D.3. Funciones esféricas de Bessel

Las funciones de Bessel f_l (regular e irregular) son solución de:

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + \frac{2}{z} \frac{d}{dz} + \left(1 - \frac{l(l+1)}{z^2} \right) \right] f_l(x) = 0 \quad (\text{D.13})$$

i) La función regular de Bessel e irregular (Newman) en términos de las funciones de Bessel ordinarias:

$$j_l(z) = \left(\frac{\pi}{2z}\right)^{1/2} J_{l+1/2}(z) \quad (\text{D.14})$$

$$n_l(z) = (-)^{l+1} \left(\frac{\pi}{2z}\right)^{1/2} J_{-l-1/2}(z) \quad (\text{D.15})$$

ii) Las funciones esféricas de Hankel de primer ($h_l^{(1)} \equiv h_l^{(+)}$) y segundo ($h_l^{(2)} \equiv h_l^{(-)}$) orden:

$$h_l^{(\pm)}(z) = j_l(z) \pm in_l(z) \quad (\text{D.16})$$

Casos particulares

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z} \quad (\text{D.17})$$

$$j_1(z) = \frac{\sin z}{z^2} - \frac{\cos z}{z} \quad (\text{D.18})$$

$$j_2(z) = \left(\frac{3}{z^3} - \frac{1}{z}\right) \sin z - \frac{3}{z^2} \cos z \quad (\text{D.19})$$

$$n_0(z) = -\frac{\cos z}{z} \quad (\text{D.20})$$

$$n_1(z) = -\frac{\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z} \quad (\text{D.21})$$

$$n_2(z) = -\left(\frac{3}{z^3} - \frac{1}{z}\right) \cos z - \frac{3}{z^2} \sin z \quad (\text{D.22})$$

Comportamientos asintóticos:

$$j_l(z) \rightarrow \frac{z^l}{(2l+1)!!} \quad z \rightarrow 0 \quad (\text{D.23})$$

$$n_l(z) \rightarrow \frac{(2l-1)!!}{z^{l+1}} \quad z \rightarrow 0 \quad (\text{D.24})$$

$$j_l(z) \rightarrow \frac{1}{z} \sin(z - l\pi/2) \quad z \gg l(l+1) \quad z \text{ real} \quad (\text{D.25})$$

$$n_l(z) \rightarrow -\frac{1}{z} \cos(z - l\pi/2) \quad z \gg l(l+1) \quad z \text{ real} \quad (\text{D.26})$$

$$h_l^{(\pm)}(z) \rightarrow \frac{\mp i}{z} \exp \pm i(z - l\pi/2) \quad (\text{D.27})$$

Recurrencia

$$f_{l-1}(z) + f_{l+1}(z) = \frac{2l+1}{z} f_l(z) = 0 \quad (\text{D.28})$$

Derivada

$$\frac{d}{dz} f_l(z) = \frac{1}{z} f_l(z) - f_{l+1} \quad (\text{D.29})$$

Ortogonalidad:

$$\int_0^\infty r^2 dr j_l(k'r) j_l(kr) = \frac{\pi}{2k^2} \delta(k' - k) \quad (\text{D.30})$$

Relación con ondas planas:

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 4\pi \sum_{l,m} i^l j_l(kr) Y_l^{m*}(\hat{\mathbf{k}}) Y_l^m(\hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{D.31})$$

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{r}}) \quad (\text{D.32})$$

D.4. Funciones esféricas armónicas

Notación: $Y_l^m(\theta, \phi) \equiv Y_l^m(\hat{\mathbf{x}})$, donde (θ, ϕ) denotan los ángulos esféricos de $\hat{\mathbf{r}}$ con respecto a un eje azimutal $\hat{\mathbf{n}}$. Se entiende entonces $\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{x}} = \cos(\theta)$.

Autovalores:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{D.33})$$

$$\hat{L}_z Y_l^m = m\hbar Y_l^m \quad m = -l \dots 0 \dots l \quad (\text{D.34})$$

Operadores en representación de coordenadas:

$$\hat{L}_x = +i\hbar \left(\sin\phi \frac{\partial}{\partial\theta} + \cot\theta \cos\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \quad (\text{D.35})$$

$$\hat{L}_y = -i\hbar \left(\cos\phi \frac{\partial}{\partial\theta} - \cot\theta \sin\phi \frac{\partial}{\partial\phi} \right) \quad (\text{D.36})$$

$$\hat{L}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial\phi} \quad (\text{D.37})$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right] \quad (\text{D.38})$$

$$L_{\pm} \equiv L_x \pm iL_y = \hbar e^{\pm i\phi} \left[\pm \frac{\partial}{\partial\theta} + i \cot\theta \frac{\partial}{\partial\phi} \right] \quad (\text{D.39})$$

Forma explícita de los esféricos armónicos

$$Y_l^m(\theta, \phi) = (-)^m \left[\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad m \geq 0 \quad (\text{D.40})$$

$$Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-)^m Y_l^{m*}(\theta, \phi) \quad (\text{D.41})$$

Índice m negativo:

$$Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-)^m Y_l^{m*}(\theta, \phi) \quad (\text{D.42})$$

Simetría:

$$\begin{aligned} \hat{x} \rightarrow -\hat{x} &\Rightarrow (\theta, \phi) \rightarrow (\pi - \theta, \pi + \phi) \\ &\Rightarrow Y_l^m(\pi - \theta, \pi + \phi) = (-)^l Y_l^m(\theta, \phi) \end{aligned}$$

Casos particulares:

$$Y_l^0(\theta, \phi) = \left(\frac{2l+1}{4\pi} \right)^{1/2} P_l(\cos \theta) \quad (\text{D.43})$$

$$Y_l^l(\theta, \phi) = (-)^l \left[\frac{(2l+1)(2l)!}{4\pi 2^{2l}(l!)^2} \right]^{1/2} \sin^l \theta e^{il\phi} \quad (\text{D.44})$$

Recurrencia:

$$L_{\pm} Y_l^m = \hbar[l(l+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} Y_{l, m \pm 1} \quad (\text{D.45})$$

$$L_{+} Y_l^l = 0 \quad (\text{D.46})$$

$$L_{-} Y_l^{-l} = 0 \quad (\text{D.47})$$

Ortonormalidad ($d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$) y completitud:

$$\int Y_l^{m'*}(\theta, \phi) Y_l^m(\theta, \phi) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (\text{D.48})$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} Y_l^{m*}(\hat{x}) Y_l^m(\hat{x}') = \delta(\hat{x} - \hat{x}') \quad (\text{D.49})$$

Relación con polinomios de Legendre (teorema de suma):

$$\sum_{m=-l}^{+l} Y_l^{m*}(\hat{x}') Y_l^m(\hat{x}) = \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\hat{x}' \cdot \hat{x}) \quad (\text{D.50})$$

Esféricos para $l = 0, 1, 2$ y 3 :

$$Y_0^0(\theta\phi) = \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2} \quad (\text{D.51})$$

$$Y_1^0(\theta\phi) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta \quad (\text{D.52})$$

$$Y_1^{\pm 1}(\theta\phi) = \mp \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta e^{\pm i\phi} \quad (\text{D.53})$$

$$Y_2^0(\theta\phi) = \left(\frac{5}{16\pi}\right)^{1/2} (3 \cos^2 \theta - 1) \quad (\text{D.54})$$

$$Y_2^{\pm 1}(\theta\phi) = \mp \left(\frac{15}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi} \quad (\text{D.55})$$

$$Y_2^{\pm 2}(\theta\phi) = \left(\frac{15}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi} \quad (\text{D.56})$$

$$Y_3^0(\theta\phi) = \left(\frac{7}{16\pi}\right)^{1/2} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta) \quad (\text{D.57})$$

$$Y_3^{\pm 1}(\theta\phi) = \mp \left(\frac{21}{64\pi}\right)^{1/2} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\phi} \quad (\text{D.58})$$

$$Y_3^{\pm 2}(\theta\phi) = \left(\frac{105}{32\pi}\right)^{1/2} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\phi} \quad (\text{D.59})$$

$$Y_3^{\pm 3}(\theta\phi) = \mp \left(\frac{35}{64\pi}\right)^{1/2} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\phi} \quad (\text{D.60})$$

Relación con la función de Green (Poisson)

$$\frac{1}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} = 4\pi \sum_{l,m} \frac{1}{2l+1} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} Y_l^{m*}(\hat{r}') Y_l^m(\hat{r}) \quad (\text{D.61})$$

Índice de autores

Balmer, J. J., 22
Bohr, N., 23
Born, M., 37

Compton, A. H., 25

Davison, C. J., 30
de Broglie, L., 30
Dirac, P., 83

Ehrenfest, P., 114
Einstein, A., 20

Geiger, H., 22
Germer, L. H., 30

Hallwachs, W., 19
Hamilton, 116
Heisenberg, W., 134
Hertz, H., 19

Jacobi, 116

Klein-Gordon, 34

Landau, L., 151
Lenard, P., 20

Marsden, E., 22
Maxwell, J. C., 19
Millikan, R. A., 21

Nagaoka, H., 23

Planck, M., 17
Poisson, Siméon-Denis, 114

Rayleigh, Lord, 17
Rutherford, E., 22, 23
Rydberg, J., 22

Schrödinger, E., 34

Thomson, J. J., 19

Wien, W., 17

Indice de materias

- Antilinealidad, 80
- Atomo de hidrógeno
 - autofunciones, 146
 - espectro, 22
- Autoenergías, 53
- Autofunciones, 53
- Autovectores, 88

- Bandas
 - estructura de, 53
- Bessel
 - funciones esféricas de, 197
- Bohr
 - modelo de, 23
- Bosones, 174
- Bra, 83
- Bremsstrahlung, 13

- Carga
 - independencia de, 135
- Cargas
 - simetría, 135
- Completitud, 83, 84, 89, 90, 92, 113
- Compton
 - efecto, 26
 - longitud de onda, 27
 - longitud de onda reducida, 27
- Conducción
 - electrones de, 179
- Continuidad
 - ecuación de, 115
- Copenhagen
 - interpretación de, 106
 - escuela de, 106
- Cuerpo negro, 16

- de Broglie
 - hipótesis, 30
 - longitud de onda, 30
- Degeneración
 - átomo de hidrógeno, 149, 150
- Delta de Dirac, 40
 - representaciones, 40
- Derivada
 - convectiva, 116
 - de Lagrange, 116
 - de Stokes, 116
- Dirac
 - delta, 91
 - delta de, 90
 - notación de, 83
- Dualidad, 30, 34

- Efecto fotoeléctrico, 20
- Efecto túnel, 69
- Ehrenfest
 - Teorema de, 114
- Esféricos armónicos, 143, 199
 - ortogonalidad, 145
- Espacio dual, 81
- Espacios vectoriales, 79
- Estado fundamental, 57
- Estados de scattering, 53
- Estados ligados, 53, 57
- Estados no ligados, 53
- Estrella de neutrones, 179
- Estructura fina, 121
 - constante de, 11, 124
- Evolución temporal, 105

- Factor g, 124
- Fase
 - corrimiento de, 62
- Fermi
 - gas de, 177
 - momentum de, 178
- Fermiones, 174
- Fotón, 20, 22, 30
- Fourier
 - espacio de, 42
- Función de onda
 - propiedades, 54
- Función impropia, 40
- Generador, 86

- evolución temporal, 102
- rotaciones, 166
- translaciones, 103
- Hamilton-Jacobi
 - ecuación, 116
- Heisenberg
 - cuadro de, 104
 - principio de incertidumbre, 111
 - principio de incertidumbre de, 32
- Helio líquido, 10
- Hermiticidad, 39
- Hidrógeno
 - átomo, 9, 22, 25, 36
 - espectro, 149
 - espectro de emisión, 23
- Hilbert
 - Espacio de, 82
- Invariancia de gauge, 153
- Isospín, 134, 158
 - simetría, 135
- Ket, 83
- Kumer, ecuación de, 148
- Larmor
 - frecuencia de, 128, 129, 133
- Lectura activa, 6
- Legendre
 - funciones asociadas de, 196
 - polinomios de, 195
- Levi-Civita
 - símbolo, 190
- Longitud de onda, 29
- Métodos variacionales, 167
- Magnetón
 - de Bohr, 124
 - nuclear, 125
- Mecánica cuántica
 - postulados, 106
- Medición, 107
- Medición simultánea, 112
- Modelo óptico, 39
- Momento magnético, 123
- Momentum angular, 134
 - álgebra, 125, 134, 136
 - adición, 158
 - diagonalización, 137
 - orbital, 141
- Número de onda, 29
- Número de onda, vector, 29
- Observable, 107
- Observables compatibles, 112
- Onda
 - número de, 57
- Onda plana, 31
- Operador
 - adjunto, 84
 - auto-adjunto, 85
 - de bajada, 97
 - de subida, 97
 - hermítico, 85, 88
- Ortogonalidad, 89
- Oscilador
 - autofunciones, 98
- Oscilador armónico, 72
 - espectro, 75
 - función de onda, 77
 - representación de energía, 95
- Paridad, 57, 59, 75, 145
- Partículas indistinguibles, 172
- Pauli
 - matrices, 125, 141
 - matrices de, 122
 - principio de, 174
- Planck
 - constante de, 7, 19
 - constante reducida de, 7
 - ley de radiación, 18
- Poisson
 - paréntesis, 114
- Polinomio característico, 119
- Presión cuántica, 116
- Principio de correspondencia, 113
- Probabilidad
 - amplitud, 37
 - corriente, 37

- densidad, 37
- ecuación de continuidad, 37
- Producto
 - escalar, 80
 - externo, 87
 - interno, 80
- Rayleigh
 - ley de radiación de, 17
- Rayos X, 13, 25, 30
- Razón giromagnética, 123
- Regla de suma de Thomas-Reiche-Kuhn, 106
- Representación
 - de coordenadas, 45, 92
 - de momentum, 42, 90
- Riesz
 - teorema de, 82
- Rydberg
 - constante de, 22
- Scatteing
 - longitud de, 61
- Scattering
 - Estados de, 57
- Schrödinger
 - ecuación de, 34, 35, 94
- Sincrotrón
 - frecuencia de, 133
- Sistema Gaussiano, 10
- Spin, 134
 - electrón, 121
 - precesión, 128
- Spinor, 126
- Superposición, 31
- Transformaciones unitarias, 85
- UV, radiación, 13
- Valor de expectación, 44, 45
- Wien
 - ley de desplazamiento de, 17